

# مدل سازی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت سیمان - نانولوله های کربنی (Cement-CNT) با روش میکرومکانیکال

مهرداد خاک بیز\*<sup>۱</sup>، حسن احمدی<sup>۲</sup>، مهدی امیدی<sup>۳</sup>

۱- استادیار، عضو هیات علمی، دانشکده علوم و فنون نوین، گروه علوم زیستی، دانشگاه تهران، تهران، ایران

۲- استادیار، عضو هیات علمی، گروه عمران، واحد رودهن، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

۳- مربی، گروه مواد، واحد نجف آباد، دانشگاه آزاد اسلامی، نجف آباد، ایران

\*khakbiz@ut.ac.ir

(تاریخ دریافت: ۹۳/۰۴/۲۷، تاریخ پذیرش: ۹۴/۰۶/۱۲)

## چکیده

در این تحقیق خواص مکانیکی نانوکامپوزیت پایه سیمانی تقویت شده با نانولوله های کربنی با روش میکرومکانیکال شبیه سازی شد. اثر پارامترهای مختلف مانند مدول سیمان، قطر داخلی نانولوله ها، قطر خارجی نانولوله ها، طول نانولوله ها، شکل المان انتخاب شده بر روی نتایج بدست آمده مورد بررسی قرار گرفت. در ادامه به منظور معتبر سازی این مدل، نتایج بدست آمده از مدل با نتایج تجربی محققان مختلف مقایسه شده است. نتایج نشان داد که با افزایش نسبت  $L/D$ ، قطر خارجی نانولوله ها و طول نانولوله ها، مدول بدست آمده برای نانوکامپوزیت افزایش می یابد. با این وجود قطر داخلی نانولوله ها چندان تاثیری بر روی مدول یانگ ندارد. مشاهده شد که نمودارهای مدول یانگ  $E_c$  بر حسب درصد حجمی نانولوله ها به صورت خطی می باشد. مقایسه نتایج تجربی با نتایج پیش بینی شده نشان داد که میزان  $E$  پیش بینی شده توسط مدل در بسیاری از موارد با نتایج تجربی بدست آمده توسط محققان مختلف نزدیک بوده و این نشان میدهد که مدل ارائه شده به خوبی می تواند خواص مکانیکی نانوکامپوزیت سیمان-نانولوله کربنی را پیش بینی نماید در حالی که مدل های رایج که برای پیش بینی خواص ماکروکامپوزیت های استفاده می شود از دقت کافی برای پیش بینی خواص نانوکامپوزیت پایه سیمانی برخوردار نیستند.

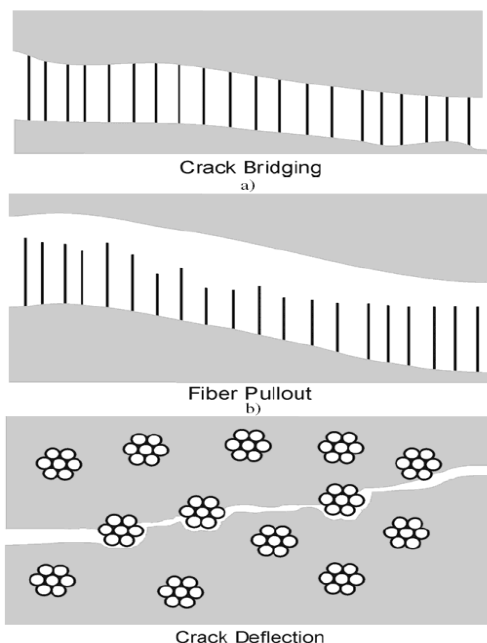
## واژه های کلیدی:

نانوکامپوزیت، نانولوله کربنی، مدل سازی، میکرومکانیکال.

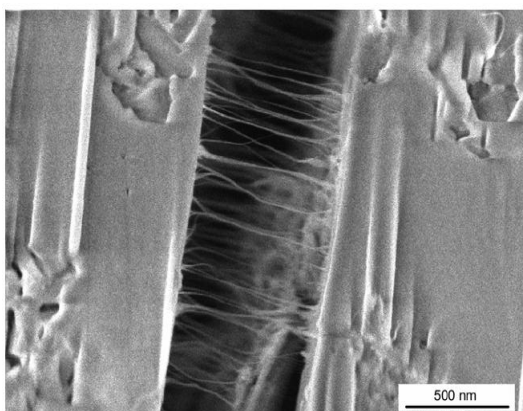
## ۱- مقدمه

علاوه بر این نانولوله های کربنی دارای نسبت طول به عرض ۱۰۰۰ یا بیشتر می باشند. این خواص منحصر به فرد، منجر به تحقیقات فراوانی بر روی کامپوزیت های با تقویت کننده CNT شده است. بیشتر این تحقیقات بر روی مواد پلیمری متمرکز شده است و سرامیک ها و فلزات در رده های بعدی قرار دارند [۱].

نانولوله های کربنی دارای خواص منحصر به فردی هستند که آنها را به عنوان مواد تقویت کننده بسیار ایده ال می کند. نانولوله های کربنی تک جداره دارای مدول الاستیسیته ۱TPa بوده و استحکام تسلیم آنها بین ۲۰ تا ۶۰ GPa عنوان شده است و کرنش الاستیک آنها بیشتر از ۱۰٪ است.



شکل (۱): مکانیزم های استحکام دهی نانو کامپوزیت ها توسط نانولوله های کربنی



شکل (۲): پدیده پل زدن بر روی ترک توسط نانولوله های کربنی [۳]

بر اساس اطلاعات نویسنده اگرچه مقالات متعددی در زمینه مدل سازی خواص مکانیکی نانو کامپوزیت های پلیمری تقویت شده با نانولوله های کربنی ارائه شده است. با این وجود هنوز تحقیقات در زمینه این نوع شبیه سازی برای نانو کامپوزیت های پایه سیمانی تقویت شده با نانولوله ها بسیار اندک است [۸-۱۰]. در این پژوهش از یک روش مدل سازی میکرو مکانیکال به منظور تخمین خواص مکانیکی نانو کامپوزیت سیمان- نانولوله استفاده شده است. مدول یانگ و استحکام نانو کامپوزیت توسط این

هم اکنون کار برای استفاده از نانوتکنولوژی برای مواد ساختمانی آغاز شده است [۲-۳]. روشهای متعددی وجود دارد که به این هدف منجر می شود که اضافه نمودن مواد نانوذرات به سیمان یکی از این موارد می باشد. این نانوذرات میزان خلل و فرج را کم نموده و یا اینکه می تواند بر روی واکنش هیدراتاسیون سیمان اثر گذارد. این نانوذرات شامل  $\text{TiO}_2$ ،  $\text{SiO}_2$ ،  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ،  $\text{Al}_2\text{O}_3$  و  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  می باشند با این وجود کامپوزیت های سیمانی تقویت شده با CNT ها هنوز در اول راه خود هستند و مقالات کمی با هدف تولید نانو کامپوزیت های پایه سیمانی تقویت شده با نانولوله های کربنی ارائه شده است [۳-۷].

این امر ممکن است در ابتدا به دلیل مشکلات فرایند تولید و کمبود دانش از مکانیزم های افزایش استحکام که در اثر افزودن نانولوله ها ایجاد می شود، باشد. نتایج اولیه تحقیقات بر روی میکروساختار این سیستم ها یک پیشرفت سریع بر روی کامپوزیت های سیمان - نانولوله های کربنی را نوید می دهد [۴-۵]. در واقع نانولوله های کربنی به سه طریق می توانند موجب تقویت زمینه شوند (شکل ۱).

۱- نانولوله ها می توانند سبب پل زدن بین ترکهای ایجاد شده در زمینه شوند. شکل ۲ نمونه ای از پدیده پل زدن در یک نمونه واقعی از نانو کامپوزیت سیمان- نانولوله های کربنی را نشان می دهد.

۲- در هنگام رشد ترک، این نانولوله ها باید از زمینه جدا شوند و یا کشیده شوند که این موضوع خود سبب افزایش استحکام می شود.

۳- در مکانیزم سوم نانولوله های کربنی سبب منحرف شدن جهت ترک می شوند که بدین روش از سرعت رشد ترک می کاهد.

در این روابط  $L$  و  $D$  به ترتیب طول و قطر نانولوله ها می باشد. بر این اساس تنش می تواند طبق رابطه زیر تعریف شود:

$$\sigma_c = \alpha\beta\sigma_f V_f + (1-V_f)\sigma_m \quad (6)$$

که در این رابطه  $\sigma_c$  تنش کامپوزیت و  $\sigma_m$  تنش زمینه می باشد و سایر روابط در بالا تعریف شد.

### ۳-۲ مدل Halpin—Tsai

رابطه Halpin—Tsai به صورت زیر ارائه می شود:

$$E_l = \left[ \frac{1 + 2\left(\frac{L_f}{d_f}\right)\eta_L V_f}{1 - \eta_L V_f} \right] E_m \quad (7)$$

که در این رابطه  $\eta_L$  بر اساس معادله زیر تعریف می شود:

$$\eta_L = \frac{\left(\frac{E_f}{E_m}\right) - 1}{\left(\frac{E_f}{E_m}\right) + 2\left(\frac{L_f}{d_f}\right)} \quad (8)$$

که در این رابطه  $L_f$  طول الیاف و  $d_f$  قطر الیاف می باشد.

### ۴-۲ مدل میکرومکانیکال (RVE)

این مدل توسط Chen و همکاران [۱۰] برای اولین بار ارائه شد و در حال حاضر برای شبیه سازی خواص نانو کامپوزیت های پایه پلیمری بسیار استفاده می شود [۱۱-۱۲]. در این مدل در واقع یک المان RVE در اطراف نانولوله در نظر گرفته شده (شکل ۳) و براساس ثابت ماندن کرنش در طول نانولوله و زمینه بدست می آید و به صورت زیر ارائه می شود:

روش تخمین زده شده و در نهایت به منظور معتبرسازی مدل ارائه شده، نتایج بدست آمده با نتایج تجربی مورد مقایسه قرار گرفته است.

## ۲- مروری بر روشهای مدل سازی

### ۱-۲ قانون مخلوط ها

قانون مخلوط ها می تواند توسط رابطه زیر ارائه شود:

$$E = E_f V_f + E_m (1-V_f) \quad (1)$$

که در این رابطه  $E_f$  و  $V_f$  به ترتیب مدول یانگ و درصد حجمی نانولوله ها و  $E_m$  مدول یانگ زمینه می باشد. با این وجود این رابطه برای نانو کامپوزیت ها چندان کاربردی ندارد و معمولاً حد بالای خواص را پیش بینی می کند. مدول یانگ در جهت عرضی نیز به صورت زیر بدست می آید:

$$E_{trans} = \left[ \frac{V_f}{E_f} + \frac{(1-V_f)}{E_m} \right]^{-1} \quad (2)$$

که در این رابطه  $E_{trans}$  معادل مدول یانگ در جهت عرضی می باشد.

### ۲-۲ قانون مخلوطهای اصلاح شده

رابطه اصلاح شده قانون مخلوط ها به صورت زیر می باشد:

$$E = \alpha\beta E_f V_f + E_m (1-V_f) \quad (3)$$

در این رابطه ثابت  $\beta = 0.2$  در نظر گرفته می شود و ثابت  $\alpha$  طبق رابطه زیر تعریف می شود:

$$\alpha = 1 - \left[ \frac{\tanh\left(\delta \frac{L}{D}\right)}{\delta \frac{L}{D}} \right] \quad (4)$$

که در رابطه (۴)  $\delta$  طبق رابطه زیر تعریف می شود:

$$\delta = \sqrt{\frac{-3E_m}{2E_f \ln V_f}} \quad (5)$$

$$V^t = \frac{\pi(r_0^2 - r_i^2)}{\pi(R^2 - r_i^2)} = \frac{(r_0^2 - r_i^2)}{(R^2 - r_i^2)} \quad (15)$$

در صورتی که RVE در نظر گرفته شده به صورت مکعب باشد در این صورت  $V^t$  به نحوه زیر ارائه می شود:

$$V^t = \frac{\pi(r_0^2 - r_i^2)}{4a^2 - \pi r_i^2} \quad (16)$$

در معادلات ۱۵ و ۱۶،  $r_i$  و  $r_0$  به ترتیب قطر خارجی و داخلی نانولوله ها و  $R$  برابر قطر استوانه می باشد. در صورتی که طول نانولوله ها برابر طول RVE نباشد در این حالت صورت مدول یانگ RVE طبق رابطه زیر به دست می آید:

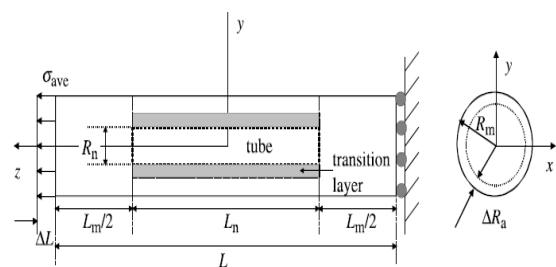
$$E_{RVE} = \left[ \frac{1}{E^m} \left( \frac{L_m}{L} \right) + \frac{1}{E^c} \left( \frac{L_n}{L} \right) \left( \frac{A}{A_c} \right) \right]^{-1} \quad (17)$$

میزان  $A$  و  $A_c$  طبق رابطه زیر تعریف می شوند

$$A = \pi(R_m - R_n) \quad (18)$$

$$A_c = \pi R_m \quad (19)$$

و مقادیر  $R_m$  و  $R_n$  نیز به همراه  $L_m$  و  $L_n$  نیز در شکل ۴ نشان داده شده اند.

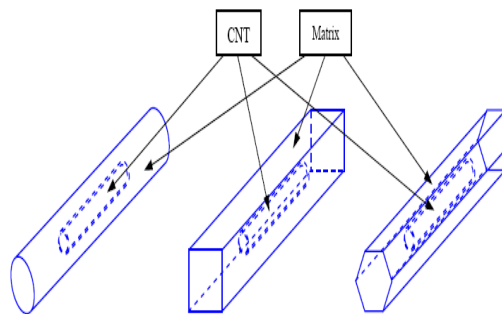


شکل (۴): ابعاد و اندازه RVE انتخاب شده شامل نانولوله های کربنی

## ۲-۵- مکانیک کلاسیک [۱۱]

در این مدل تنش برشی بین زمینه و الیاف نانولوله ها به صورت زیر تعریف می شود:

$$T_c d_i d_x = (\delta_{NT} + d \delta_{NT}) \left( \frac{d_0^2 - d_i^2}{4} \right) - \delta_{NT} \left( \frac{d_0^2 - d_i^2}{4} \right) \quad (20)$$



شکل (۳): مدل های مختلف المان انتخابی (RVE)

$$\frac{F_m}{A_m E_m} = \frac{F_{cnt}}{A_{cnt} E_{cnt}} \quad (9)$$

در این رابطه  $A_m$  و  $A_{cnt}$  به ترتیب سطح RVE و سطح نانولوله ها می باشد. میزان مدول کامپوزیت ( $E_c$ ) از رابطه زیر به دست می آید:

$$E_c = \frac{F_{total} L}{A_{eq} \Delta L} \quad (10)$$

در این رابطه  $F_{total}$  و  $A_{eq}$  طبق رابطه زیر است.

$$F_{total} = F_{cnt} + F_m \quad (11)$$

$$A_{eq} = \pi(R_m^2 - R_{cnt}^2) + \pi D_{cnt} t \quad (12)$$

که در این رابطه  $R_m$  شعاع RVE و  $R_{cnt}$  شعاع نانولوله می باشد. ولتاژ تنش کل وارد شده به کامپوزیت طبق رابطه زیر تعریف می شود:

$$\delta = \frac{P 2 L_m}{A E_m} + \frac{P L_n}{A_n E_c} \quad (13)$$

بر اساس قانون مخلوطها مدول یانگ کامپوزیت می تواند به صورت زیر تعریف شود:

$$E_c = E_f V^t + E_m (1 - V^t) \quad (14)$$

که در این رابطه  $V^t$  برابر حجم موثر نانولوله می باشد و در صورتی که المان RVE مورد نظر به صورت استوانه باشد در این صورت  $V^t$  به صورت زیر تعریف می شود:

$$E_r = \sqrt{\pi} S / 2\sqrt{A} \quad (25)$$

$$S = \frac{dp}{dh} \quad (26)$$

ارتباط بین مدول یانگ نسبت پاسون به صورت زیر تعریف می شود:

$$\frac{1}{E_r} = \frac{1-\nu^2}{E} + \frac{1-\nu_i^2}{E_i} \quad (27)$$

که در این رابطه A سطح تماس در نیروی P می باشد و به صورت زیر تعریف می شود:

$$A = 3\sqrt{3}h_p^2 \tan^2 \alpha \quad (28)$$

$$h_{\max} = h_p + h_a \quad (29)$$

$$h_a = \left\{ \frac{(\pi - 2) \cdot 2}{\pi} \right\} \frac{P_{\max}}{dp/dh} \quad (30)$$

در شکل ۵ مشخصات مربوط به نمودار تست نانوشانه گذاری و پارامترهای مربوطه نشان داده شده است.

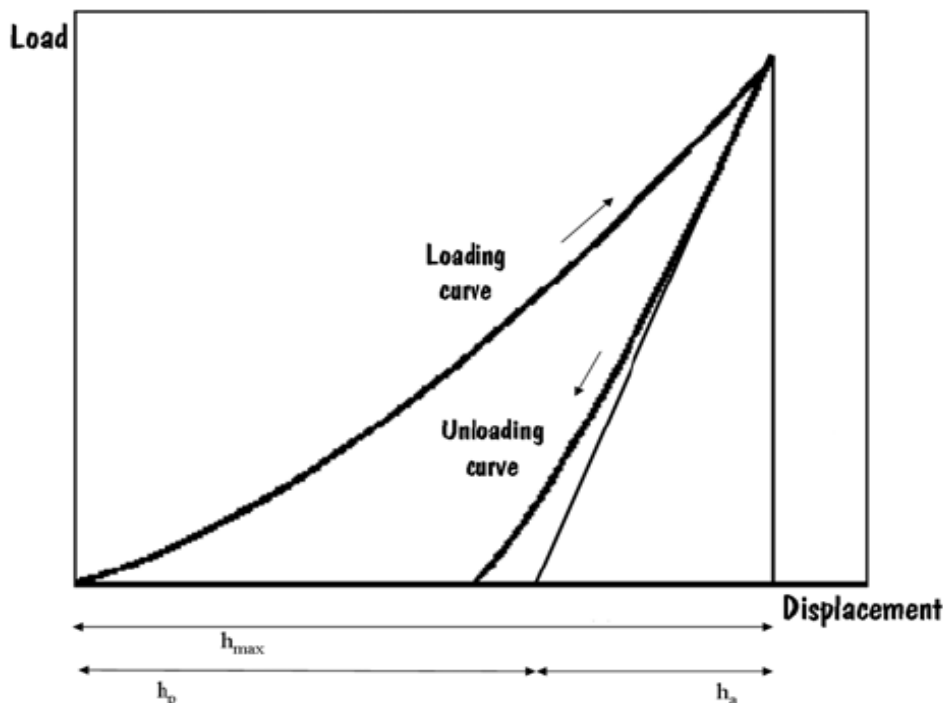
که در این رابطه  $T_{NT}$ ،  $\delta_{NT}$  به ترتیب تنش برشی بین زمینه و تقویت کننده و استحکام نانولوله بوده و  $d_x$ ،  $d_i$  و  $d_0$  به ترتیب طول نانولوله ها، قطر داخلی و خارجی نانولوله می باشد. با انتگرال گیری از معادله بالا و همچنین در نظر گرفتن طول بحرانی نانولوله های کربنی تنش برشی در مرز بین نانولوله ها به صورت زیر محاسبه می شود:

$$T_c = \sigma_{NT} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{l_c}{d_0} \right)^{-1} \left( 1 - \frac{d_i^2}{d_0^2} \right) \right] \quad (21)$$

### ۲-۶- مدل نانوشانه گذاری (Nano Indentations Test)

در مقاله ای که توسط Ibarra [۱۲] ارائه شده است مدول و سختی نانو کامپوزیت سیمان- نانولوله های کربنی توسط نانوشانه گذاری بدست آمده است. در این مدل سختی طبق رابطه زیر تعریف می شود:

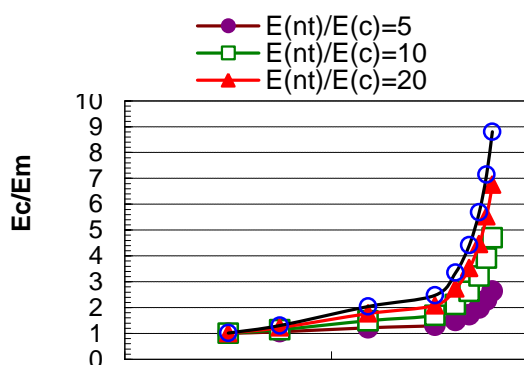
$$H = \frac{P_{\max}}{A} \quad (24)$$



شکل (۵): نمودار آزمایش نانوشانه گذاری [۱۲]

### ۳- بررسی نتایج شبیه سازی

در این بخش به نتایج بدست آمده از مدل های میکرومکانیکال و نیز مکانیک کلاسیک پرداخته می شود. اثر پارامترهای مختلفی مانند نسبت طول به قطر نانولوله ها ( $L/D$ )، درصد حجمی نانولوله ها ( $V_f$ )، قطر داخلی نانولوله ها، قطر خارجی نانولوله ها، بر روی  $E_{rve}$ ،  $E_c$  و  $T_c$  بررسی خواهد شد.



شکل (۶): اثر  $L/D$  بر روی  $E_c/E_m$

ولی افزایش  $L/D$  به بیش از این مقدار سبب کاهش شدید  $T_c$  می شود به نظر می رسد مقدار  $L/D = 15$  یک مقدار بهینه برای بدست آوردن حداکثر  $T_c$  باشد. همانطور که مشخص است  $T_c$  در واقع ماهیت تنش برشی دارد (تنش بین مرز نانولوله و زمینه سیمان)، واضح هست که هر چه طول نانولوله بیشتر باشد در این صورت تنش برشی بیشتری در مرز زمینه و نانولوله وجود خواهد داشت، از طرفی بیشتر شدن طول نانولوله ها از یک حد به بعد سبب می شود که تمرکز تنش در مرز زمینه و نانولوله ایجاد شده و از آنجا که این تمرکز تنش بر عکس تنش برشی بین نانولوله و زمینه است لذا سبب کم شدن  $T_c$  می شود و این در واقع دلیل رفتاری است که در شکل ۸ مشاهده میشود. همچنین در این شکل تاثیر  $E(nt)/E_m$  نیز بر روی این نمودار مشاهده می شود. در واقع در  $L/D$  بالا و بسیار پایین،  $E(nt)/E_m$  تاثیر چندانی بر روی میزان  $T_c/E_m$  ندارد و فقط در مقدار  $L/D$  بهینه است که با افزایش نسبت  $E(nt)/E_m$  میزان  $T_c/E_m$  به شدت افزایش می یابد.

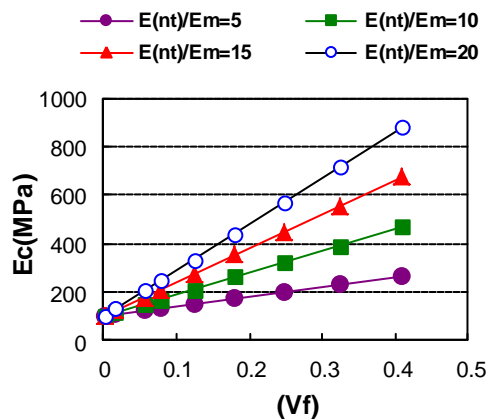
### ۳-۱- اثر طول نانولوله به قطر ( $L/D$ ) نانولوله ها

در شکل ۶ اثر نسبت  $L/D$  بر روی  $E_c/E_m$  مشاهده می شود. همانطور که این شکل نشان می دهد با افزایش  $L/D$  میزان  $E_c/E_m$  افزایش می یابد. این افزایش تا نسبت  $L/D=30$  تدریجی بوده ولی از این مقدار به بعد شدیداً افزایش می یابد به نظر می رسد نسبت  $L/D=30$  یک نسبت بحرانی برای این المان می باشد. در واقع با افزایش نسبت طول  $L/D$  حجم بیشتری از زمینه سیمان با نانولوله های کربنی پر می شود و از آنجا استحکام نانولوله ها از زمینه سیمانی بیشتر است و لذا در نهایت نسبت مدول یانگ کامپوزیت سیمانی حاوی نانولوله های کربنی به مدول یانگ زمینه سیمان ( $E_c/E_m$ ) بسیار افزایش می یابد.

در این شکل اثر نسبت مدول یانگ نانولوله به مدول یانگ زمینه ( $E_{nt}/E_m$ ) بر روی این گرافها نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود با افزایش این نسبت، نمودارها به سمت بالا انتقال پیدا می کنند. در این شکل نرخ افزایش  $E_c/E_m$  بر حسب  $L/D$  (شیب نمودارها) افزایش می یابد.

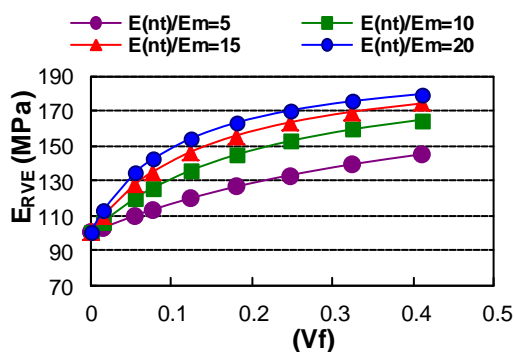
در شکل ۷ اثر  $L/D$  بر روی  $E_{rve}/E_m$  نشان داده شده است همانطور که مشاهده می شود با افزایش میزان  $L/D$  میزان  $E_{rve}/E_m$  افزایش می یابد و شدت افزایش مخصوصاً در نسبت های  $L/D$  بیش از ۳۰، تشدید می شود همچنین افزایش نسبت  $E(nt)/E_m$  سبب انتقال نمودارها به سمت بالا می شود.

در شکل ۸ اثر  $L/D$  بر روی  $T_c$  مشاهده میشود. همانطور که در این شکل نشان داده شده است در این جا دو رفتار متفاوت برای

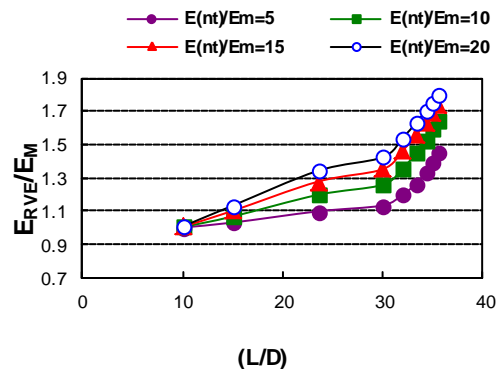


شکل (۹): اثر درصد حجمی نانولوله ها بر روی  $E_c$

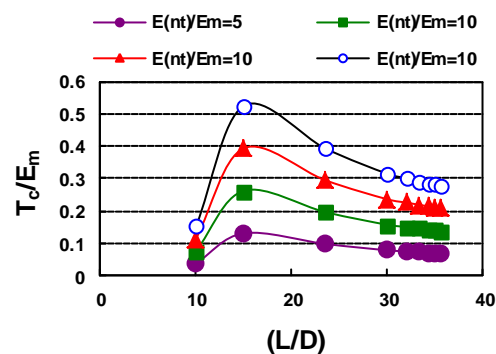
در شکل ۱۰ اثر درصد حجمی نانولوله های کربنی بر روی  $E_{rve}$  نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود نمودارهای  $E_{rve}-V_f$  بر عکس نمودار  $E_c - V_f$  به صورت منحنی بوده به طوری که با افزایش میزان  $V_f$ ،  $E_{rve}$  افزایش می یابد ولی به هر صورت شیب این منحنی ها کاهش می یابد این بدان معناست که نقش  $V_f$  بر روی ازدیاد  $E_{rve}$  در درصد های کمتر بیش از درصد های بالاتر نانولوله می باشد. در واقع در درصد های زیاد نانولوله، پدیده های آگلوموراسیون نانولوله ها پیش آمده که این امر باعث می شود تا اثر ازدیاد درصد نانولوله های کربنی بر روی مدول و استحکام کم شود. این موضوع نشان می دهد که نتایج تئوری بدست آمده در شکل ۱۰ با نتایجی که در عمل بدست می آید مطابقت دارد.



شکل (۱۰): اثر درصد حجمی نانولوله ها بر روی  $E_{rve}$



شکل (۷): اثر  $L/D$  بر روی  $E_{rve}/E_m$

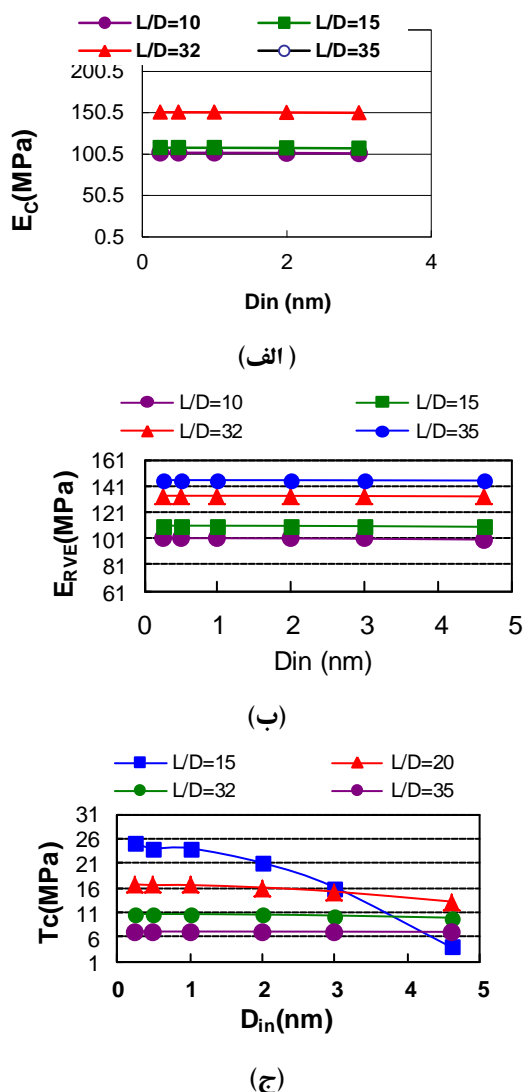


شکل (۸): اثر  $L/D$  بر روی  $T_c/E_m$

### ۲-۳- نقش درصد حجمی نانولوله های کربنی

در شکل ۹ اثر درصد حجمی  $V_f$  بر روی  $E_c$  نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود نمودار  $E_c$  بر حسب  $V_f$  خطی می باشد و هرچه نسبت  $E(nt)/E_m$  بیشتر باشد، نمودارها به سمت بالا انتقال پیدا میکنند. نکته قابل توجه در این نمودارها این است که تاثیر  $E(nt)/E_m$  بر روی ازدیاد  $E_c$  در درصد حجمی بالای نانولوله ها مشخص تر می باشد.

این سبب می شود که تنش برشی کمتری ( $T_c$  کمتر) بین نانولوله و زمینه ایجاد شود.

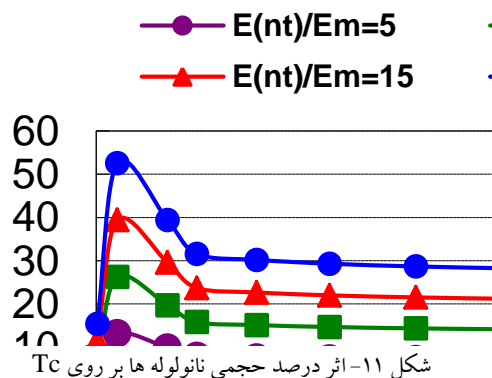


شکل (۱۲): اثر قطر داخلی بر روی: (الف)  $E_c$ ، (ب)  $E_{RVE}$  و (ج)  $T_c$ .

### ۳-۴- نقش قطر المان (RVE)

در شکل ۱۳ اثر قطر المان ( $R$ ) بر روی  $E_c$  و  $E_{RVE}$  نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود با افزایش میزان  $R$ ،  $E_c$  و  $E_{RVE}$  کاهش می یابد. به نظر می رسد که میزان شیب کاهش این پارامترها در  $L/D$  های بالاتر، بیشتر می شود. از طرفی مشاهده می شود که تاثیر  $L/D$  بر روی میزان  $E_c$  و  $E_{RVE}$  در  $R$  های پایین خیلی بیشتر می باشد. در این حالت نیز باید توجه داشت که

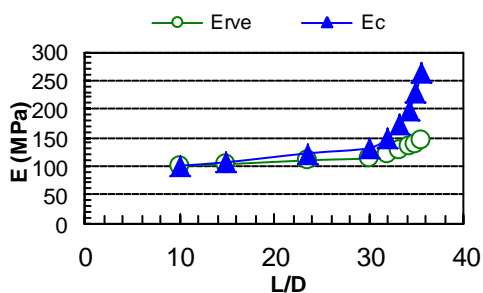
در شکل ۱۱ اثر درصد نانولوله های کربنی بر روی  $T_c$  نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود با افزایش  $V_f$  ابتدا  $T_c$  افزایش یافته و سپس کاهش می یابد، به نظر می رسد درصد حجمی ۰/۱۶ بهینه ترین درصد برای بدست آوردن حداکثر  $T_c$  می باشد. همچنین مشاهده می شود که در درصد نانولوله های کربنی بیش از ۰/۱، افزایش درصد نانولوله های کربنی تاثیر چندانی بر روی  $T_c$  ندارد. در اینجا نیز تقابل میزان تنش برشی و تمرکز تنش در مرز بین نانولوله ها وجود دارد. در درصد های پایین نانولوله ها، تنش برشی در مرز نانولوله/سیمان افزایش می یابد ولی در درصد زیاد نانولوله ها، تمرکز تنش ایجاد شده از نانولوله ها سبب می شود تا اینکه برابند نیروهای برشی و تمرکز تنش کم شود و این امر باعث کاهش  $T_c$  شود.



### ۳-۳- اثر قطر داخلی نانولوله ها

در شکل ۱۲ اثر قطر داخلی نانولوله ها ( $D_{in}$ ) بر روی  $E_c$ ،  $E_{RVE}$  و  $T_c$  نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود قطر داخلی نانولوله ها تاثیر چندانی بر روی پارامترهای عنوان شده ندارد جز در یک مورد برای  $T_c$  در مقدار  $L/D=15$ ، که در این حالت نیز با افزایش میزان قطر داخلی و به عبارتی کم شدن جداره نانولوله،  $T_c$  کم می شود. در واقع در شکل ۱۲-ج از آنجا که در نسبت  $L/D=15$  (یعنی قطر خارجی زیاد)، هرچه قطر داخلی بیشتر شود در این صورت جداره نانولوله کاهش یافته و



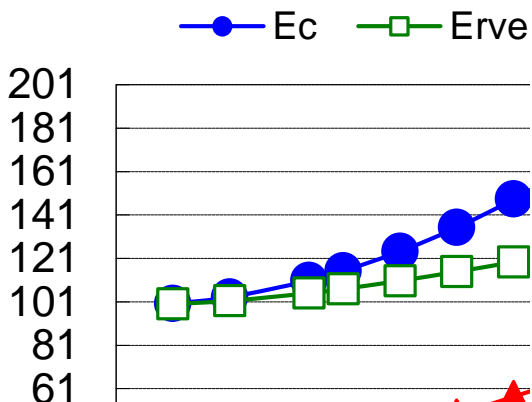


شکل (۱۴): مقایسه  $E_{c}$  و  $E_{rve}$  در  $L/D$  های مختلف

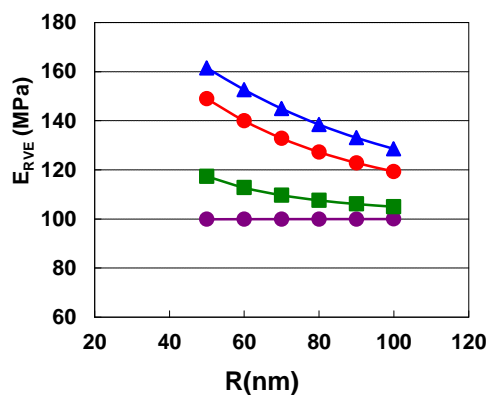
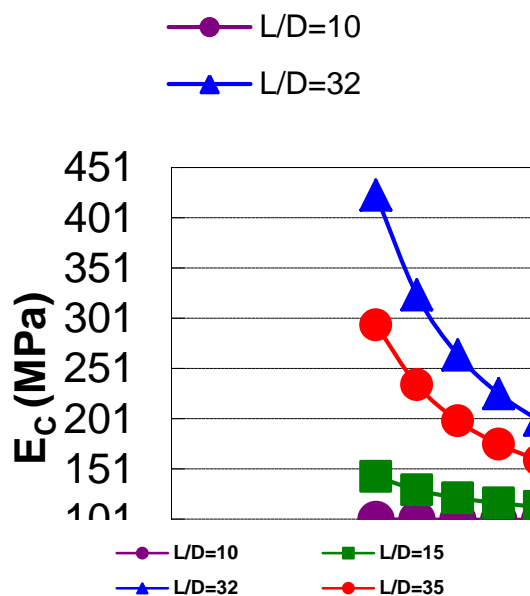
افزایش قطر RVE معادل خواهد بود با کاهش درصد حجمی نانولوله های کربنی در المان در نظر گرفته شده که این باعث می شود که  $E_{c}$  و  $E_{rve}$  کاهش یابد. در شکل ۱۴ اثر  $L/D$  بر روی  $E_{c}$  و  $E_{rve}$  مشاهده می شود. همانطور که این شکل نشان می دهد  $E_{c}$  همراه بیشتر از  $E_{rve}$  می باشد به این دلیل که در حالت  $E_{c}$ ، نانولوله های کربنی حجم بیشتری از المان در نظر گرفته را تشکیل می دهند.

### ۳-۵- تاثیر قطر خارجی $D_{out}$

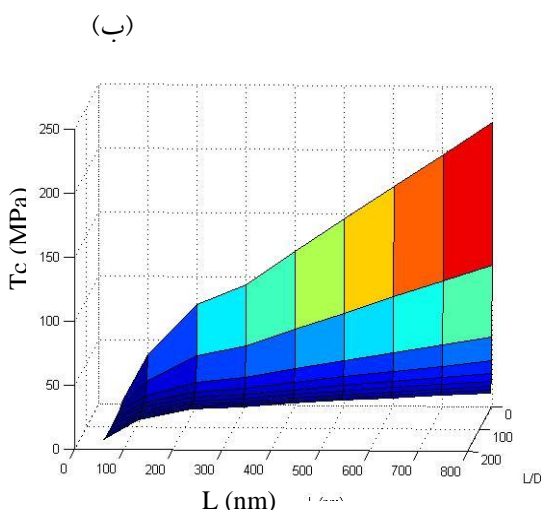
در شکل ۱۵ اثر قطر خارجی نانولوله ها بر روی سه پارامتر نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود با افزایش قطر خارجی نانولوله ها، هر سه پارامتر افزایش می یابد. این افزایش برای  $E_{c}$  و  $T_c$  بیشترین ولی برای  $E_{rve}$  کمتر می باشد. با این وجود نتایج نشان می دهد که که تاثیر قطر خارجی نانولوله های کربنی بر روی  $E_{c}$  بیشتر از همه می باشد. همچنین رابطه بین  $E_{c}$  با قطر خارجی به صورت منحنی بوده در حالی که تاثیر  $D_{out}$  بر روی  $E_{rve}$  و  $T_c$  به صورت خطی می باشد. دلیل این موضوع در واقع افزایش درصد حجمی نانولوله ها با افزایش قطر نانولوله می باشد. به عبارت دیگر هرچه قطر نانولوله بیشتر باشد، سطح بیشتری از RVE توسط نانولوله ها اشغال شده که این امر سبب ازدیاد مدول خواهد شد.



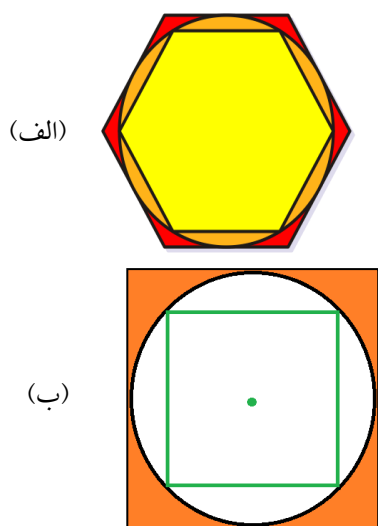
شکل (۱۵): اثر قطر خارجی نانولوله بر روی پارامترهای مختلف



شکل (۱۳): اثر قطر خارجی بر روی  $E_{rve}$ ،  $E_c$



شکل (۱۶): اثر طول نانولوله بر روی: (الف) Erve و (ب) Tc



شکل (۱۷): سطح مقطع RVE های مختلف

مساحت سطح المانها به صورت زیر بدست می آید:

الف: حالتی که مکعب و چند وجهی داخل دایره باشند:

در این حالت مساحت مربع برابر  $(\sqrt{3}r)^2$  و مساحت چند وجهی  $3/2\sqrt{3}(r)^2$  می باشد.

ب: حالتی که مکعب و چند وجهی در بیرون دایره باشند:

در این صورت مساحت مربع  $(2r)^2$  و مساحت چند وجهی برابر  $6/\sqrt{3}(r)^2$  خواهد بود.

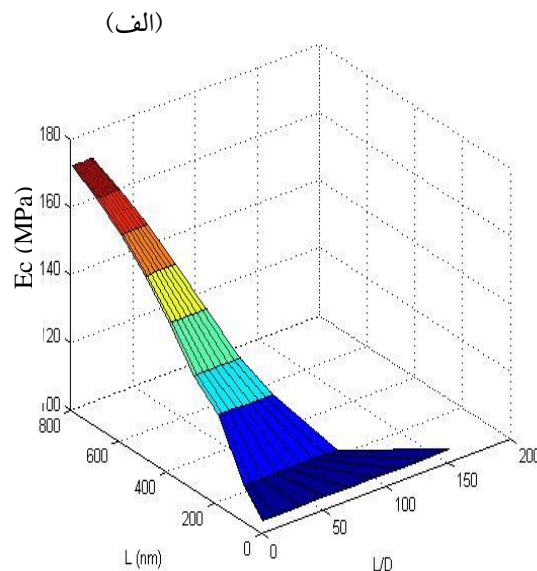
### ۳-۶- تاثیر طول نانولوله های کربنی ( $L_c$ )

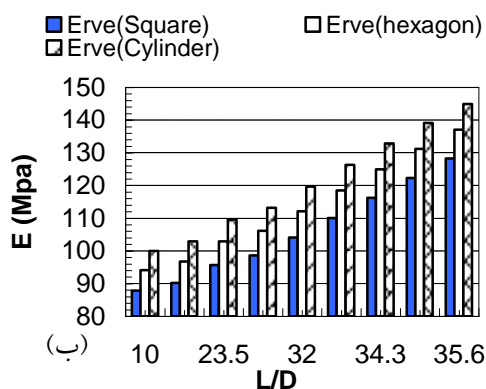
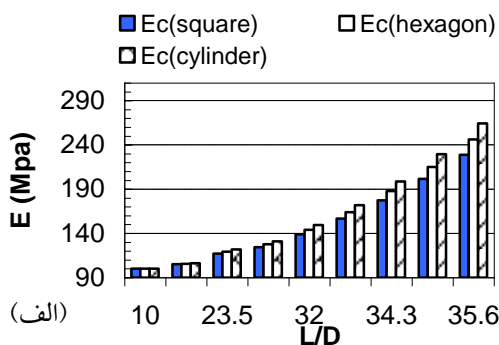
در شکل ۱۶- الف تاثیر اندازه طول نانولوله های کربنی بر روی  $E_{rve}$  در نسبت  $L/D$  های مختلف نشان داده شده است.

همانطور که مشاهده می شود هر چه طول نانوله های کربنی افزایش یابد در این صورت میزان  $E_{rve}$  افزایش می یابد. در شکل ۱۶- ب نیز تاثیر طول نانولوله های کربنی بر روی  $T_c$  نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود با افزایش طول نانولوله های کربنی،  $T_c$  افزایش می یابد. میزان این افزایش در  $L/D$  کم خیلی بیشتر از  $L/D$  بالا می باشد.

### ۳-۷- تاثیر نوع شکل RVE

تا این مرحله RVE انتخاب شده به صورت یک استوانه ای بود که نانولوله های کربنی به صورت موازی در داخل این استوانه توزیع شده اند. در این مرحله به این سوال پاسخ داده خواهد شد که در صورتی که RVE انتخاب شده به صورت مکعب و یا چند وجهی باشد (شکل ۱۷- الف و ب) آیا تاثیر بر روی میزان  $E_c$  و  $E_{rve}$  وجود دارد. در این بخش سه المان به صورت مکعبی و چند وجهی و دایره ای در نظر گرفته می شود. همچنین دو حالت نیز مد نظر قرار می گیرد: در حالت اول دایره محیط بر مربع و چند وجهی بوده و در حالت دوم مربع و چند وجهی محیط بر دایره به شعاع  $r$  می باشد (شکل ۱۷- الف و ب).

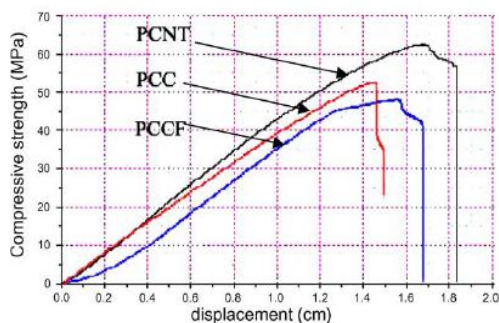




شکل (۱۹): میزان E های مختلف بدست آمده در شکلهای مختلف RVE: (الف): Ec, (ب): ERVE (در حالت دایره محاط)

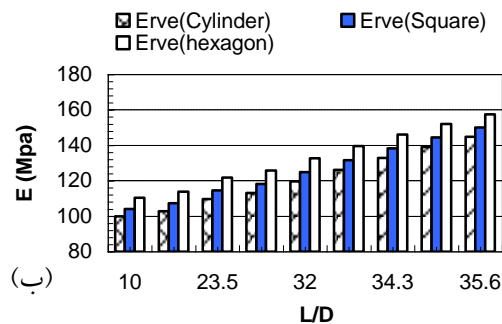
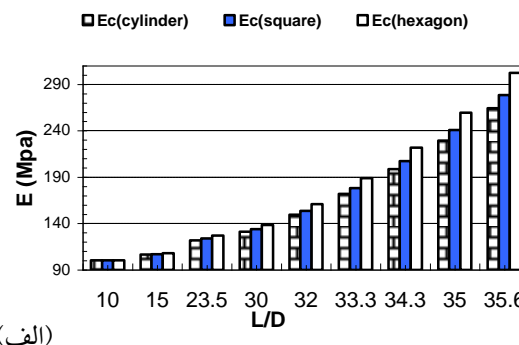
۴- مقایسه نتایج با نتایج تجربی

در شکل ۲۰ نتایجی که توسط Li و همکاران [۱۵] بدست آمده نشان داده شده است. در این شکل PCCF معادل نمونه بدون نانولوله های کربنی، PCC نمونه حاوی الیاف کربن و PCNT نمونه های حاوی نانولوله های کربنی می باشد. از این شکل می توان  $E_c$ ،  $E_m$  را بدست آورد.

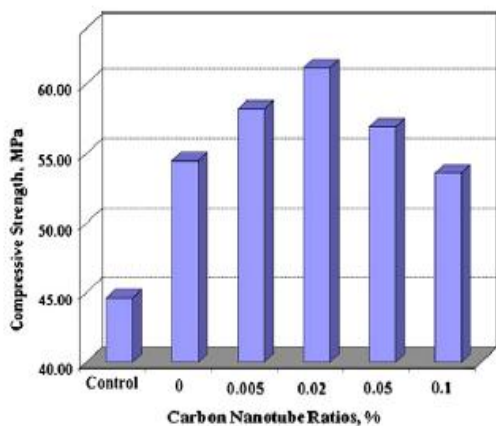


شکل (۲۰): اثر اضافه نانولوله های کربنی بر روی سیمان [۱۵]

نتایج بدست آمده در این دو حالت (الف و ب) در شکل های ۱۸ و ۱۹ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود در حالت الف (شکل ۱۸) میزان  $E$  بدست آمده برای المان مکعبی و چند وجهی بیشتر از میزان  $E$  بدست آمده برای المان استوانه شکل می باشد. این موضوع در حالت (ب) بر عکس بوده و میزان  $E$  بدست آمده برای المان استوانه ای بیشتر از المانهای مکعبی و چندوجهی می باشد (شکل ۱۹). همانطور که مشاهده می شود در هر دو حالت الف و ب، میزان  $E_c$  چند وجهی بدست آمده بیش از  $E_c$  بدست آمده برای المان مکعبی می باشد. این موضوع برای  $E_{rve}$  نیز به همین صورت می باشد. در واقع در همه این حالت ها درصد حجمی نانولوله ها در داخل RVE تغییر کرده که این امر خود سبب ازدیاد و یا کاهش  $E$  می شود.



شکل (۱۸): میزان E های مختلف بدست آمده در شکلهای مختلف RVE: (الف): Ec و (ب): ERVE (در حالت دایره محیط)



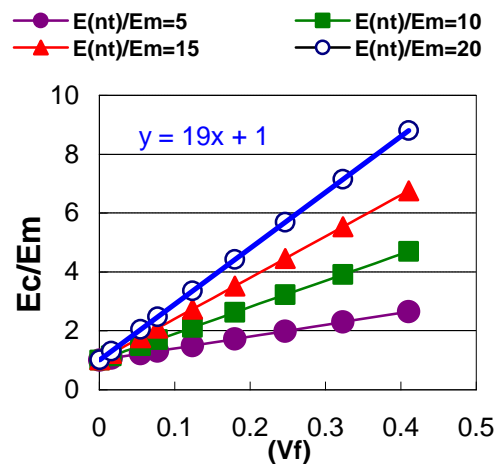
شکل (۲۲): اثر درصد نانولوله های کربنی بر روی خواص سیمان [۱۶]

در تحقیق دیگری که توسط Tyson [۱۷] انجام شده است اضافه نمودن ۰/۲ درصد نانولوله های کربنی، مدول یانگ را از ۱۵ به ۱۸ MPa رسانده است. که در این صورت نسبت دو مدول برابر ۱/۲ می باشد. و برای نانوفیبرهای کربنی از ۱۵ به ۲۴ رسانده که نسبت دو مدول در این حالت نیز ۱/۶ است. با در نظر گرفتن مشخصات نانولوله های کربنی و فیبرهای کربنی استفاده شده در این تحقیق، نسبت  $L/d$  برای نانولوله های کربنی برابر ۱۵۷ و برای نانو فیبرهای کربنی برابر ۵۰۰ می باشد. با این داده ها نتایج  $E_c/E_m$  پیش بینی شده برای درصد نانولوله ۰/۲ تقریباً ۴ می باشد که با نتایج بدست آمده تطابق چندانی ندارد. در تحقیق دیگری که توسط Musso [۱۸] انجام شده است مقدار ۰/۰۵٪ میزان نانولوله های کربنی به سیمان اضافه شده که با توجه به شکل ۲۳ میزان  $E_c/E_m$  برابر با ۱/۴ می باشد. این عدد برای میزان پیش بینی شده برابر ۱/۹۵ می باشد. باید توجه داشت که مقدار بدست آمده برای p-CNT تقریباً نزدیک به مقدار پیش بینی شده می باشد و برای نانولوله های دیگری که مشخصات دیگری دارند این مدل سازگاری چندانی ندارد.

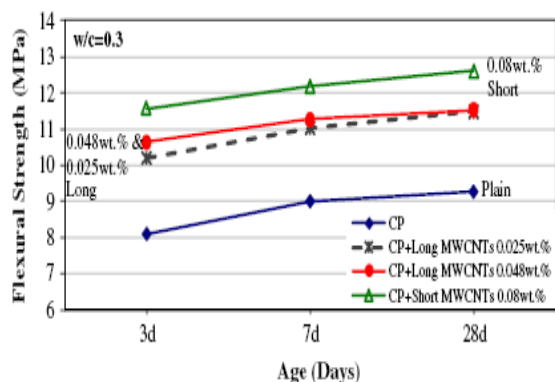
با توجه به اطلاعات این نمودار مشاهده می شود که مقدار  $E_m$ ، ۳۴ MPa می باشد. همچنین میزان  $E_c$  برای کامپوزیت تقویت شده در حدود ۳۷ MPa می باشد. بر اساس مدل میکرومکانیکال و با در نظر گرفتن میزان ۰/۰۲ درصد حجمی نانولوله های استفاده شده در این تحقیق و با اطلاعات نانولوله های استفاده شده در این تحقیق، میزان بدست آمده برای مدول کامپوزیت از مدل میکرومکانیکال در حدود ۳۹ MPa می باشد. شکل ۲۲ نتایجی که توسط Morsy [۱۶] انجام شده است، را نشان میدهد. همانطور که از این شکل مشخص است نسبت  $E_c/E_m$  در درصد نانولوله ۰/۰۵ برابر ۱/۲۶ و در درصد ۰/۰۲ برابر ۱/۳۳ می باشد. با در نظر گرفتن اینکه نسبت مدول یانگ نانولوله به سیمان برابر ۲۰ می باشد (مدول یانگ سیمان تقریباً برابر ۵۰ می باشد) در این صورت طبق شکل ۲۱ از مدل میکرومکانیکال و میزان  $E_m/E_m=20$ ، معادله نمودار به صورت معادله زیر به دست می آید:

$$E_c / E_m = 19V_f + 1 \quad (31)$$

بر اساس این معادله مقادیر پیش بینی شده  $E_c/E_m$  برای درصد ۰/۰۵، ۰/۰۳۳ و ۰/۰۲ برابر ۱/۳۸ می باشد، که به نتایج تجربی بسیار نزدیک است.



شکل (۲۱): اثر نسبت درصد حجمی نانولوله ها بر روی  $E_c/E_m$



شکل (۲۵): اثر درصد نانولوله های کربنی بر روی خواص سیمان [۲۰]

### ۵- نتیجه گیری

در این تحقیق

۱- به روش میکرومکانیکال و نیز مکانیک کلاسیک خواص

نانو کامپوزیت سیمان- نانولوله های کربنی پیش بینی شد.

۲- اثر پارامترهای قطر داخلی، قطر خارجی، درصد حجمی

نانولوله ها و نیز طول نانولوله ها بر روی خواص مکانیک

نانو کامپوزیت پایه سیمان مورد بررسی قرار گرفت.

۳- مشخص شد که با افزایش طول و نیز قطر خارجی نانولوله ها

$E_c$  و  $E_{rve}$  افزایش یافته در حالی که قطر داخلی نانولوله ها بر

روی خواص نانو کامپوزیت تاثیر چندانی ندارد.

۴- مشخص شد که با افزایش درصد حجمی نانولوله ها  $E_c$  به

صورت خطی افزایش یافته ( نرخ افزایش ثابت بوده) در حالی

که  $E_{rve}$  به صورت منحنی افزایش می یابد و با افزایش درصد

حجمی نانولوله ها نرخ افزایش مدول  $E_{rve}$  شیب منحنی کاهش

می یابد.

۵- اثر شکل المان انتخابی ( استوانه، مکعب، یا چند وجهی) بر

روی مدول یانگ ( $E_{rve}$ ) در دو حالت مورد بررسی قرار گرفت

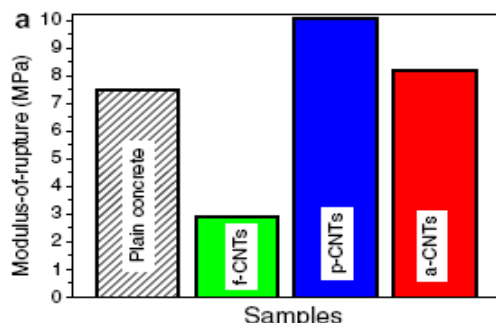
و مشخص شد در حالتی که مکعب و چند وجهی در داخل

استوانه قرار گیرند در این حالت میزان  $E_{rve}$  چند وجهی بیشترین

بوده و  $E_{rve}$  مکعب و استوانه در رده های بعدی قرار دارند.

۶- مدول یانگ پیش بینی شده توسط مدل ارائه شده با نتایج

تحقیقات محققان دیگر مورد مقایسه قرار گرفت و مشخص شد



شکل (۲۳): اثر درصد نانولوله های کربنی بر روی خواص سیمان [۱۸]

در تحقیق دیگری که توسط کشاورز [۱۹] انجام شده است

مشاهده شد که برای میزان ۰/۰۱ نانولوله های کربنی نسبت

$E_c/E_m$  برابر ۱/۱۹ می باشد. با توجه به درصد نانولوله های

استفاده شده برای درصد ۰/۰۱ میزان  $E_c/E_m$  پیش بینی شده در

حدود ۱/۱۲ می باشد. نتایج نشان می دهد که این مدل به خوبی

می تواند این نتایج تجربی را پیش بینی نماید.

در تحقیقی که توسط Gdoutos [۲۰] انجام شده است و نتایج آن

در شکل ۲۴ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود

نسبت مدول یانگ نانو کامپوزیت ( با ۰/۰۸٪ نانولوله) نسبت به

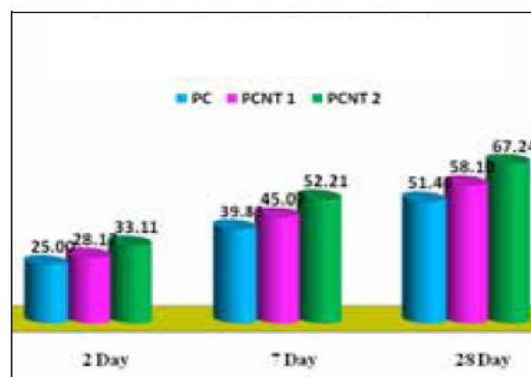
نمونه معمولی (Plain) برابر با ۱/۴۳ بوده در حالی که مدول

پیشنهادی مقدار ۱/۱۴۲ را پیش بینی می کند. بنابراین نمودار در

میزان ۰/۰۴۸ درصد نانولوله های کربنی نسبت دو مدول برابر

۱/۳۶ بوده و مدل ارائه شده این مقدار را ۱/۰۸۶ پیش بینی می

کند.



شکل (۲۴): اثر درصد نانولوله های کربنی بر روی خواص سیمان [۱۹]

- [9] E. YANG & V. C. Li, "Micromechanical Model For Fiber Cement Optimization AND Component Tailoring", IIBCC, Sao Paulo, Brazil, 2006.
- [10] Y. J. Liu & X. L. Chen, "Evaluations of the Effective Material Properties of Carbon Nanotube-based Composites Using a Nanoscale Representative Volume Element", *Mechanics of Materials*, Vol. 35, pp. 69–81, 2003.
- [11] B. N. Hu, H. Fukunaga, C. LU, M. Kmaeyama & B. Yan, "Prediction of Elastic Properties of Carbon Nanotube Reinforced Composites", *Proc. R.*, Vol. 461A, pp. 1685–1710, 2005.
- [12] M. R. Davoudabadi, R. Ebrahimi Naghani & A. Fereidoon, "Prediction of Young's Modulus of Carbon Nanotube Reinforced Composites in Axial Direction with Nonlinear Springs", *World Applied Sciences Journal*, Vol. 10, pp. 1007-1019, 2010.
- [13] Michael Rieth and Wolfram Schommers, *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology* American Scientific Publishers, USA.
- [14] Y. S. d. Ibarra, J. J. Gaitero, E. Erkizia & I. Campillo, "Atomic Force Microscopy and Nanoindentation of Cement Pastes with Nanotube Dispersions", *phys. Stat*, Vol. 203A, pp. 1076–1081, 2006.
- [15] G. Y. Li, P. M. Wang & X. Zhao, "Mechanical Behavior and Microstructure of Cement Composites Incorporating Surface-treated Multi-walled Carbon Nanotubes", *Carbon*, Vol. 43, pp. 1239–1245, 2005.
- [16] M. S. Morsy, S. H. Alsayed & M. Aqel, "Hybrid Effect of Carbon Nanotube and Nano-clay on Physico-Mechanical Properties of Cement Mortar", *Construction and Building Materials*, Vol. 25, pp. 145–149, 2011.
- [17] Br. M. Tyson<sup>1</sup>, R. K. Abu Al-Rub, A. Yazdanbakhsh & Z. Grasley, "Carbon Nanotubes and Carbon Nanofibers for Enhancing the Mechanical Properties of Nanocomposite Cementitious Materials", *Materials in Civil Engineering Accepted January*, Vol. 5, 2011;
- [18] S. Musso, J. Tulliani, G. Ferro & A. Tagliaferro, "Influence of carbon Nnotubes Structure on the Mechanical Behavior f Cement Composites Composites Science and Technology", Vol. 69, pp. 1985–1990, 2009.
- که در اکثر موارد مدل ارائه شده به خوبی می تواند مدول یانگ نانوکامپوزیت ها را پیش بینی نماید.
- ۶- مراجع**
- [1] A. G. Mamalis, L. O. G. Vogtländer & A. Markopoulos, "Nanotechnology and Nanostructured Materials: Trends in Carbon Nanotubes", *Precision Engineering*, Vol. 28, pp. 16–30, 2004.
- [2] J. Makar, J. Margeson & J. Luh, "Carbon Nanotube/Cement Composites – Early Results and Potential Applications", 3rd International Conference on Construction Materials: Performance, Innovation and Structural Implications: Vancouver, B.C, Canada, 2005.
- [3] J. M Makar & J. J. Beaudoin, "Carbon nanotubes and their application in the construction Industry", *Proceedings of 1st International Symposium on Nanotechnology in Construction*, Vol. 23-25, 2003.
- [4] B. Han, X. Yul & E. Kwon, "A Self-sensing Carbon Nanotube/Cement Composite for Traffic Monitoring", *Nanotechnology*, Vol. 20, pp. 445501–445505, 2009
- [5] L. Raki, J. Beaudoin, R. Alizadeh, J. Makar & T. Sato, "Cement and Concrete Nanoscience and Nanotechnology", *Materials*, Vol. 3, pp. 918-94, 2010.
- [۶] م. رضا پویامهر و س. طرح، "تاثیر افزودن نانوذرات اکسید کرم بر خواص سیمان های آلومینایی حاوی اسپینل آلومینات منیزیم، فصلنامه علمی پژوهشی فرآیندهای نوین در مهندسی مواد، شماره ۳، ۹-۱، پاییز ۱۳۹۳،
- [۷] م. جلالی، ا.ع. نوربخش و ا. منشی، "اثر افزودنی نانو اسپینل آلومینا - منیزیا بر مقاومت به هیدراتاسیون جرمهای ریختنی بدون سیمان منیزایی" فصلنامه علمی پژوهشی فرآیندهای نوین در مهندسی مواد، شماره ۲، ۶۷-۷۶، تابستان ۱۳۹۴
- [8] L. Y. Chan & B. Andrawes, "Characterization of the Uncertainties in the Constitutive Behavior of Carbon Nanotube/Cement composites", *Adv. Mater.* Vol. 10, pp. 45007-45020, 2009.

[20] M. S. Konsta-Gdoutos, Z. S. Metaxa & S. P. Shah, "Multi-scale Mechanical and Fracture Characteristics and Early-age Strain Capacity of High Performance Carbon Nanotube/Cement Nanocomposites", *Cement & Concrete Composites*, Vol. 32, pp. 110-115, 2010.

[۱۹] ر. کشاورز، ا. محبی و ج. مرشدیان، "مطالعه رفتار مکانیکی و میکروساختار کامپوزیت بتن - نانولوله کربنی چند جداره اصلاح شده با عامل کربوکسیلیک"، مجله تحقیقات مواد نانو کامپوزیتی ۲۳۶-۲۲۹، ۱۳۸۸.