

## مدلسازی و شبیه سازی بتن های هوشمند نانوکامپوزیتی

عالیه کیوانلو شهرستانکی ۱، ولی پروانه ۲، سیده مریم دشتی زند ۳

۱- کارشناس ارشد دانشگاه آزاد اسلامی واحد شاهرود Aliyeh.keyvanloo@gmail.com

۲- هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد شاهرود

۳- کارشناس ارشد مرکز تحقیقات راه، مسکن و شهرسازی و دانشجویی دکتری صنعتی شاهرود m.dashtizand@gmail.com

m.dashtizand@gmail.com

### چکیده

نانوکامپوزیت‌های پایه پلیمری از جمله محبوب‌ترین نانوکامپوزیت‌هایی می‌باشند که با استفاده از پلیمرها، تقویت‌کننده‌ها و روش‌های مختلف مورد تحقیق قرار گرفته‌اند. در این مقاله، از یک روش جدید برای تولید نانوکامپوزیت پی‌وی‌سی/ نانولوله کربنی چند دیواره با استفاده از یک قالب فشار داغ و اسپری اتوماتیک بکار گرفته شده است. کامپوزیت حاصل با استفاده از اسپری لایه به لایه پلیمر و نانولوله‌های کربنی بدست آمده است. نتایج نشان می‌دهند که با افزایش نانولوله‌های کربنی تا ۵٪ وزنی، استحکام خستگی نانوکامپوزیت تقریباً ۸۰٪ افزایش می‌یابد (تعداد ۵۰۰۰ سیکل). در نهایت، تاثیر درصدهای مختلف وزنی بر روی مدول یانگ نانوکامپوزیت توسط یک مدل جدید مکانیک ساختاری در نرم افزار آباکوس بررسی شده است. نتایج بدست آمده از این مدلسازی، با نتایج تجربی حاصل از روش اسپری مقایسه شده و توافق خوبی را تا ۲۰٪ وزنی نانولوله کربنی نشان می‌دهد.

کلمات کلیدی: نانوکامپوزیت لایه‌ای، روش اسپری، نانولوله کربنی چنددیواره، خواص مکانیکی.

## مقدمه

نانوکامپوزیت‌ها، کامپوزیت‌هایی هستند که حداقل یکی از ابعاد ماده اضافه شونده در آن در حوزه نانومتر ( $<100$ ) باشد. اولین تولید کاربردی از آن‌ها در اوایل سال ۱۹۹۲ گزارش شد. در نانوکامپوزیت‌ها، بخش اول معمولاً یک ساختار بلوری است که در واقع پایه یا ماتریس نانوکامپوزیت محسوب می‌شود و ممکن است از جنس پلیمر، فلز و یا سرامیک باشد. بخش دوم نیز ذراتی در مقیاس نانومتر می‌باشند که به عنوان تقویت کننده (مواد پرکننده) به منظور اهداف خاص از قبیل استحکام، مقاومت و هدایت الکتریکی، خواص مغناطیسی و غیره در درون فاز اول (ماده پایه) توزیع می‌شوند. از ده‌ها سال پیش و حتی قرون قبل، مواد نانو ساختار شناخته شده و مورد استفاده قرار گرفته‌اند به دلیل ابعاد نانومقیاس پرکننده‌های مورد استفاده در نانو کامپوزیت‌ها برهم کنش بین پرکننده و ماتریس با برهم کنش موجود در کامپوزیت‌های معمولی متفاوت است. این برهم کنش‌ها با شکل‌های مختلف روی ویژگی‌های فیزیکی نانو کامپوزیت‌ها اثر می‌گذارد. اکثر مواد برپایه سیمان، نارسانا و در کشش ضعیف هستند. اما برای کاربردهایی که نیاز به تحمل بارهای کششی بالاتر و یا رسانایی بتن است، می‌توان با ادغام نانولوله‌های کربنی آن‌ها را رسانا و یا مستحکم‌تر کرد. البته می‌توان این کار را با افزودن الیاف بزرگ‌تر مانند الیاف کربنی یا فولادی انجام داد. مزیت نانولوله‌ها در این است که مقدار خیلی کمی از آن‌ها را به‌عنوان پرکننده می‌توان استفاده کرد. با توجه به اینکه فناوری‌ها رو به توسعه هستند، مهندسان همواره سعی در حرکت به سمت دو عامل کاهش هزینه‌ها و حفظ محیط‌زیست دارند. از این رو در ساخت پل‌ها، سدها، برج‌ها و همچنین جاده‌ها که در معرض خرابی هستند و معمولاً هزینه‌های هنگفتی برای نگهداری و عیب‌یابی صورت می‌پذیرد. از این رو برای کاهش هزینه‌ها، قابلیت نشان دادن این خرابی‌ها در سریع‌ترین زمان ممکن از لحاظ امنیت عمومی اهمیت بسزایی دارد.

## روش تحقیق

در این تحقیق از یک مدل مکانیک ساختاری چند مقیاسی با بتن به عیار  $400$  کیلوگرم بر مترمکعب و ضخامت آن روی کامپوزیت‌ها  $2-0.34$  نانومتر در نظر گرفته، در نرم افزار ABAQUS برای مدل‌سازی و شبیه سازی رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت های بتنی خودحس کننده استفاده شده است. در ابتدا نانولوله-های کربنی در مقیاس نانو و بصورت اتمی مدل می‌شوند. در این مدل ساختاری از رابط‌های غیرخطی برای مدل کردن برهمکنش‌های پیوندی کشش و پیچش و همچنین از المان فنر غیرخطی محوری برای مدل کردن برهمکنش پیوندی تغییر زاویه استفاده شده است. رفتار نانولوله مدل شده دقیقاً با واقعیت هماهنگ است و از مزیت‌های آن، اجرا شدن در فضای CAE نرم‌افزار ABAQUS می‌باشد. این مدل ساختاری سپس برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی استفاده شده است. در این قسمت برای اطمینان از صحت رفتار مکانیکی نانولوله کربنی، ابتدا مدول یانگ، مدول برشی، ضریب پواسون و استحکام نهایی آن بررسی شده و با نتایج دیگران مقایسه می‌شود. در ادامه مدل ماتریس بتنی نیز بصورت پیوسته در اطراف نانولوله کربنی در نظر گرفته می‌شود و برهمکنش واندوالس میان بتن و نانولوله های کربنی توسط فنرهای غیرخطی لنارد- جونز مدل می‌گردند تا مدل نهایی نانوکامپوزیت ساخته شود. در نهایت مدل نانوکامپوزیت برای درصدهای وزنی مختلف از نانولوله کربنی تحت بارگذاری قرار گرفته و پس از صحت سنجی رفتار مکانیکی آن، رابطه میان تنش اعمال شده و هدایت الکتریکی نانوکامپوزیت بتن مورد مطالعه قرار گرفته است.

قسمت اصلی نرم‌افزار ABAQUS فضای CAE آن است که به کاربر امکان اجرای دستورات توسط آیکون‌های کمکی و مشاهده گرافیکی نتایج حاصل را می‌دهد. این فضا به حوزه‌های مختلف تقسیم می‌شود که فرآیند مدل‌سازی در طی این حوزه‌ها صورت می‌پذیرد.

حوزه اول، part: مربوط به ساخت هسته اولیه مدل می‌باشد. برای ایجاد یک نانولوله کربنی به ایجاد اتم‌های کربن نیاز است. در این مدل، اتم‌های کربن به صورت گره‌های تو خالی در نظر گرفته می‌شوند.

حوزه دوم، property: در این حوزه، خصوصیات ماده که در اینجا گره‌های تو خالی هستند، اعمال می‌شوند. با توجه به اینکه مدل مورد استفاده در این مقاله برای پیش‌بینی خواص مکانیکی تحت بارهای استاتیکی می‌باشد، بنابراین می‌توان از اعمال خصوصیات از ماده مانند چگالی در این حوزه برای نانولوله کربنی چشم‌پوشی نمود.

حوزه سوم، assembly: این حوزه برای ترکیب و ساخت نهایی هندسه مدل می‌باشد. با استفاده از قابلیت‌های این حوزه در چرخش و انتقال، گره‌های تو خالی را بر اساس ساختار هندسی نانولوله کربنی ترکیب می‌کنیم. ساختارهای ایجاد شده در این مقاله، زیگزاگ و آرمچر هستند.

حوزه چهارم، step: نوع تحلیل مورد نیاز، در این حوزه تعیین می‌گردد. تحلیل‌های صورت گرفته در این مقاله شامل تحلیل‌های استاتیکی می‌باشد. برای پیش‌بینی مدول یانگ، مدول برشی و استحکام نهایی از تحلیل static riks استفاده گردیده است.

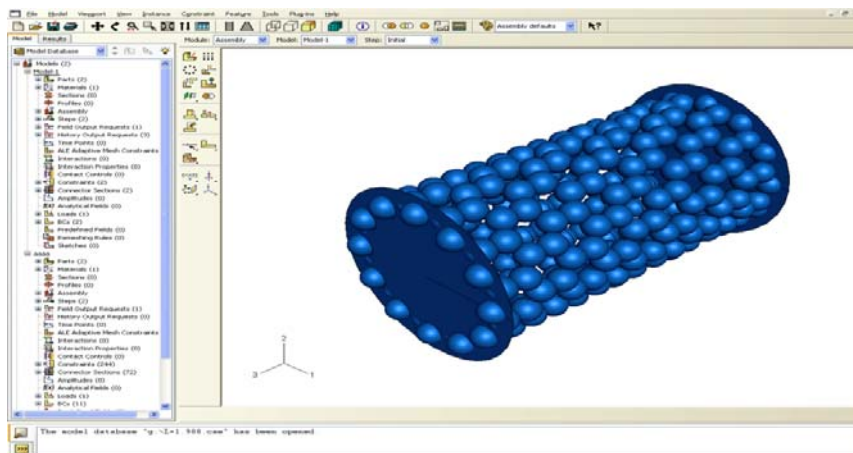
حوزه پنجم، interaction: هسته اصلی مدل، این حوزه می‌باشد. در این حوزه، المان‌های مختلفی برای ایجاد برهمکنش میان دو قسمت وجود دارد. المان‌های مورد استفاده برای ارتباط میان گره‌های تو خالی در مدل ساختاری جدید، شامل فنر و رابط ۱ هستند.

حوزه ششم، load: در این حوزه شرایط مرزی و شرایط بارگذاری تعیین می‌شوند. در این مدل، دو صفحه دایروی در دو انتهای نانولوله کربنی قرار داده شده‌اند به طوریکه بارگذاری و شرایط مرزی به نقطه مرکزی این صفحات اعمال می‌گردد.

حوزه هفتم، mesh: در این حوزه، المان‌بندی گره‌های تو خالی و همچنین ماتریس بتن صورت می‌پذیرد. هرچند که نوع و تعداد المان‌های اتم‌های کربن تأثیری بر روی نتیجه نهایی نخواهد داشت؛ اما برای مشاهده تصویر تغییر شکل یافته نهایی نیازمند المان‌بندی هستیم.

حوزه هشتم، job: در این حوزه، عملیات و محاسبات تحلیل صورت می‌گیرد. زمان تحلیل بستگی به تعداد گره‌های تو خالی یعنی اندازه نانولوله کربنی و همچنین تعداد المان‌های ماتریس بتن دارد.

حوزه نهم، visualization: نتایج نهایی بدست آمده و نمودارهای حاصل را می‌توان در این حوزه یافت. در تصویر، یک مدل کامل از نانولوله کربنی زیگزاگ به همراه صفحات تکیه گاهی در فضای CAE نرم‌افزار ABAQUS نمایش داده شده است.



تصویر نانولوله کربنی زیگزاگ در فضای CAE نرم‌افزار ABAQUS

<sup>1</sup> Connector

## خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی

### مدول یانگ

یکی از پارامترهای مهم در حوزه مسائل مکانیکی، مدول یانگ می‌باشد. امروزه یافتن مدول یانگ برای یک ورق یا میله استوانه‌ای در جهان ماکرو، بسیار ساده است. با تحت کشش قرار دادن یک ورق و یا یک میله با ابعاد هندسی استاندارد و ترسیم نمودار تنش-کرنش مربوطه به راحتی می‌توان مدول یانگ را بدست آورد. اما در جهان نانو، حتی بدست آوردن مدول یانگ که از جمله پارامترهای پایه در حوزه مکانیک محسوب می‌گردد، کاری بس دشوار است؛ به طوری که نتایج بدست آمده از کارهای تجربی و شبیه‌سازی‌های صورت گرفته دارای پراکندگی بسیاری می‌باشند. در جدول ۱ نتایج بدست آمده از روش‌های مختلف تجربی برای مدول یانگ ارائه گردیده‌اند. یک سال پس از آنکه ایجیما نانولوله کربنی را کشف کرد، مدول یانگ نانولوله کربنی را در حدود یک ترا پاسکال پیش‌بینی نمود. چند سال پس از آن کارهای تجربی بر روی این نانولوله‌ها افزایش یافت؛ می‌توان شدت کارهای تجربی صورت گرفته را بین سال‌های ۱۹۹۶ تا ۲۰۰۰ دانست.

از اواسط سال‌های شکل‌گیری کارهای تجربی، مدل‌سازی و شبیه‌سازی‌های عددی برای پیش‌بینی مدول یانگ نانولوله‌های کربنی رو به افزایش گذاشت. می‌توان شدت کارهای عددی صورت گرفته را بین سال‌های ۲۰۰۰ تا ۲۰۰۶ دانست. در جدول ۲ نتایج بدست آمده از روش‌های مختلف عددی برای مدول یانگ ارائه گردیده‌اند.

جدول ۱: نتایج تجربی بدست آمده برای مدول یانگ نانولوله‌های کربنی

نام	سال	مدول یانگ (گیگا پاسکال)		روش
		SWCNTs <sup>۲</sup>	MWCNT <sup>۱</sup> s	
Treacy et al	۱۹۹۶	-----	۱۸۰۰	دامنه ارتعاشات گرمایی
Wong et al	۱۹۹۷	۱۲۸۰	۱۱۰۰	خمش تریک سرگیردار
Krishnan	۱۹۹۸	۱۲۵۰	۱۲۷۰	ارتعاشات گرمایی
Lourie et al	۱۹۹۸	۳۲۰۰	۲۱۰۰	طیف نمایی رامان
Salvatat et al	۱۹۹۹	۸۱۰	۱۰۲۰	خمش تیر دوسر ساده
Tomblor	۲۰۰۰	۱۲۰۰	-----	خمش تیر دوسر ساده
Yu et al	۲۰۰۰	۷۵۰	۹۰۰	تست کشش

همانگونه که در جداول ۱ و ۲ مشاهده می‌شود، پراکندگی بسیاری در نتایج مشاهده می‌گردد. این پراکندگی در نتایج تجربی بیشتر است. شاید یکی از دلایل آن استفاده از روش‌های مختلف در آزمایش باشد. اختلاف‌های فاحش در نتایج عددی بیشتر مربوط به اندازه ضخامت اعمال شده برای نانولوله می‌باشند. البته در حال حاضر بیشتر محققان اندازه ضخامت ۰/۳۴ نانومتر را ضخامت مؤثر و مدول یانگ ۱۰۷۰ گیگا پاسکال را مدول یانگ قابل قبول نانولوله‌های کربنی می‌دانند.

<sup>1</sup>Multi-walled Carbon Nanotubes(MWCNTs)

<sup>2</sup> Single-walled Carbon Nanotubes(SWCNTs)

در این مقاله، در ابتدا مدول یانگ نانولوله کربنی محاسبه گردیده است. متعارف‌ترین روش برای محاسبه مدول یانگ، روش تست کشش می‌باشد. برای محاسبه خصوصیات مؤثر نانولوله‌های کربنی، نانولوله را به صورت پیوسته در نظر می‌گیرند. بنابراین مدول یانگ به صورت زیر محاسبه می‌گردد:

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{P/A_0}{\Delta L/L_0} \quad (1)$$

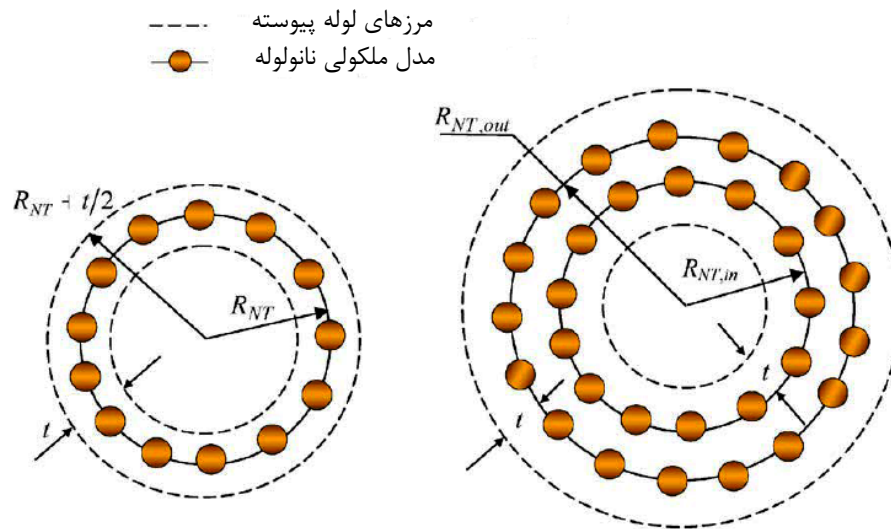
جدول ۲: نتایج شبیه‌سازی عددی بدست آمده برای مدول یانگ نانولوله‌های کربنی

نام	سال	مدول یانگ (GPa)	ضخامت (nm)	روش
Yakobson et al	۱۹۹۶	۵۵۰۰	۰/۰۶۶	ترسوف-برنر
Krishnan et al	۱۹۹۶	۱۰۷۰	۰/۳۴	ترسوف-برنر
Cornwell et al	۱۹۹۷	۱۰۰۰	۰/۳۴	ترسوف-برنر
Lu et al	۱۹۹۸	۹۷۵	۰/۳۴	تابع چگالی عمومی
Yao et al	۱۹۹۸	۱۰۰۰	۰/۳۴	اتصال مقید
Hernandez	۱۹۹۸	۱۲۴۰	۰/۳۴	اتصال مقید
Goze et al	۱۹۹۹	۱۲۷۰	۰/۳۴	اتصال مقید
Van Lier et al	۲۰۰۰	۱۰۹۰	۰/۳۴	مکانیک کوانتوم
Prvlutskyy	۲۰۰۰	۱۱۵۰	۰/۳۴	مورس اصلاح شده
Popov et al	۲۰۰۰	۱۰۰۰	۰/۳۴	تئوری تجربی شبکه
Kudin et al	۲۰۰۱	۱۰۲۹	۰/۰۸۹۴	محاسبات آیینشیو
Belystchko	۲۰۰۲	۹۴۰	۰/۳۴	مورس اصلاح شده
Odegard et al	۲۰۰۲	۱۰۰۸	۰/۶۸	مدل ساختاری خریا
Troya et al	۲۰۰۳	۱۱۶۰	۰/۳۴	مکانیک کوانتوم
Shintani et al	۲۰۰۳	۱۰۶۰	۰/۳۴	پتانسیل هارمونیک
Li and Chou	۲۰۰۳	۱۰۲۰	۰/۳۴	مدل ساختاری تیر
Xiao et al	۲۰۰۵	۱۱۰۰	۰/۳۴	تحلیلی
Wu et al	۲۰۰۶	۱۰۶۰	۰/۲۸۵	پتانسیل هارمونیک
Kalamkarov	۲۰۰۶	۱۰۰۰	۰/۶۸	مدل ساختاری
Kalamkarov	۲۰۰۶	۱۴۴۰	۰/۱۲۹	مدل پیوسته

که  $P$  نیروی محوری کل،  $A_0$  مساحت سطح مقطع لوله پیوسته معادل،  $\Delta L$  تغییر طول متناظر بدست آمده از شبیه‌سازی و  $L$  طول اولیه نانولوله می‌باشد. با توجه به شکل (۱)، مساحت سطح مقطع  $A_0$ ، را می‌توان به صورت زیر نوشت:

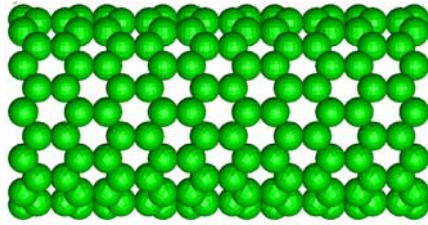
$$A_0 = \pi \left[ \left( R_{NT} + \frac{t}{2} \right)^2 - \left( R_{NT} - \frac{t}{2} \right)^2 \right] \quad (2)$$

در آن  $R_{NT}$ ، شعاع مؤثر نانولوله می‌باشد که از جدول ۲ بدست می‌آید.

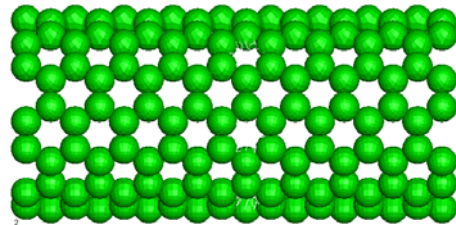


شکل (۱): سطح مقطع معادل نانولوله کربنی

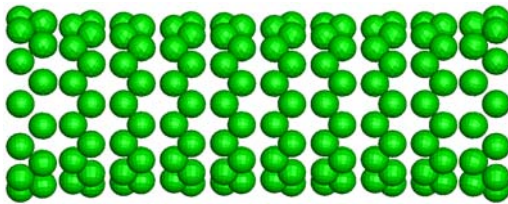
شکل (۱)، تصویر تغییر شکل یافته نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر تحت کشش محوری را نشان می‌دهد. با استفاده از مدل معرفی شده، تست کشش برای نانولوله‌های با نسبت‌های ظاهری مختلف انجام شده و نتایج آن در نمودار شکل (۳) آورده شده است. همانگونه که در شکل مشاهده می‌گردد، با افزایش نسبت  $(L/d)$ ، برای هر دو ساختار زیگزاگ و آرمچیر مقدار مدول یانگ افزایش می‌یابد؛ به طوری که در نسبت‌های ظاهری بیشتر از ۱۰، به یک مقدار ثابت میل می‌کند. همچنین مشاهده می‌شود که اختلاف مقدار مدول یانگ نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر برای نسبت‌های ظاهری پایین‌تر، بیشتر است. این موضوع نشان می‌دهد که تاثیر نوع ساختار برای نسبت‌های ظاهری کوچکتر، بیشتر است. البته باید خاطر نشان کرد که نسبت‌های ظاهری برای قطر خاص ۰/۹۵ نانومتر می‌باشند.



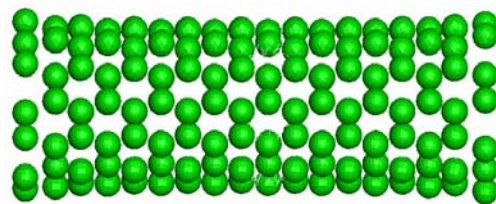
(الف)



(ب)



(ج)

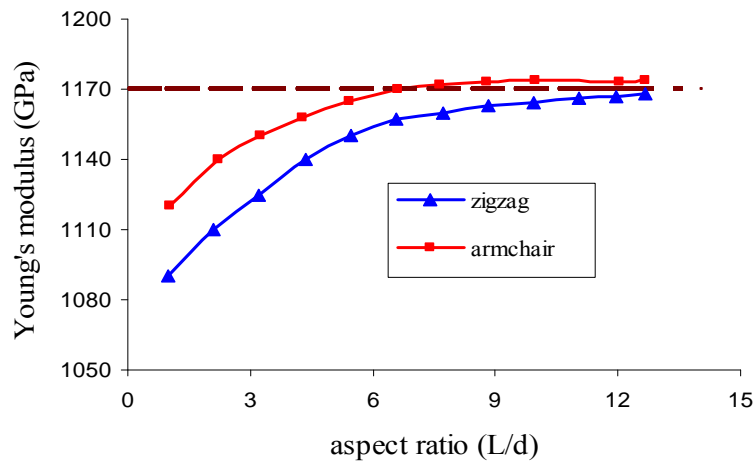


(د)

شکل (۲): (الف) تصویر نانولوله کربنی زیگزاگ (ب) تصویر نانولوله کربنی آرمچیر (ج) تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی زیگزاگ تحت کشش محوری (د) تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی آرمچیر تحت کشش محوری

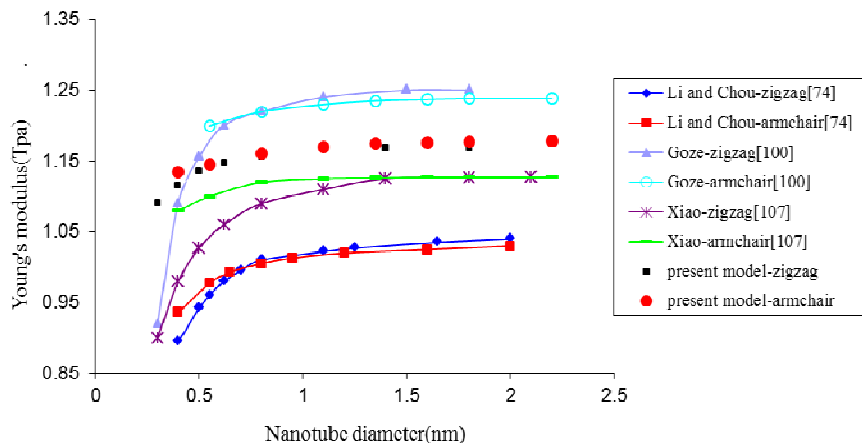
در شکل (۴) مقایسه‌ای میان نتایج دیگران برای قطرهای مختلف صورت گرفته است. این مقایسه نشان می‌دهد که مدل ساختاری جدید دارای نتایج قابل قبولی نسبت به نتایج دقیق ملکولی و سایر مدل‌های ساختاری است.

در شرایط ایده‌آل آزمایشگاهی، علت اصلی پراکندگی در نتایج تجربی را می‌توان اختلاف در روش‌های اعمال شده برای آزمایش و علت اصلی پراکندگی در نتایج عددی را می‌توان اختلاف در پتانسیل‌های در نظر گرفته شده در شبیه‌سازی دانست. حتی پارامترهای معادلات پتانسیل برای یک پتانسیل خاص نیز متفاوت است. همانطور که مشاهده می‌شود، ضخامت‌های مختلفی برای نانولوله در شبیه‌سازی در نظر گرفته شده است. هرچند که این ضخامت‌ها با یکدیگر اختلاف دارند؛ اما آنچه مهم است، حاصلضرب مدول یانگ در ضخامت یعنی سفتی داخلی صفحه‌ای می‌باشد. با دقت بیشتر متوجه می‌شویم که سفتی داخلی صفحه‌ای تقریباً برای همه نتایج عددی یکسان است.



شکل (۳): نمودار مدول یانگ نانولوله کربنی بر اساس نسبت ظاهری (L/d)

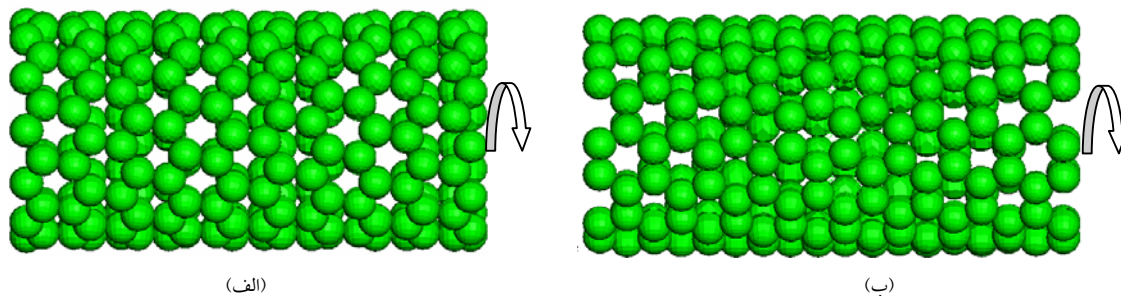




شکل (۴): مقایسه نمودارهای مدول یانگ بر حسب قطر نانولوله کربنی

### مدول برشی

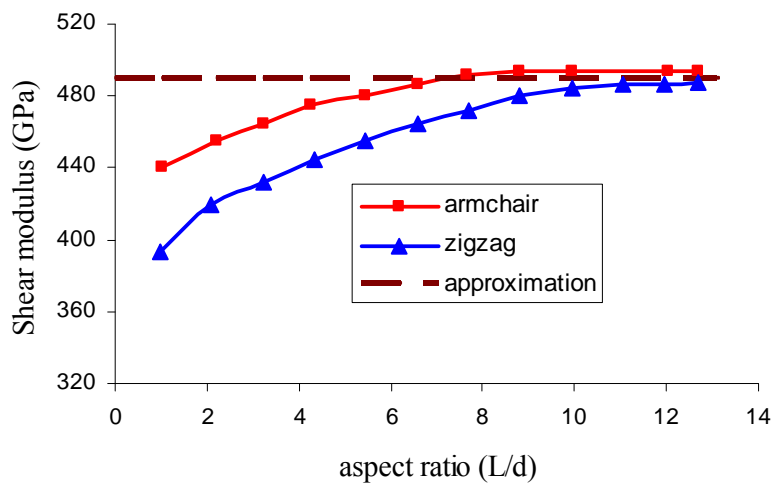
در این مقاله، مدول برشی برای دو نوع نانولوله زیگزاگ و آرمچیر با نسبت‌های ظاهری مختلف بدست آمده است. برای محاسبه مدول برشی از تست پیچش استفاده شده است. شکل (۵)، تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی را تحت پیچش نشان می‌دهد.



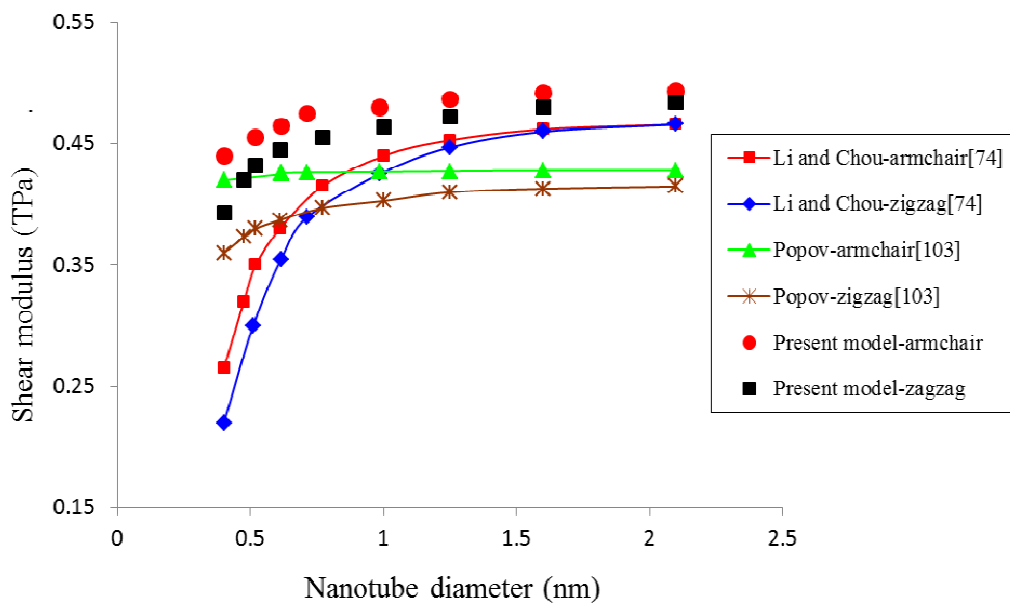
شکل (۵): تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی تحت پیچش (الف) زیگزاگ (ب) آرمچیر

تست پیچش برای نانولوله‌های با نسبت‌های ظاهری مختلف انجام شده و نتایج آن در نمودار شکل (۶) آورده شده است. همانگونه که در شکل مشاهده می‌گردد، همانند مدول یانگ با افزایش نسبت  $(L/d)$ ، برای هر دو ساختار زیگزاگ و آرمچیر مقدار مدول برشی افزایش می‌یابد به طوری که در نسبت‌های ظاهری بیشتر از ۱۰، به یک مقدار ثابت میل می‌کند. همچنین مشاهده می‌شود که اختلاف مقدار مدول برشی نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر برای نسبت‌های ظاهری پایین‌تر، بیشتر است. در شکل (۷) مقایسه‌ای میان نتایج دیگران برای قطرهای مختلف صورت گرفته است. این مقایسه نشان می‌دهد که مدل ساختاری جدید دارای نتایج قابل قبولی نسبت به نتایج دقیق ملکولی و سایر مدل‌های ساختاری است.





شکل (۶): نمودار مدول برشی نانولوله کربنی بر اساس نسبت ظاهری (L/d)



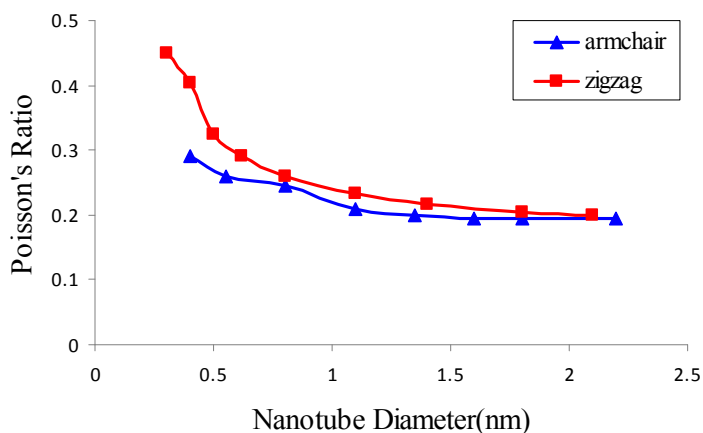
شکل (۷): مقایسه نمودارهای مدول برشی بر حسب قطر نانولوله کربنی

### ضریب پواسون

ضریب پواسون در نانولوله‌های کربنی همانند حالت‌های پیوسته از رابطه زیر محاسبه می‌گردد.

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

در شکل (۸)، منحنی ضریب پواسون بر حسب قطر نانولوله برای نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر ارائه شده است.

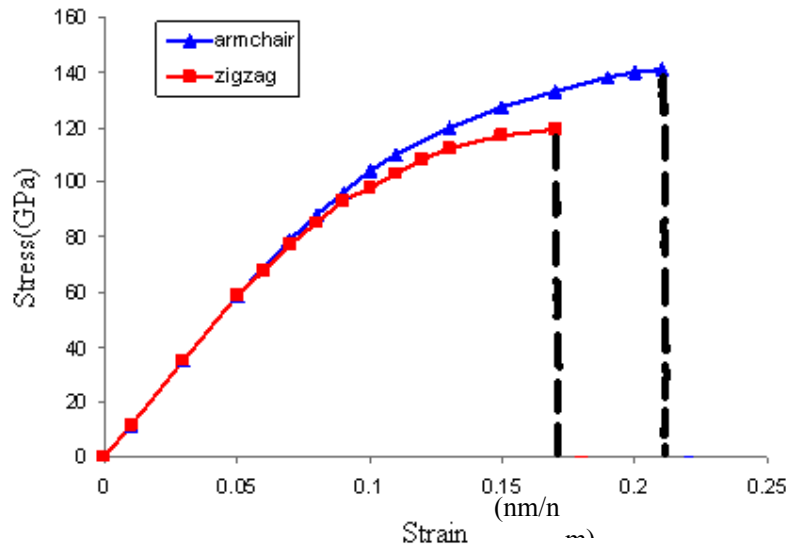


شکل (۸): منحنی ضریب پواسون بر حسب قطر نانولوله

مشاهده می‌شود که با افزایش قطر نانولوله، ضریب پواسون کاهش می‌یابد و برای قطرهای بزرگ به یک مقدار ثابت ۰/۱۹۴ می‌رسد. در ضمن ضریب پواسون برای نانولوله زیگزاگ در قطرهای کوچک، بیشتر از نانولوله آرمچیر است. در ضمن با جاگذاری مدول یانگ و ضریب پواسون در رابطه بالا، مقدار مدول برشی ۴۹۰GPa بدست خواهد آمد که معادل مقدار بدست آمده از شبیه‌سازی می‌باشد.

### استحکام نهایی

یکی از ویژگی‌های شگفت‌انگیز نانولوله‌های کربنی، استحکام نهایی بسیار بالای آنها است. در شکل (۹) استحکام نهایی نانولوله‌های کربنی زیگزاگ و آرمچیر توسط مدل ساختاری جدید بدست آمده و با یکدیگر مقایسه شده‌اند. با توجه به شکل، کرنش‌های نهایی برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ به ترتیب ۲۲٪ و ۱۸٪ می‌باشد. بنابراین استحکام نهایی آرمچیر از زیگزاگ بیشتر است. دلیل آن را می‌توان در نوع ساختارهای آنها جستجو کرد. در نانولوله زیگزاگ برخی از پیوندهای C-C در جهت محور کشش قرار دارند؛ در حالیکه در نانولوله آرمچیر، این پیوندها در جهت عمود بر محور کشش هستند.

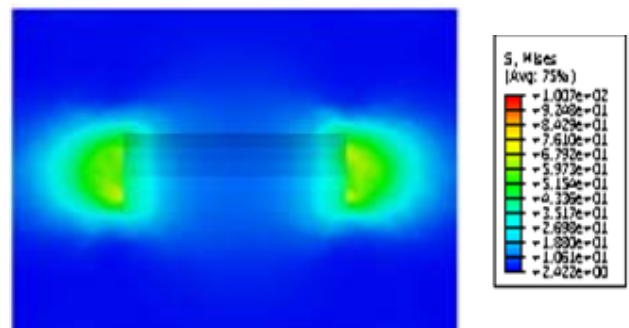
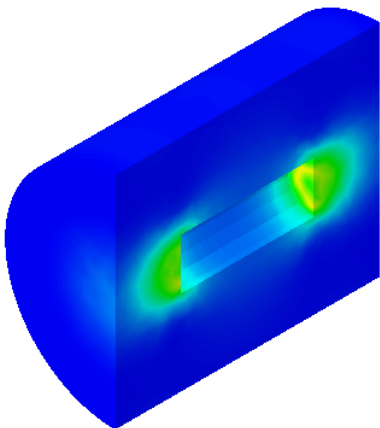


شکل (۹): منحنی تنش-کرنش نانولوله های (۱۲,۰) و (۷,۷)

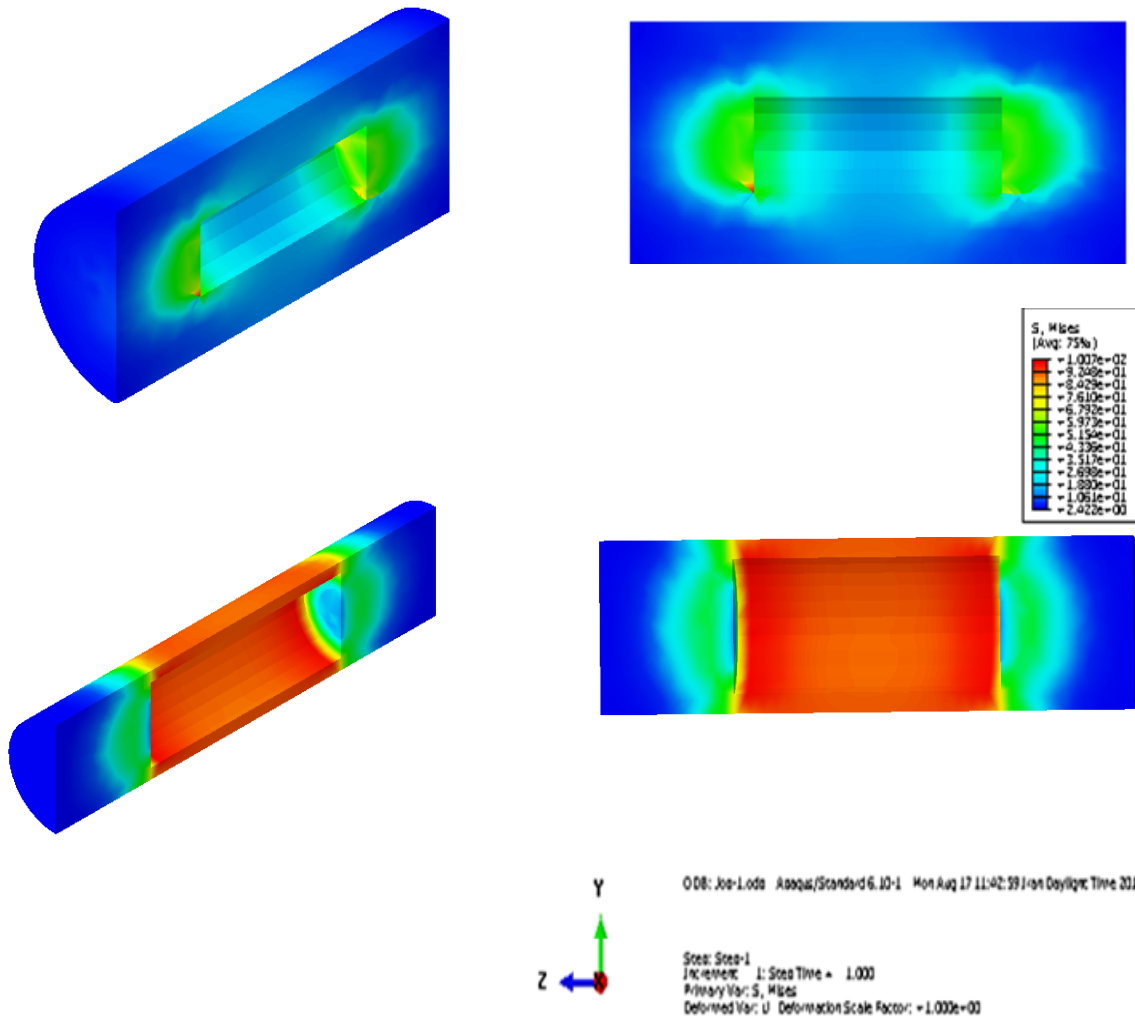
### خواص مکانیکی نانوکامپوزیت

#### مقاومت کششی و فشاری

نتایج مدل مکانیک ساختاری برای حالت یک نانولوله کربنی درون ماتریس نشان می‌دهد که با کاهش حجم ماتریس یعنی افزایش درصد وزنی نانولوله کربنی، تاثیر حفره ماتریس نیز بشدت افزایش می‌یابد. (شکل ۱۰). این امر منجر به دور شدن مدل از حالت واقعی شده و بنابراین نتایج بالاتری را برای مدول یانگ پیش‌بینی می‌کند. می‌دانیم که یکی از عوامل بسیار مهم در افزایش خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها انتقال بار از ماتریس به نانولوله می‌باشد. در مدل مکانیک ساختاری با یک نانولوله کربنی، با کاهش حجم ماتریس و نازک شدن پوسته ماتریس در اطراف حفره، انتقال بار بیشتری به نانولوله کربنی وارد می‌شود. بنابراین خواص مکانیکی به طور مستمر افزایش می‌یابد و کاهش چندانی در نرخ افزایش آن مشاهده نمی‌شود. برای حل این مشکل و نزدیک کردن مدل به واقعیت، می‌توان تعداد نانولوله‌ها را افزایش داد.



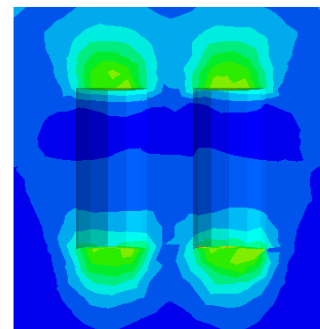
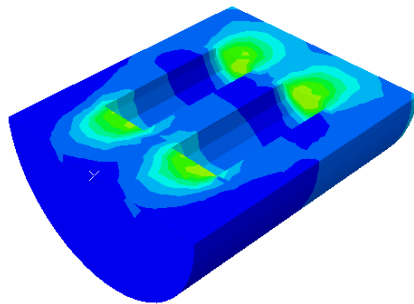
ODB: Job-1.odb Abaqus/Standards 6.10-1 Mon Aug 17 11:42:59 J on Daylight Time 2015  
 Step: Step-1  
 Increment: 1; Step Time = 1.000  
 Primary Var: S, Mises  
 Deformed Var: U Deformation Scale Factor: = 1.000e+00



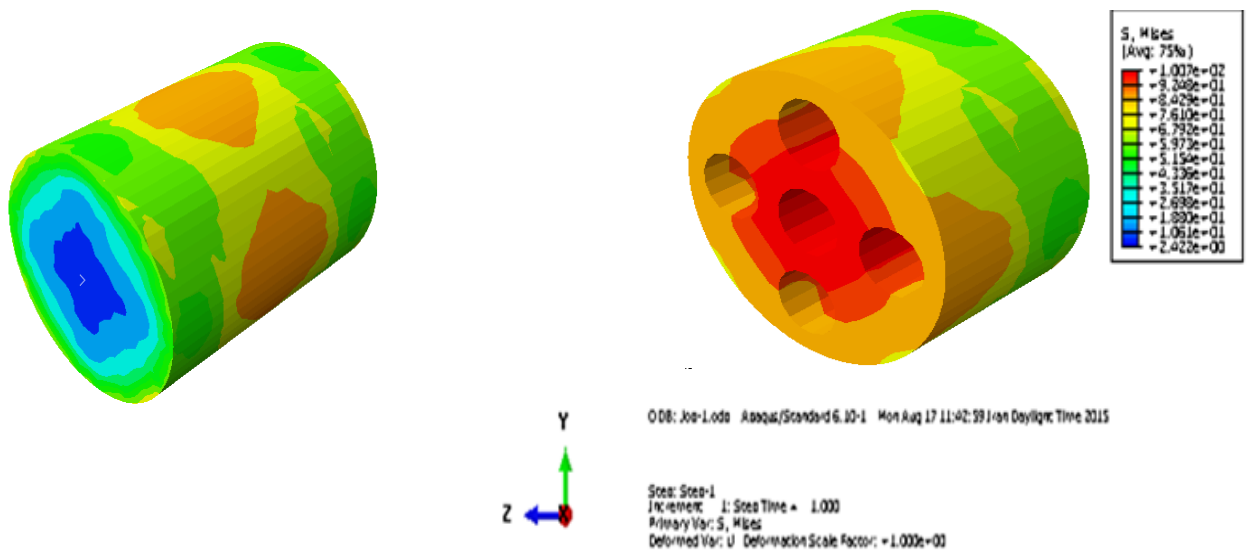
شکل (۱۰) کاهش حجم ماتریس و انتقال تنش بیشتر به نانولوله کربنی

با یکبارگیری دو نانولوله بجای یک نانولوله کربنی درون ماتریس، توزیع تنش بهتر شده و شاهد افت نرخ مقاومت (درصد وزنی ۱ به بالا) با افزایش درصد وزنی نانولوله کربنی خواهیم بود (شکل ۱۱). این امر با افزایش بیشتر تعداد نانولوله‌ها بهبود یافته بطوریکه می‌توان در حالت پنج نانولوله کربنی درون ماتریس، نتایج بهتری را مشاهده کرد (شکل ۱۲).

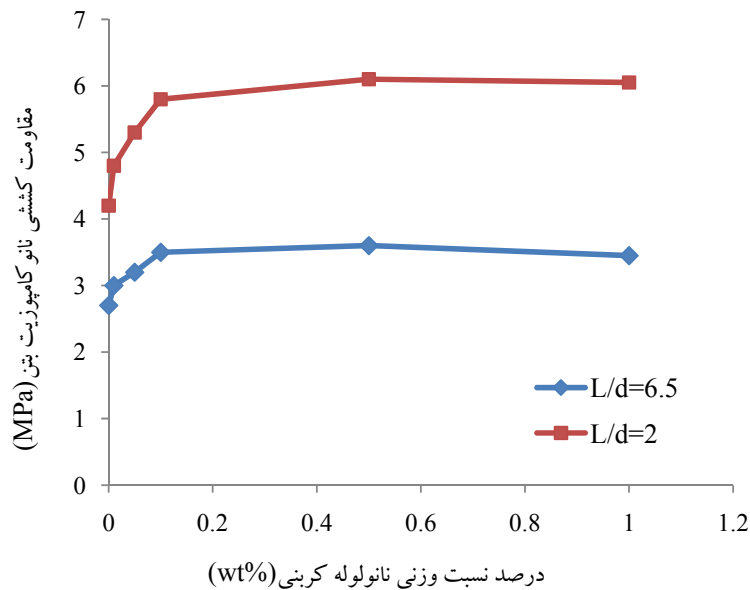
نمودار مقاومت کششی و فشاری برای نانو کامپوزیت بتن/نانولوله کربنی برحسب درصدهای وزنی مختلف از نانولوله کربنی به ترتیب در شکل‌های (۱۳) و (۱۴) ترسیم شده‌اند. نمودار برای دو حالت نسبت ظاهری ۶/۵ و ۲ مقایسه شده‌اند. همانگونه که مشاهده می‌شود با افزایش نسبت طول به قطر نانولوله کربنی درون ماتریس بتن، مقاومت کششی و فشاری نانو کامپوزیت افزایش می‌یابد.



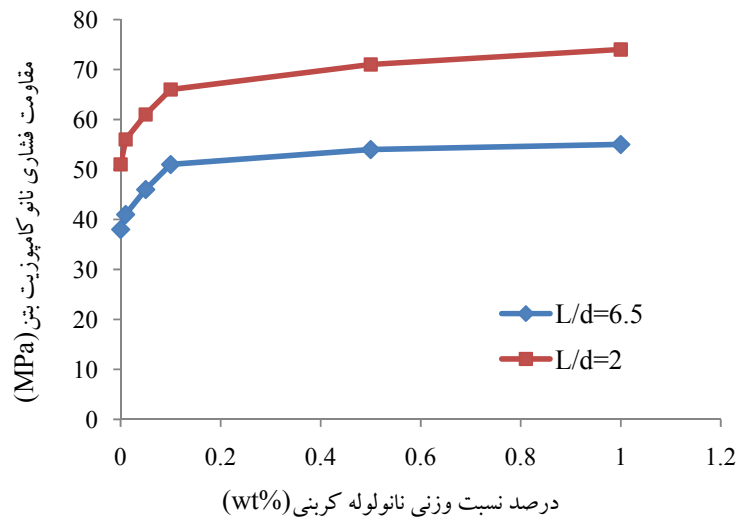
شکل (۱۱) مدل نانو کامپوزیت بتن/نانولوله کربنی با دو نانولوله درون ماتریس



شکل (۱۲): مدل نانو کامپوزیت بتن/نانولوله کربنی با پنج نانولوله درون ماتریس

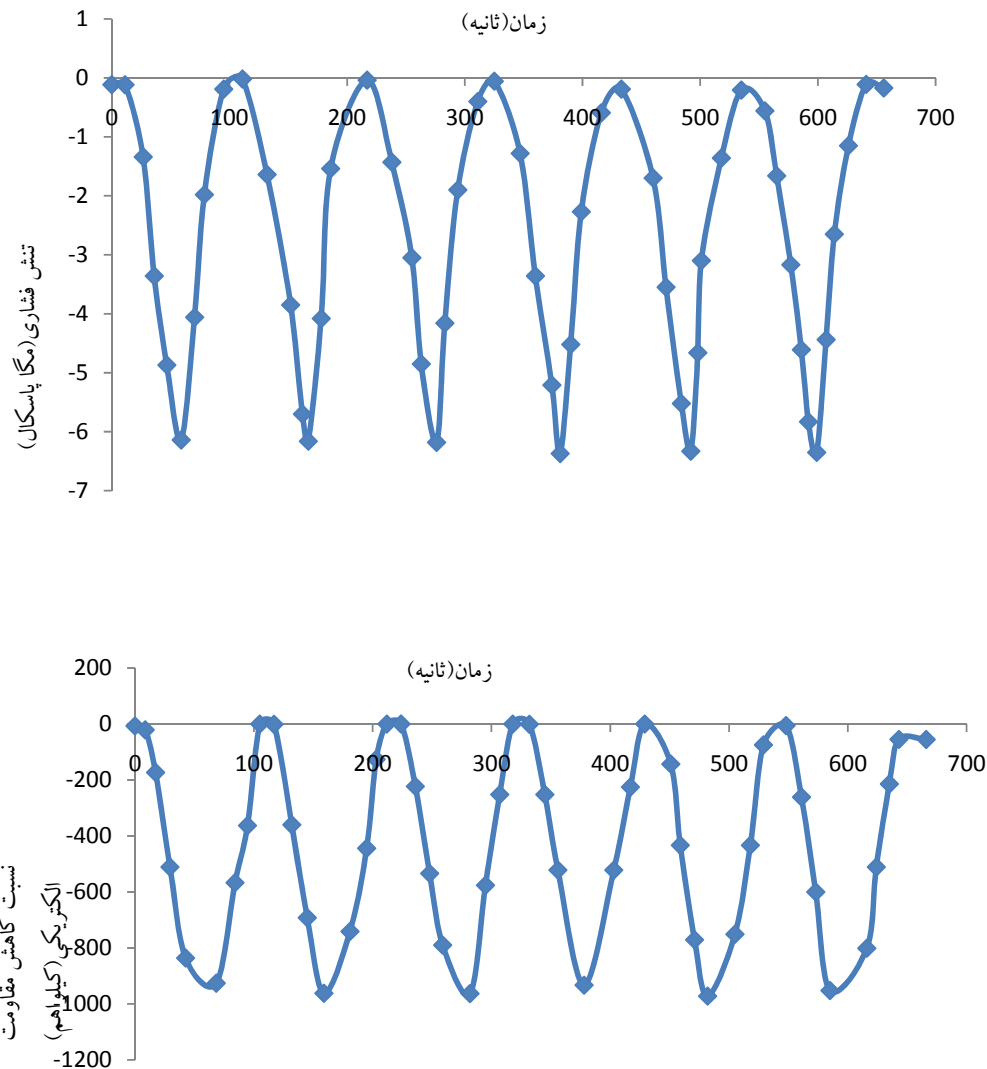


شکل (۱۳): مقاومت فشاری نانو کامپوزیت بتن با درصد وزنی های مختلف



شکل (۱۴): مقاومت فشاری نانو کامپوزیت بتن با درصد وزنی های مختلف

به منظور بررسی رفتار پیزوالکتریکی نانو کامپوزیت بتن تقویت شده با نانولوله کربنی، مدل را تحت بار دینامیکی قرار داده و مقاومت الکتریکی نانو کامپوزیت را در همان زمان محاسبه می کنیم. نتایج در شکل (۱۵) نمایش داده شده اند. همانگونه که مشاهده می شود، با تغییرات تنش فشاری از صفر تا ۶ مگاپاسکال، نسبت کاهش مقاومت الکتریکی نانو کامپوزیت بتنی از صفر تا ۹۶۳ کیلو اهم تغییر می کند.



شکل (۱۵): مقاومت الکتریکی نانوکامپوزیت

### بحث و نتیجه گیری

مدل مکانیک ساختاری برای شبیه سازی رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت های بتنی خودحس کننده تقویت شده با نانولوله های کربنی استفاده شده است. مشابه مدل های ساختاری دیگر، از یک المان حجمی نماینده برای مدلسازی نانوکامپوزیت استفاده شده است. فنرهای غیرخطی لئارد-جونز برای شبیه سازی برهمکنش و اندروالس میان نانولوله و بتن بکار گرفته شده اند. مدل های مشابه ساختاری با افزایش درصد وزنی نانولوله های کربنی، مقادیر بزرگتری را برای مدول یانگ نسبت به نتایج تجربی پیش بینی می کنند. اما نتایج تجربی نشان می دهند که با افزایش درصد وزنی، روند افزایش مقاومت کششی و فشاری کاهش می یابد. برای نزدیکتر شدن مدل به واقعیت از چند نانولوله کربنی دو دیواره درون ماتریس بتن استفاده شده است؛ در حالیکه در مدل های مشابه از یک نانولوله کربنی تک دیواره درون ماتریس استفاده شده بود. نتایج نشان می دهند که با افزایش تعداد نانولوله های کربنی درون ماتریس بتن، به علت توزیع بهتر تنش در المان حجمی نماینده، مدل مکانیک ساختاری ارائه شده، پیش بینی نزدیکتری به نتایج تجربی دارد.



برای ادامه مطالعات به صورت جامع تر پیشنهاد می شود:

- ۱- از تقویت کننده های جدیدی مانند گرافن برای بهبود خواص مکانیکی بتن استفاده نمود.
- ۲- تاثیر پارامترهای دیگری را مانند فاصله پیوند کربن در نانولوله کربنی و پتانسیل هایی مانند ترسوف-برنر را بررسی کرد.
- ۳- در این مقاله از نانولوله کربنی چند دیواره به عنوان تقویت کننده استفاده شده است. می توان در کارهای آینده از نانولوله کربنی تک دیواره و یا دسته نانولوله های کربنی استفاده کرد و تاثیر آن بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت را با نتایج ارائه شده مقایسه کرد.
- ۴- برهمکنش میان نانولوله کربنی و پلیمر از نوع واندروالس می باشد؛ می توان با فرض تشکیل پیوند کوالانسی میان نانولوله و پلیمر، خواص مکانیکی نانوکامپوزیت را مجدداً بررسی کرد.
- ۵- می توان استحکام کششی نهایی را توسط مدل مکانیک ساختاری با بررسی بیشتر رفتار شکست نانوکامپوزیت بتن/نانولوله کربنی شبیه سازی کرد.

### مراجع

1. X. Yu, E. Kwon, "Carbon Nanotube Based Self-sensing Concrete for Pavement Structural Health Monitoring," Contract Number: DTFH61-10-C-00011, 2012.
2. De Ibarra, Y.S., Gaitero, J.J., Campillo, I.: Atomic force microscopy and an indentation of cement pastes with nanotube dispersions. *Physica Status Solidi A* 203, 1076–1081 (2006).
3. Shah, S.P., Konsta-Gdoutos, M.S., Metaxa, Z.S.: Highly-dispersed carbon nanotubereinforced cement-based materials. Patent US 20090229494A1 (2009)
4. Makar, J., Margeson, J., Luh, J.: Carbon nanotube/cement composites-early results and potential applications. In: Third International Conference on Construction Materials: Performance, Innovations and Structural Implications, Vancouver, pp. 1–10 (2005)
5. Sanchez, F.: Carbon nanofibre/cement composites: challenges and promises as structural materials. *International Journal of Materials and Structural Integrity* 3(2/3), 217–226 (2009)
6. Musso, S., Tulliani, J.M., Ferro, G., Tagliaferro, A.: Influence of carbon nanotubes structure on the mechanical behavior of cement composites. *Composites Science and Technology* 69, 1985–1990 (2009)
7. Chaipanich, A., Nochaiya, T., Wongkeo, W., Torkittikul, P.: Compressive strength and microstructure of carbon nanotubes-fly ash cement composites. *Materials Science and Engineering A* 527(4-5), 1063–1067 (2010)
8. Li, H., Liu, Z.Q., Li, Z.W., Ou, J.P.: Study on damage emergency repair performance of a simple beam embedded with shape memory alloys. *Advances in Structural Engineering* 7(6), 495–501 (2004)
9. Sanchez, F.: Carbon nanofibre/cement composites: challenges and promises as structural materials. *International Journal of Materials and Structural Integrity* 3(2/3), 217–226 (2009)
10. Veedu, V.P.: Multifunctional cementitious nanocomposite material and methods of making the same. Patent: US 7666327 B1 (2010)
11. Azhari, F.: Cement-based sensors for structural health monitoring. Dissertation for the Master Degree of Applied Science. University of British Columbia, Vancouver, Canada (2008)
12. Yu, X., Kwon, E.: Carbon-nanotube/cement composite with piezoresistive property. *Smart Materials and Structures* 18, 055010 (2009)
13. Luo, J.L., Duan, Z.D., Li, H.: The influence of surfactants on the processing of multiwalled carbon nanotubes in reinforced cement matrix composites. *Physica Status Solidi* 206(12), 2783–2790 (2009)
14. Cwirzen, A., Habermehl-Cwirzen, K., Penttala, V.: Surface decoration of carbon nanotubes and mechanical properties of cement/carbon nanotube composites. *Advances in Cement Research* 20, 65–73 (2008)
15. Han, B.G., Yu, X., Kwon, E., Ou, J.P.: Piezoresistive MWNTs filled cement-based composites. *Sensor Letters* 8, 344–348 (2010)
16. Konsta-Gdoutos, M.S., Metaxa, Z.S., Shah, P.S.: Highly dispersed carbon nanotube reinforced cement based materials. *Cement and Concrete Research* (2010), doi:10.1016/j.cemconres2010.02.015
17. Yakovlev, G., Kerienè, J., Gailius, A., Girmienè, I.: Cement based foam concrete reinforced by carbon nanotubes. *Materials Science* 12(2), 147–151 (2006)

18. Nasibulin, A.G., Shandakov, S.D., Nasibulina, L.I., Cwirzen, A., Mudimela, P.R., Habermehl-Cwirzen, K., Grishin, D.A., Gavrilov, Y.V., Malm, J.E.M., Tapper, U., Tian, Y., Penttala, V., Karppinen, M.J., Kauppinen, E.I.: A novel cement-based hybrid material. *New Journal of Physics* 11, 023013 (2009)
19. Ludvig, P., Ladeira, L.O., Calixto, J.M., Gaspar, I.C.P., Melo, V.S.: In-situ synthesis of multiwall carbon nanotubes on portland cement clinker. In: 11th International Conference on Advanced Materials, Rio de Janeiro, Brazil (2009)
20. F. Deng, Q. Zheng, An analytical model of effective electrical conductivity of carbon nanotube composites, *Applied Physics Letters* 92 (2008) 071902.
21. T. Takeda, Y. Shindo, Y. Kuronuma, F. Narita, Modeling and characterization of the electrical conductivity of carbon nanotube-based polymer composites, *Polymer* 52 (2011) 3852–3856.
22. C. Feng, L. Jiang, Micromechanics modeling of the electrical conductivity of carbon nanotube (CNT)-polymer nanocomposites, *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 47 (2013) 143–149.
23. C. Lin, H. Wang, W. Yang, Variable percolation threshold of composites with fiber fillers under compression, *Journal of Applied Physics* 108 (2010) 013509.
24. T. Theodosiou, D. Saravanos, Numerical investigation of mechanisms affecting the piezoresistive properties of CNT-doped polymers using multi-scale models, *Composites Science and Technology* 70 (2010) 1312–1320.
25. L. Y. Alamusi, N. Hu, Numerical simulations on piezoresistivity of CNT/polymer based nanocomposites, *Computers Materials & Continua* 20 (2010) 101–117.
26. T. Tallman, K. Wang, An arbitrary strains carbon nanotube composite piezoresistivity model for finite element integration, *Applied Physics Letters* 102 (2013) 011909.
27. C. Feng, L. Jiang, Micromechanics modeling of bi-axial stretching effects on the electrical conductivity of CNT-polymer composites, *International Journal of Applied Mechanics* 7 (2015) 1550005.
28. Hugh O.P. (2004) “*Handbook of Carbon, Graphite, Diamond and Fullerenes*”, Vol. 1, Consultant and Sandia National Laboratories, New Mexico, pp. 12-36.
29. Mantell C. L. (1968) “*Carbon and Graphite Handbook*”, Interscience, New York, pp. 132-141.
30. Iijima S. (1991) “Helical microtubes of graphitic carbon” *Nature*, 354, pp 56.
31. Forbes. (2002) “*an Insider’s Guide to the World of Nanotechnology*”, Wolfe Nanotech Report., 1, pp 9.
32. Hugh O.P. (2004) “*Handbook of Carbon, Graphite, Diamond and Fullerenes*”, Vol. 1, Consultant and Sandia National Laboratories, New Mexico, pp. 12-36.
33. Kelly B.T. (1981), “*Physics of graphite*”, Vol. 1, Applied Science, London, pp. 267.
34. Kelly A. and Macmillan N.H. (1986), “*Strong solids*”, Vol. 1, Oxford University, UK, pp. 184.
35. Bacon R. (1960) “Growth, structure, and properties of graphite whiskers” *J. Appl. Phys.*, 31, 2, pp 283.
36. Overney G., Zhong W., Tomanek D. (1993) “Structural rigidity and lowfrequency vibrational-modes of long carbon tubules” *Z. Phys D. At. Mol. Clusters.*, 27, 1, pp 93.
37. Treacy M.M.J., Ebbesen T.W., Gibson J.M. (1996) “Exceptionally high Young’s modulus observed for individual carbon nanotubes” *Nature*, 381, pp 678.
38. Poncharal P., Wang Z.L., Ugarte D., De Heer W.A. (1999) “Electrostatic deflections and electromechanical resonances of carbon nanotubes” *Science*, 283, pp 1513.
39. Falvo M.R., Clary G.J., Taylor R.M., Chi V., Brooks F.P., Washburn S., et al. (1997) “Bending and buckling of carbon nanotubes under large strain” *Nature*, 389, pp 582.
40. Wong E.W., Sheehan P.E., Lieber C.M. (1997) “Nanobeam mechanics: elasticity, strength, and toughness of nanorods and nanotubes” *Science*, 277, pp 1971.
41. Salvétat J.P., Briggs G.A.D, Bonard J.M., Bacsá R.R., Kulik A.J., Stockli T., et al. (1999) “Elastic and shear moduli of single-walled carbon nanotube ropes” *Phys. Rev. Lett.*, 82, 5, pp 944.
42. Salvétat J.P., Kulik A.J., Bonard J.M., Briggs G.A.D., Stockli T., Metenier K., et al. (1999) “Elastic modulus of ordered and disordered multiwalled carbon nanotubes” *Adv. Mater.*, 11, 2, pp 161.
43. Yu M.F., Files B.S., Arepalli S., Ruoff R.S. (2000) “Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties” *Phys. Rev. Lett.*, 84, 24, pp 5552.

44. Kalamkarov A.L, Georgiades A.V, Rokkam S.K, Veedu V.P, Ghasemi-Nejhad M.N. (2006) “Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties”, International Journal of Solids and Structures., 43, pp 6832–6854.
45. Cooper C.A., Young R.J., Halsall M. (2001) “Investigation into the deformation of carbon nanotubes and their composites through the use of Raman spectroscopy” Compos. Part A. Appl. Sci. Manuf., 32, 3, pp 401.
46. Ruan S.L., Gao P., Yang X.G., Yu T.X. (2003) “Toughening high performance ultrahigh molecular weight polyethylene using multiwalled carbon nanotubes” Polymer, 44, 19, pp 5643.
47. Frankland S.J.V., Caglar A., Brenner D.W., Griebel M. (2002) “Molecular simulation of the influence of chemical cross-links on the shear strength of carbon nanotube–polymer interfaces” J. Phys. Chem B., 106, 12, pp 3046.