

بررسی خواص مکانیکی کامپوزیت سیمان مسلح شده با نانو لوله کربن با استفاده از مدل سازی چندمقیاسی

علی صدرممتازی

استاد گروه عمران، دانشکده فنی، دانشگاه گیلان، رشت، ایران.

حمیدرضا ناصرسعید*

دانشجوی دکتری، گروه عمران، دانشکده فنی، دانشگاه گیلان، رشت، ایران.

چکیده

نانولوله کربنی، محصول لایه برداری شیمیایی گرافیت، به دلیل داشتن نسبت تصویر بالا، قابلیت پخش خوب در آب و خواص مکانیکی عالی، یک افزودنی مناسب برای استفاده به عنوان تقویت کننده نانو در مواد با پایه سیمانی است. در این پژوهش با استفاده از مدل سازی چند مقیاسی تأثیر درصد حجمی، ضریب منطری، جهت گیری و برهم کنش بین سطوح بر خواص مکانیکی نانو لوله های کربنی در ماتریس سیمانی بررسی شد. برای مدل سازی با نرم افزار آباکوس با درک مفهومی المان نماینده حجم از کدهای متلب توسعه یافته و پایتون استفاده شد. برای مشاهده رفتار بین فازی میان ماتریس و نانولوله، تئوری سطح چسبنده استفاده شد. همچنین، نتایج خروجی مدل سازی دینامیک مولکولی برای تعیین پارامترهای سطح چسبنده مورد استفاده قرار گرفت. مدل سازی در وضعیت های پیوند کامل و پیوند محدود بین دو فاز در ماتریس و با بارگذاری محوری فشاری انجام شد. نتایج برای مدل های بتن، بدون تقویت کننده و با ۰/۵، ۱/۰ و ۱/۵ درصد حجمی مسلح کننده نانولوله کربنی و با دو ضریب منظر ۱۰ و ۲۰ بررسی گردید. جهت شناسایی اثربخشی جهت گیری، سه وضعیت جهت گیری تقویت کننده، موازی نیرو، عمود بر نیرو و رندوم شبیه سازی گردید. نتایج نشان داد با افزایش درصد حجمی تقویت کننده، استحکام مکانیکی و چقرمگی بهبود یافت. افزایش ضریب منظر از ۱۰ به ۲۰، افزایش تنش حدالاستیک و اصلاح رفتار پلاستیک در ماتریس را به همراه داشت. ضمناً تغییر در مدل رفتاری پیوند، از پیوند کامل به محدود، بین ۳ تا ۶ درصد کاهش در مقاومت مدل های با ۰/۵ و ۱/۰ درصد الیاف ایجاد نمود.

واژه های کلیدی: نانو لوله کربنی، مدل سازی چندمقیاسی، دینامیک مولکولی، المان نماینده حجم.

* نویسنده مسئول: h_nasersaeed@hotmail.com

۱- مقدمه

سیمانی را به نانوکامپوزیت حسگر یا سنسور تبدیل می‌کند. این خاصیت می‌تواند سرعت و هزینه روند نظارت بر رفتار و سلامت سازه را بهبود بخشد [۱۱].

مدلسازی کامپیوتری یکی از روش‌های بررسی دقیق نانوکامپوزیت‌ها است. این روش به دلیل انعطاف در طراحی و دیدن رفتار ساختار در اندازه‌های متفاوت و همچنین هزینه پایین و سرعت بالا، مورد توجه قرار گرفته است.

در سال‌های گذشته تحقیقاتی در زمینه مدل‌سازی نانوکامپوزیت مسلح‌شده با کربن نانولوله منتشر شده است [۱۲-۱۹]. در این تحقیقات از روش‌های دینامیک مولکولی، المان محدودی و میکرومکانیکی استفاده می‌شود.

از روش مدل‌سازی چند مقیاسی برای تحقیق در خواص مکانیکی نانولوله کربن در این مقاله استفاده شده است. مدل‌سازی در نرم افزار آباکوس و با مفهوم المان نشان‌دهنده حجم صورت پذیرفته است. برای این منظور یک کد متلب به جهت ایجاد، توسعه و پراکنده‌سازی نانوذرات نانولوله کربن در میان ماتریس بتن نوشته شد، و پس از آن برای استخراج داده‌ها و مدل‌سازی از پایتون استفاده شده است. برای بررسی رفتار میان‌فازی ماتریس و پرکننده از تئوری سطح چسبیده استفاده گردیده است. نتیجه دینامیک مولکولی برای برآورد پارامترهای سطح چسبیده مورد استفاده قرار گرفت. در حالت‌های پیوند محدود و کامل، مدل‌سازی بین دو فاز با بارگذاری فشاری صورت گرفت و نمودارهای تنش-کرنش برای هر مدل ترسیم شد.

۲- مدل نانولوله در ماتریس سیمان

۲-۱- مدل نماینده حجم

RVE به اشکال دوبعدی و سه بعدی مدل‌سازی می‌گردد. در این پژوهش از یک RVE سه بعدی در مدل استفاده گردیده است که به شکل رندوم ذرات آن پخش گردیده است. آنالیز مدل نشان‌دهنده حجم در نرم افزار آباکوس صورت گرفته است. کد پایتون^۱ برای مدل RVE نوشته شده است. نانولوله‌های کربن با نسبت‌های L/D در جعبه شبیه‌سازی با کد متلب^۲ نوشته شده است. این کد با استفاده از تکنیک مدل‌سازی مونت کارلو کار

ساخت و بهره‌برداری در سراسر جهان از سیمان که اصلی‌ترین ماده اولیه کامپوزیت‌ها است، باعث شده انسان به بهبود و پیشرفت شرایط ساخت و سازه‌ها پردازد. اما به هر حال سیمان به دلیل ترد بودن و شکنندگی، حساس بودن به ترک، پایین بودن مقاومت کششی و دوام پایین همواره سبب نگرانی‌هایی برای جامعه مهندسی بوده است. تحقیقات بسیار گسترده‌ای راجع به مکانیک شکست در این کامپوزیت‌ها انجام شده است و مسیرهای بسیاری به جهت تقویت رفتار مکانیکی کامپوزیت‌های سیمانی ارائه شده است [۱-۸]. از جمله راه حل‌های قدیمی می‌توان به مسلح کردن ماتریس سیمانی با فلزات، استفاده از افزودنی‌های شیمیایی و یا کم کردن آب به سیمان برای بالا بردن مقاومت و افزایش دوام ماتریس اشاره کرد.

تحقیقات از دهه ۶۰ درباره بتن‌های الیافی شروع شد. از جمله موارد استفاده‌ی این بتن، عرشه پل، دال‌های مسلح، مقاطع بتنی پیش-ساخته و انواع سازه‌های تحت بارهای ثقلی و لرزه‌ای است که سبب افزایش چقرمگی و تاحدودی بالا رفتن مقاومت کششی می‌شود. ساز و کار این بتن، به گونه‌ای است که به دلیل حضور الیاف میکروترک‌ها جایگزین ترک‌ها می‌شوند و استحکام بتن را تا حدودی بالا می‌برند. اما جایگزین ترک‌ها در مقیاس نانو نمی‌شوند.

مواد نانو در سه دسته بندی صفر بعدی، یک بعدی و دو بعدی جای می‌گیرند. مواد صفر بعدی که ضریب منظر بالایی ندارند، نمی‌توانند از رشد میکروترک‌ها جلوگیری کنند. مواد یک بعدی با وجود توانایی خوبی که در واکنش با فراورده‌های شامل هیدراسیون دارند، در ماتریس کلوخه ایجاد می‌کنند.

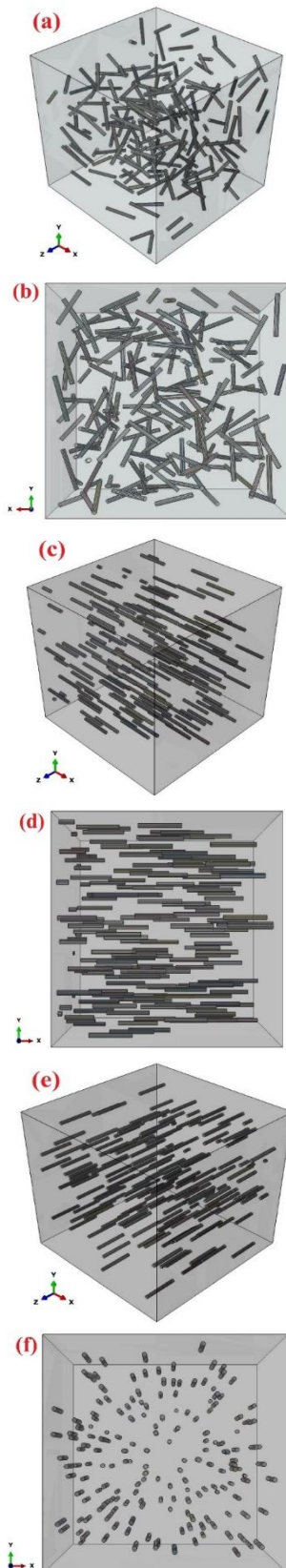
نانومواد دو بعدی مانند گرافن خواص مکانیکی این محصولات را توسط پل زدن بین میکروترک‌ها، افزایش می‌دهد [۹].

مساحت سطح موادی مانند کربن نانولوله بسیار بالا است که سبب افزایش واکنش پذیری با محصولات هیدراسیون می‌شود [۱۰]. این ذرات می‌توانند منفذهای سیمان را پر کرده و ریزساختار متراکمی ایجاد کنند که منجر به تولید بتن با سطح خود تمیز شونده و آنتی-باکتریال می‌شوند.

از دیگر مزایای استفاده از نانولوله کربن این است که کامپوزیت

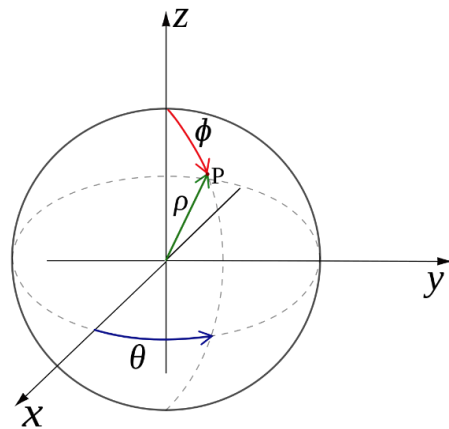
² Matlab

¹ Python



شکل ۲- تصاویر RVE در جهت گیری: (a) و (b) تصادفی، (c) و (d) در جهت بارگذاری و (e) و (f) عمود بر جهت (بارگذاری در جهت x است)

می‌کند. برای پخش و توزیع این الیاف در RVE به مختصات اولیه $(P = [x_1, y_1, z_1])$ و جهات (θ, ϕ) نیاز است (شکل ۱).



شکل ۱- مختصات نقطه در فضای کروی

برای ایجاد هر CNT در سه بعد باید یک عدد رندوم مشابه نقطه P1 ایجاد شود (معادله ۱). در مرحله بعد با معادلات ۲ و ۳ نقطه پایانی $(P_2 = [x_2, y_2, z_2])$ محاسبه گردد.

$$\begin{aligned} x_1 &= rand(L_{RVE} - 2r - \frac{L}{2}) \\ y_1 &= rand(L_{RVE} - 2r - \frac{L}{2}) \\ z_1 &= rand(L_{RVE} - 2r - \frac{L}{2}) \end{aligned} \quad (1)$$

که L_{RVE} در آن طول کل RVE است. r و L به ترتیب شعاع و طول لوله‌های نانوکربن و $rand$ عددی تصادفی خواهد بود که مقدار عددی آن در محدوده $[0, 1]$ است.

$$\begin{aligned} \theta &= rand(2\pi) \\ \phi &= \arccos(2 \times rand - 1) \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 + (L \sin(\phi) \times \cos(\theta)) \\ y_2 &= y_1 + (L \sin(\phi) \times \sin(\theta)) \\ z_2 &= z_1 + (L \cos(\phi)) \end{aligned} \quad (3)$$

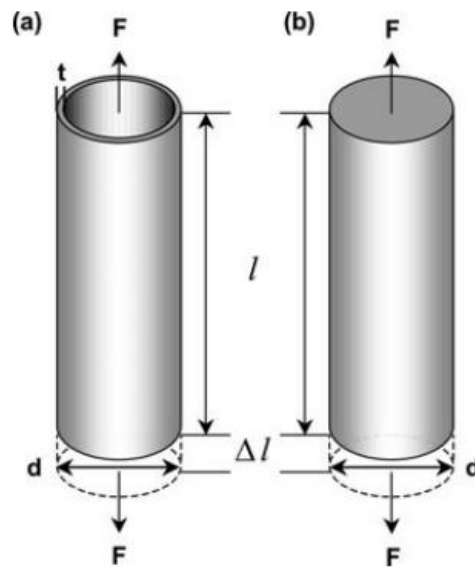
لازم به یادآوری است در RVE نباید هیچ‌گونه تداخلی بین نانولوله‌ها وجود داشته باشند. به همین منظور پس از ایجاد نقاط ابتدایی و انتهایی هر نانولوله، برای شرایط تداخل چک می‌شود. در صورت تداخل حذف و یک مختصات جدید جایگزین خواهد شد. این فرایند ادامه می‌یابد تا زمانی که میزان درصد حجمی پرسونده در ماتریس تامین شود.

تصاویر RVE های تولید شده با سه جهت مختلف در شکل ۲ آورده شده است.

۲-۲- مدل سازی نانولوله کربنی

نانولوله کربن جز مواد ناهمسانگرد^۱ محسوب می گردد، در بسیاری از پژوهش ها فرضیات همسانگرد^۲ بودن منجر به نتایج قابل پذیرش شده است [۲۰]. نانولوله ها در این پژوهش به صورت پر مدل سازی شده است. لازم به تذکر است از خواص مدول یانگ موثر در این مدل سازی استفاده شده است. که در ان شرایط یکسان بودن تنش^۳ مدنظر قرار گرفته است [۲۰]. همان طور که در شکل ۳ قابل مشاهده است، با اعمال بار یکسان در دو نمونه، تغییر شکل برابر خواهد بود. بنابراین:

$$\varepsilon_{NT} = \varepsilon_{eff} \quad (۴)$$



شکل ۳- تصویر (a) نانولوله ی کربنی و (b) ساختار موثر مورد استفاده برای مدل سازی [۱۷]

زیر نویس NT برای وضعیت واقعی CNT و زیر نویس eff برای وضعیت موثر استفاده شده است (معادله ۴).

مدول یانگ با فرض الاستیک و به صورت زیر معرفی می شود (معادلات ۵ و ۶):

$$E_{eff} = \frac{\sigma_{eff}}{\sigma_{NT}} E_{NT} \quad (۵)$$

$$E_{eff} = \frac{A_{NT}}{A_{eff}} E_{NT} \quad (۶)$$

مدول الاستیک موثر برای نانولوله ی کربنی با ضخامت دیوار (t) و قطر نمونه پر (d) از معادله ۷ زیر بدست می آید [۱۷].

$$E_{eff} = \frac{4t}{d} E_{NT} \quad (۷)$$

مشخصات هندسی و مدول CNT که در مدل سازی استفاده شده است در جدول ۱ نشان داده شده است. مدول الاستیسیته CNT حاصل از معادله ۷ معادل سازی و در محاسبات استفاده گردید.

جدول ۱- خواص CNT استفاده شده در مدل سازی

نانو کامپوزیت CNT/اپوکسی				
مدول یانگ (TPa)	ضریب پواسون	قطر خارجی (nm)	طول (nm)	ضریب منظر
۱	۰/۴	۵۰	۵۰۰	۱۰

۲-۳- مدل سازی رفتار بتن

رابطه تنش- کرنش بتن با وجود رفتار پیچیده ای که دارد، تحت بار گذاری به شدت نامتقارن و غیر خطی است.

در بررسی های گذشته مدل سازی بتن می توان به هانگستاد [۲۱]، پوپویچ [۲۲]، و مایکاو [۲۱] اشاره کرد. در این پژوهش به از مدل پوپویچ به دلیل کاربرد بالا استفاده شده است که به تفصیل در [۲۱] شرح داده شده است.

در نمودار تنش- کرنشی پیش رو (نمودار ۱) از روابط ارائه شده توسط پوپویچ استفاده شده است. در این روابط، با انتخاب مقاومت فشاری، ضرایب k و n را با معادلات ۹ و ۱۰ تعیین می کنیم. محاسبه کرنش ها با معادله ۸ انجام می شود. و مدول الاستیک فشاری بعد از محاسبه تنش- کرنش بتن توسط از معادله ۱۱ محاسبه می شود.

$$\sigma_{ci} = \left(\frac{\varepsilon_{ci}}{\varepsilon_c} \right) f'_c \frac{n}{n - 1 + \left(\frac{\varepsilon_{ci}}{\varepsilon_c} \right)^{nk}} \quad (۸)$$

$$n = 0.80 + \frac{f'_c}{17} \quad (f'_c \text{ in MPa}) \quad (۹)$$

$$k = \begin{cases} 1.0 & \text{for } 0 < \varepsilon_{ci} < \varepsilon_c \\ 0.67 + \frac{f'_c}{62} \geq 1.0 & \text{for } \varepsilon_{ci} > \varepsilon_c \end{cases} \quad (۱۰)$$

$$E_c = 4700 \sqrt{f'_c} \quad (۱۱)$$

⁴ Hognestad

⁵ Popovics

⁶ Maekawa

¹ Anisotropic

² Isotropic

³ Iso strain

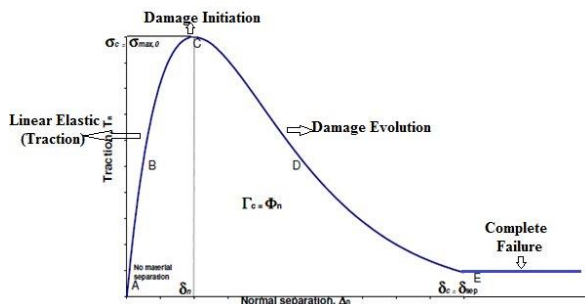
$$Damage = 1 - \frac{\sigma_t}{f_t} \quad (14)$$

در این پژوهش برای ساده‌سازی مدل‌سازی خواص رفتاری بتن در مقیاس ماکرو تحت عنوان ماده‌ای همگن با ریزترک‌ها و در مقیاس مزو، بتن با فاز مصالح درشت، مصالح ریز و ملات سیمان تعریف شد.

۴-۲- مدل‌سازی ناحیه چسبنده

یکی از موارد مهم برای مدل‌سازی، استحکام سطح تماس است که تأثیر زیادی در مقاومت، رفتار شکست و استحکام در نانو کامپوزیت را دارا است [۱۷]، مدل ناحیه تماس^۱ یکی از معروف-ترین این مدل‌ها است.

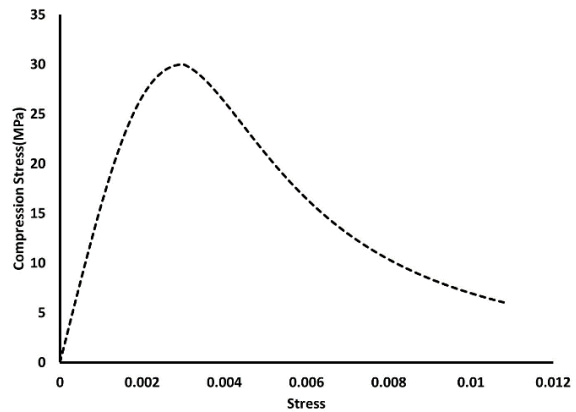
نمودار شماتیک کشش جدایش را می‌توانید در (نمودار ۳) مشاهده کنید. اشکال کلی این نمودار عبارتند از: قسمت اول ناحیه خطی^۲، سپس آغاز آسیب^۳ و قسمت سوم ناحیه پس از آسیب^۴.



نمودار ۳- الگوی شماتیک نمودار کشش-جدایش [۲۴]

نمودار ۴، کشش-جدایش در حالت باربرداری و بارگذاری خطی را نشان می‌دهد. سه پارامتر برای مشخصه‌یابی این نمودار تعریف می‌شود. که دارای دو پارامتر آن وابسته و پارامتر دیگر مستقل است. رشد خرابی با مشخص کردن پارامترهای تنش آغاز آسیب (پیک کشش یا N_{max}) و میزان جابه‌جایی تا رسیدن به جدایش کامل (δ_n^{fail}) می‌باشد، قابل تعریف می‌شود.

ناحیه تماس بین CNT و ماتریس در نرم افزار المان محدودی آباکوس مدل‌سازی و توسط قوانین کشش-جدایش تعریف شد. در نرم‌افزار آباکوس رفتار چسبنده را می‌توان به دو صورت تعریف کرد. اول، مبنی بر سطح^۵ و دوم، مبنی بر المان^۶. از سه پارامتر برای

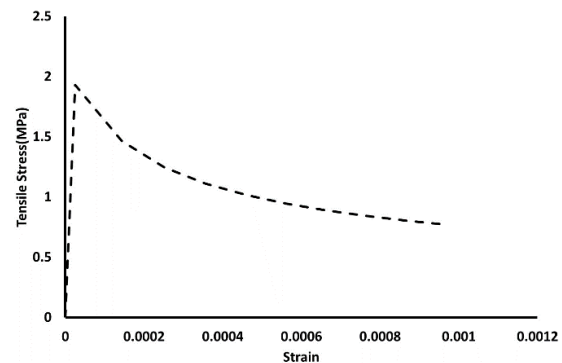


نمودار ۱- نمودار تنش کرنش فشاری که با مدل پوپویچ محاسبه شده است

برای رفتار کششی بتن در این پژوهش از مدل شیما استفاده شده است [۲۳]، روند کار بدینگونه است که با به‌دست آوردن خواص فشاری از طریق مدل پوپویچ مقاومت کششی با محاسبه f_t به‌دست می‌آید و سپس تنش‌ها را محاسبه می‌کنیم (در این پژوهش $\epsilon_t = 0.0001$). بوسیله داده‌های بدست آمده از محاسبات، نمودار تنش کرنش کششی (نمودار ۲) رسم می‌شود (معادلات ۱۲ و ۱۳).

$$f_t = 0.2(f'_c)^{\frac{2}{3}} (MPa) \quad (12)$$

$$\sigma = f_t \left(\frac{\epsilon_{tu}}{\epsilon} \right)^c \quad (13)$$



نمودار ۲- نمودار تنش کرنش کششی بتن محاسبه شده با مدل شیما در مقاله لی و همکاران [۲۴]، مدلی که در معادله ۱۴ ارائه شده، معرفی شده است. رفتار تنش کرنش بتن در فشار و کشش محاسبه شده و توسط این مدل رفتار سخت شونده و نرم شونده و توضیح کرنش‌ها را در لحظه می‌توان مشاهده کرد.

⁴ Damage evaluation

⁵ Based on surface

⁶ Based on element

¹ Cohesive zone

² Linear elastic

³ Damage initiation

مدل می‌شود. این معیارها با دو رویکرد انرژی جدایش، و جابجایی تا جدایش کامل تعریف می‌شوند. در اسناد آباکوس تفاوت این روش‌ها با هم بررسی شده است. معیار قانون توان به صورت معادله ۱۸ تعریف می‌گردد.

$$\left(\frac{G_n}{G_n^C}\right)^\alpha + \left(\frac{G_s}{G_s^C}\right)^\alpha + \left(\frac{G_t}{G_t^C}\right)^\alpha = 1 \quad (18)$$

در معادله فوق G_n ، G_s و G_t کار انجام گرفته به وسیله نیروی کشش در جدایش است. همچنین G_n^C ، G_s^C و G_t^C اندازه انرژی جدایش در جهت‌های متفاوت هستند. مقدار α با پیشنهاد مقاله [۲۸] انتخاب شده است.

معیار D پارامتری است که میزان خرابی رخ داده در سطح تماسی را مشخص می‌کند. مقدار D می‌تواند عددی بین صفر و یک باشد. زمانی که این معیار بر اساس انرژی بوده و شکل خطی داشته باشد پارامتر D با معادله ۱۹ محاسبه خواهد شد.

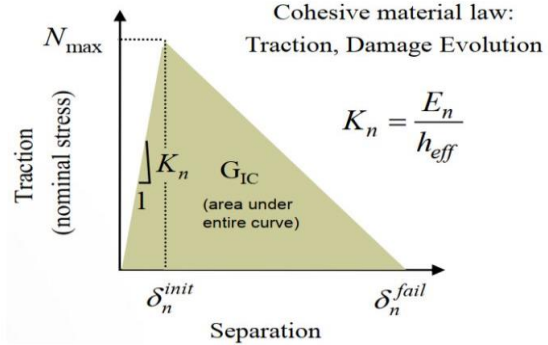
$$D = \frac{\delta_m^f (\delta_m^{\max} - \delta_m^0)}{\delta_m^{\max} (\delta_m^f - \delta_m^0)} \quad (19)$$

۲-۴-۲- برهم کنش سطحی

از مهم‌ترین و اصلی‌ترین پارامترهای این تحقیق برهم کنش بین سطوح می‌باشد. یکی دو شرطی که برای تعریف برهم کنش بین پرکننده و ماتریس تعریف کرده‌ایم قید گره زدن است. که در آن گره‌های CNT به گره‌های روی ماتریس بتن اتصال داده شده- است و انتقال تمام بار توسط سطح تماس انجام می‌شود.

نوع دیگر، محدود کردن حالت چسبندگی است. در این پژوهش از اطلاعات چسبندگی بین بتن و CNT استفاده شد. در تحقیقی که توسط عزیززاده ۲۷، برای نانوکامپوزیت پلیمر تقویت شده با CNT چند لایه انجام شد، چسبندگی لایه‌های CNT را که همان ساختار نانولوله کربن است، به وسیله مدل‌سازی دینامیک مولکولی بدست آورده است. نتایج مورد نیاز در (جدول ۲) آورده شده است. استخراج این خواص از نمودارهای کشش-جدایش (نمودار ۵) انجام شده است. نتایج ذکر شده در جدول ۲ مربوط به نمونه C-1 می‌باشد. انرژی جدایش همان سطح زیر نمودار و فاصله جدایش نقطه شروع جدایش است. همچنین اندازه کشش مقدار تنش کششی در نقطه پیک یا همان شروع جدایش است. پس از بررسی و اطمینان پیدا کردن از روند تحلیل، مقدار خواص ورودی به

تعریف ناحیه چسبنده استفاده شده است که عبارتند از مقاومت، سختی و میزان آزاد سازی انرژی. در این پژوهش برای مدل‌سازی ناحیه تماس از مدل سطح چسبنده استفاده شده است.



نمودار ۴- الگوی شماتیک باربرداری و بارگذاری خطی از نمودار کشش-جدایش [۲۶]

۱-۴-۲- روابط ساختاری

تعریف ناحیه الاستیک اولیه خطی در نمودار کشش-جدایش توسط ماتریس انجام می‌شود، که تنش در جهت برشی و در جهت عمود، به جابه‌جایی متناظر آن مرتبط می‌شود. در نرم‌افزار آباکوس همگی مدل‌های کشش-جدایش ناحیه الاستیک خطی دارند. رابطه بین جابجایی و تنش با معادله ۱۵ تعریف می‌شوند.

$$t = \begin{Bmatrix} tn \\ ts \\ tt \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} knn & kns & knt \\ kns & kss & kst \\ knt & kst & ktt \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \delta n \\ \delta s \\ \delta t \end{Bmatrix} = K \delta \quad (15)$$

زیر نویس n به جهت نرمال و زیر نویس s و t به جهت‌های برشی اشاره دارد. δ بردار جابجایی و t بردار تنش است. برای حالاتی که بردار برشی و نرمال به صورت جدا در نظر گرفته شوند، معادله ۱۶ را داریم.

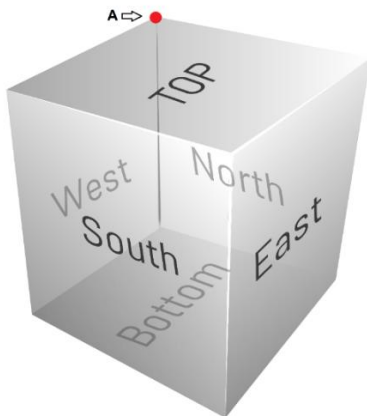
$$t = \begin{Bmatrix} tn \\ ts \\ tt \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} knn & 0 & 0 \\ 0 & kss & 0 \\ 0 & 0 & ktt \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \delta n \\ \delta s \\ \delta t \end{Bmatrix} = K \delta \quad (16)$$

برای مشخص کردن شروع خرابی از معیار خرابی تنش اسمی درجه دوم استفاده شده است. که به صورت معادله ۱۷ تعریف می‌شود.

$$\left(\frac{\langle \sigma_n \rangle}{N_{max}}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_s}{S_{max}}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_t}{T_{max}}\right)^2 = 1 \quad (17)$$

در معادله بالا σ_n ، σ_s و σ_t تنش‌ها در جهت برشی و عمود هستند. و پارامترهای max ، بالاترین حد نمودار کشش جدایش که مرز شروع آسیب است را مشخص می‌کنند.

مسیر خرابی تا گسستگی کامل در این نرم‌افزار با معیارهای متفاوتی

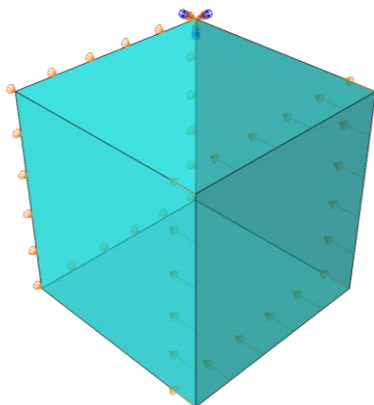


شکل ۴- شماتیک از نامگذاری صفحات RVE جهت تعریف شرایط مرزی

جدول ۳- شرایط مرزی اعمال شده برای حل مسئله (U و UR بیانگر جابه‌جایی و جابه‌جایی پیچشی می‌باشند)

نقطه A	West	صفحه یا زاویه
$U_1=U_2=U_3=$ $UR_1=UR_2=UR_3=0$	$U=0$	شرایط مرزی

با جابه‌جایی صفحه East، بارگذاری RVE در جهت محور x انجام شد. برای حصول بارگذاری صفحه‌ای با اندازه $0.1 \mu\text{m}$ برابر طول RVE که معادل 0.009 کرنش می‌باشد، استفاده شد. قیود مرزی و طرح شماتیک بارگذاری شکل ۵ نشان داده شده است.

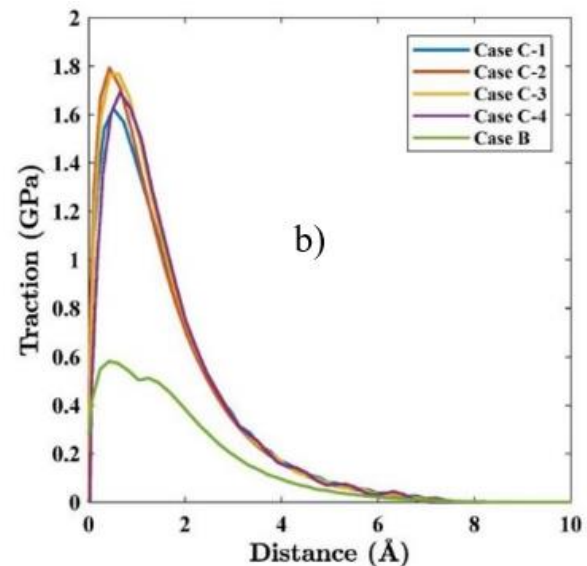
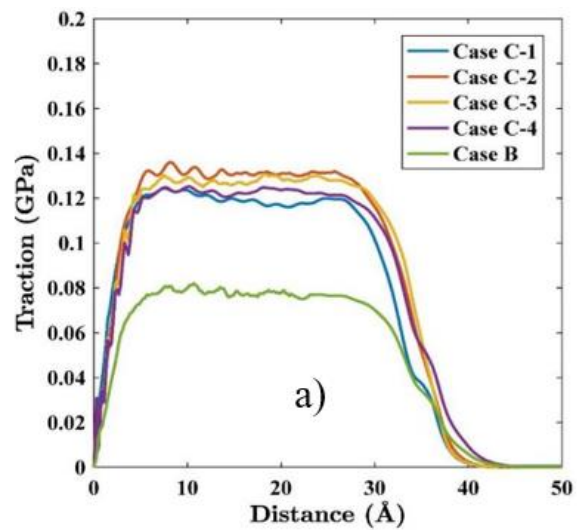


شکل ۵- طرح شماتیک از بارگذاری انجام شده بر روی RVE

۴-۲- شبکه‌بندی

در این مرحله، انتخاب اندازه و نوع شبکه المان‌ها، روند زمان و دقت تحلیل مهم است. روش شبکه‌بندی، آزاد انتخاب شد. در RVE، حداقل $2/5$ میلیون المان برای دستیابی به پاسخی همگرا احتیاج است. در مدل پژوهش حاضر اندازه شبکه از $3/5$ میلیون

(۱/۴ درصد) کاهش پیدا کرد و تحلیل مجدد انجام شد.



نمودار ۵- نمودار کشش-جدایش

جدول ۲- خواص میانگین پیک کشش، انرژی جدایش

فاصله جدایش (Å) کامل	انرژی جدایش (mJ/m^2)	پیک کشش		جهت جدایش (Å)
		اندازه کشش (GPa)	فاصله (Å)	
۷/۵۹	۳۴۵/۱۳	۱/۶۲۵	۰/۵۱۰	عمود
۴۲/۹۳	۳۷۸/۸۸	۰/۱۲۱	۵/۲۷	برشی

۳-۲- شرایط مرزی

شرایط مرزی این مسئله در نرم‌افزار آباکوس تعریف شد. در شکل ۴، شماتیک از نامگذاری صفحات RVE جهت تعریف شرایط مرزی مشاهده می‌کنید، تعریف شرایط مرزی در با زاویه‌های در تصویر و نام‌گذاری وجه‌های RVE انجام شده است.

برای RVE های ساده و برای نمونه پیچیده تا ۵ میلیون شبکه استفاده شد. نمایی از شبکه RVE با پخش رندوم CNT در شکل ۶ آورده شده است

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{\Omega_m} \int_{\Omega_m} \sigma_m d\Omega \quad (20)$$

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{\Omega_m} \int_{\Omega_m} \varepsilon_m d\Omega \quad (21)$$

که در آن $\langle \sigma \rangle$ و $\langle \varepsilon \rangle$ تنش و کرنش و Ω_m تمام حجم المان‌ها می‌باشد. کد پایتون برای فرآیند همگن سازی توسعه داده شد. که با محاسبه نتایج تنش-کرنش در ۲۰ استپ زمانی با استفاده از معادلات ۲۰ و ۲۱ نقاط نمودار تنش کرنش توسط این کد تحویل داده می‌شود.

۶-۴-۲- اعتبارسنجی

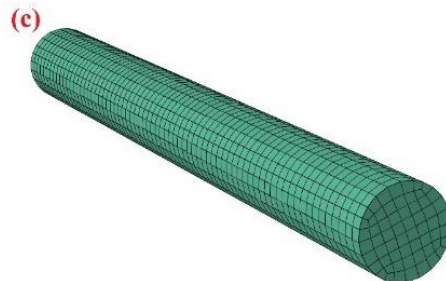
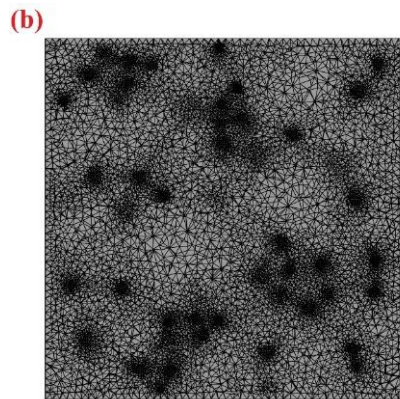
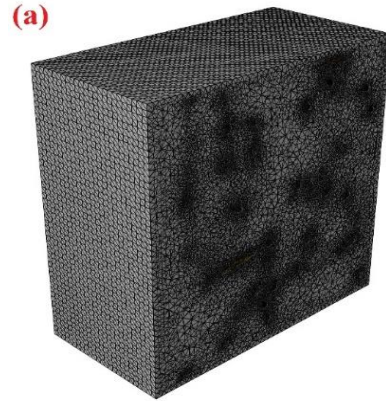
برای اعتبارسنجی مربوط به تحلیل نتایج پژوهش حاضر، به بررسی مقاله پاپادوپولوس و همکاران سال ۲۰۱۷ پرداخته شد [۳۰]. در این پژوهش خواص مکانیکی کامپوزیت سیمانی مسلح شده با نانولوله کربن با استفاده از مدل سازی چندمقیاسی بررسی گردید. روش به کار برده شده در این مقاله برای تجزیه و تحلیل اطلاعات به صورت سلسله مراتبی، مقیاس بندی ابعاد جعبه شبیه سازی در مدل المان محدود و در چهار مقیاس انجام شده است. درصدهای وزنی تقویت کننده‌ی به کار رفته در ماتریس کامپوزیت سیمانی، ۰/۱، ۲/۰ و ۱۰ درصد می‌باشد. نتایج آنالیزها نشان از بهبود رفتار مکانیکی مدل‌های مسلح شده با نانولوله کربن و با جهت گیری تقویت کننده‌ها بصورت رندوم، بین ۵٪ تا ۱۲٪ نسبت به نمونه غیرمسلح بوده است. همچنین در بارگذاری‌های کششی، تنش‌های متناظر این بارگذاری نسبت به تغییرات درصد تقویت کننده‌ها حساسیت چندانی نشان نداد.

۳- تفسیر و تحلیل نتایج مدل سازی

۳-۱- تأثیر درصد حجمی بر خواص مکانیکی

در بررسی درصد حجمی نانولوله‌های کربنی در ماتریس سیمانی RVE، ماتریس با نسبت‌های ۰/۵ تا ۱/۵ درصد الیاف ساخته شد. نتایج حاصله به شرح زیر می‌باشد (نمودار ۶):
- اضافه نمودن نانولوله (الیاف) تأثیر چندانی در شیب منحنی تنش-کرنش ندارد (سختی ثابت).

- اضافه نمودن ۰/۵ درصد الیاف سبب جهش ۱۹ درصدی در نتایج مقاومت مکانیکی (مقاومت فشاری) نمونه بتنی گردیده است.

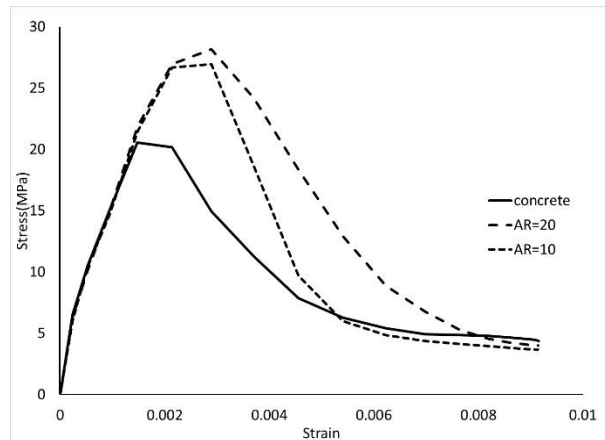


شکل ۶- (a) RVE برش خورده (b) نمای دو بعدی از مش (c) RVE CNT مش زده

۵-۴-۲- همگن سازی

در طرح همگن سازی این پژوهش از روش‌هایی استفاده شده که در پژوهش‌های دیگر [۲۹،۳۰] بکار رفته است. همگن سازی روشی است برای محاسبه مقادیر ماکروسکوپیک تنش-کرنش با استفاده از اندازه‌هایی که در مقیاس میکرو بدست آمده است. در این روش مواد ناهمگن توسط همگن سازی آماری فرض می‌شوند. این معادلات به صورت زیر نوشته می‌شوند (معادله ۲۰ و ۲۱).

نظیر کرنش ۰/۰۰۵۶ در ضریب منظر ۱۰ و تنش نظیر کرنش ۰/۰۰۸ در ضریب منظر ۲۰ با نمودار بتن شاهد تلاقی داشته است.



نمودار ۷- مقایسه ضریب منطری در پیوند کامل

۳-۳- تأثیر جهت گیری نانو ذرات بر خواص مکانیکی

در بررسی جهت گیری نانو ذرات کربنی در ماتریس سیمانی نتایج زیر حاصل گردید (نمودار ۸):

- مدل سازی برای سه وضعیت جهت گیری (موازی نیرو- عمود بر نیرو- رندوم) و با دو تراکم نیم و یک درصد حجمی نانو ذرات در ماتریس انجام گردید. بهترین نتایج در خواص مکانیکی در وضعیت جهت گیری همسو با نیرو (موازی) مشاهده گردید که قابل تصور نیز بوده است.

- مشاهده گردید فقط در وضعیت جهت گیری موازی، افزایش درصد حجمی از نیم به یک درصد تأثیر چندانی در نتایج مقاومت فشاری مدل حاصل نگردید. این افزایش در دو وضعیت عمود بر نیرو و رندوم با کاهش ۲/۸ درصد و ۲/۵ درصدی مقاومت فشاری همراه بوده است.

- با افزایش درصد حجمی نانو ذرات کربنی تغییرات مقاومتی از جهت گیری موازی با وضعیت های عمود بر نیرو و رندوم کاهش بیشتری در نتایج مقاومت مکانیکی فشاری در جعبه شبیه سازی مشاهده گردید.

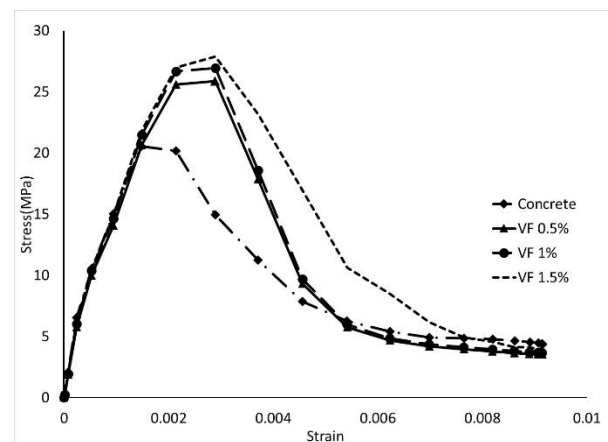
- روند تغییرات مقاومتی در نتایج مدول الاستیسیته مماسی نیز روند مشابهی داشته است. البته بیشترین میزان در جهت گیری رندوم و با درصد حجمی یک درصد (۲۵/۷۸ GPa) بوده است.

- برخلاف مقاومت مکانیکی، تغییرات پارامتر جهت گیری الیاف در مدول الاستیسیته بسیار کم و ناچیز بوده است.

تغییرات مقاومتی با افزایش نانو ذرات تا ۱/۵ درصد، افزایش مجدد ۹ درصدی را به همراه داشته است.

- نمودار مربوط به رفتار پلاستیک بتن نسبت به نمونه شاهد در تنش نظیر کرنش ۰/۰۰۵۴، در درصد حجمی ۰/۵ و ۱/۰ درصد و تنش نظیر کرنش ۰/۰۰۷۸، در درصد حجمی ۱/۵ درصد با نمودار بتن شاهد تلاقی داشته است.

- چقرمگی (طاقة) برای نمونه های با نانو ذرات با درصد حجمی ۰/۵ و ۱/۰ نسبت به نمونه شاهد با افزایش ۱۴ درصدی و برای درصد حجمی ۱/۵ با افزایش ۲۲ درصدی به همراه بوده است.



نمودار ۶- تأثیر درصد حجمی بر خواص مکانیکی (نمودار تنش کرنش)

۳-۲- تأثیر ضریب منطری در پیوند کامل

برای دو ضریب منظر ۱۰ و ۲۰ و یک نمونه شاهد تغییرات تنش-تنجش بررسی گردید و نتایج زیر حاصل گردید (نمودار ۷):

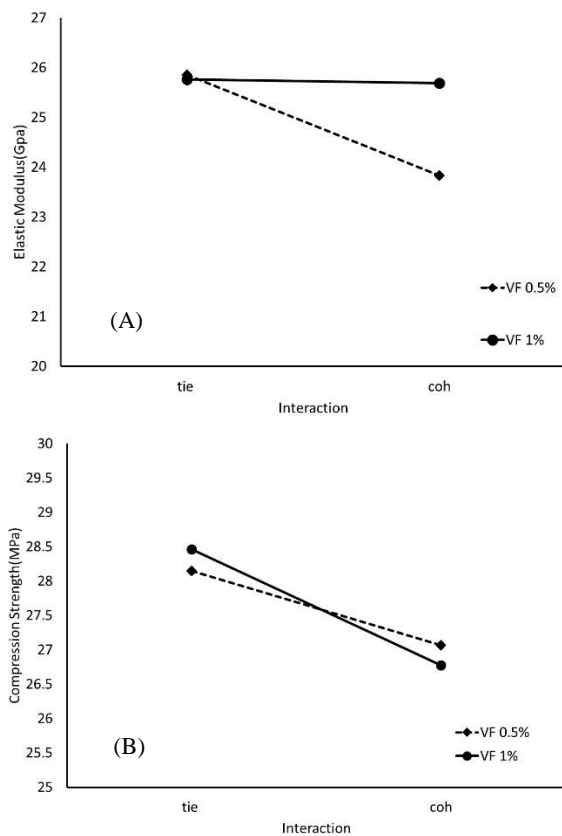
- در نمودار تنش-تنجش، تنش حد الاستیک خطی در نمونه بتن شاهد در کرنش نظیر ۰/۰۰۱۵ ایجاد گردید (پله که به وضوح قابل مشاهده است). در مدل با نانو ذرات با ضریب منظر ۱۰ و ۲۰ این تنش در کرنش نظیر ۰/۰۰۲۱ مشاهده گردید.

- تنش تسلیم در ماتریس بتنی با اضافه نمودن نانو ذرات با ضریب منظر ۱۰ و ۲۰ در مدل به ترتیب با افزایش ۲۷ و ۳۲ درصدی نسبت به بتن شاهد به همراه بوده است.

- چقرمگی (طاقة) برای نمونه های با نانو ذرات با ضریب منظر ۱۰ و ۲۰ نسبت به نمونه شاهد با افزایش ۱۶ و ۲۵ درصدی به همراه بوده است.

- نمودار مربوط به رفتار پلاستیک بتن نسبت به نمونه شاهد در تنش

رفتاری با پیوند محدود این افزایش سبب افزایش ۸/۰ درصدی در نتایج مدول الاستیسیته یانگ شده است.



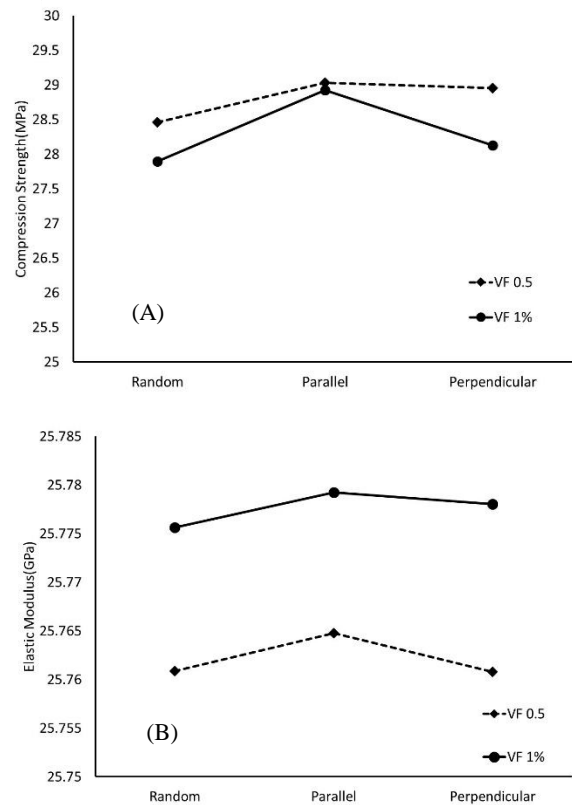
نمودار ۹- تأثیر بر هم کنش بین سطوح بر (A) مدول الاستیک و (B) مقاومت فشاری

۴- خلاصه نتایج

در محدوده تحلیل‌های انجام گرفته با استفاده از مدل‌سازی چندمقیاسی و با درک مفهوم المان نماینده حجم، بررسی تأثیر درصد حجمی، ضریب منطری، جهت‌گیری و برهم‌کنش بین سطوح بر خواص مکانیکی نانو لوله‌های کربنی در ماتریس سیمانی بررسی شد و نتایج زیر حاصل گردید:

- در بررسی درصد حجمی نانولوله‌های کربنی در ماتریس سیمانی RVE، ماتریس با نسبت‌های ۰/۵ تا ۱/۵ درصد الیاف ساخته شد. با افزایش میزان الیاف برای مقادیر ۰/۵، ۱/۰ و ۱/۵ درصدی، روند افزایشی در استحکام مکانیکی از ۱۹ تا ۲۸ درصد بوجود آمد. همچنین چقرمگی نیز با روند رو به رشدی در محدوده ۱۴ تا ۲۲ درصدی به همراه بود.

- در بررسی تأثیر ضریب منظر، برای دو ضریب منظر ۱۰ و ۲۰ و



نمودار ۸- تأثیر جهت‌گیری نانو ذرات بر (A) مقاومت فشاری و (B) مدول الاستیک

۴-۳- تأثیر بر هم کنش بین سطوح بر خواص مکانیکی

نتایج مدل‌سازی در وضعیت‌های پیوند کامل و پیوند محدود بین دو فاز در ماتریس کامپوزیت و با بارگذاری محوری فشاری به شرح زیر گزارش می‌گردد (نمودار ۹):

- افزایش درصد حجمی از ۰/۵ به ۱/۰ با افزایش یک درصدی مقاومت فشاری در پیوند کامل (Tie) و کاهش ۱/۲ درصدی در پیوند محدود (Cohesive) گردیده است.

- تغییر در مدل رفتاری و استفاده از نتایج دینامیک مولکولی در انتخاب تئوری سطح چسبنده سبب تغییر کاهنده در نتایج مقاومت فشاری گردید.

- در ماتریس با ۰/۵ درصد حجمی نانولوله، تغییر در تئوری ناحیه چسبنده از پیوند کامل به محدود در مدل سبب کاهش ۳/۰ درصدی مقاومت و در ماتریس با ۱/۰ درصد حجمی سبب کاهش ۶/۰ درصدی مقاومت گردید.

- در مدل رفتاری با پیوند کامل، با افزایش الیاف (نانولوله کربن) از ۰/۵ به ۱/۰، تأثیری در مدول یانگ ایجاد نگردید ولی در مدل

impact of graphite nanoplatelets (GNPs), *Ceram Int.* 47 (2021) 20019–20031. <https://doi.org/10.1016/J.CERAMINT.2021.04.012>

[3] V. v. Tyukavkina, E.A. Shchelokova, A. v. Tsyryatyeva, A.G. Kasikov, *TiO₂-SiO₂ nanocomposites from technological wastes for self-cleaning cement composition*, *Journal of Building Engineering.* 44 (2021) 102648. <https://doi.org/10.1016/J.JOBE.2021.102648>.

[4] L. Wang, F. Aslani, *Mechanical properties, electrical resistivity and piezoresistivity of carbon fibre-based self-sensing cementitious composites*, *Ceram Int.* 47 (2021) 7864–7879. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.11.133>.

[5] Toward a better understanding of multifunctional cement-based materials: The impact of graphite nanoplatelets (GNPs) - ScienceDirect, (n.d.). <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0272884221010518> (accessed August 23, 2022).

[6] A.M. Onaizi, G.F. Huseien, N.H.A.S. Lim, M. Amran, M. Samadi, *Effect of nanomaterials inclusion on sustainability of cement-based concretes: A comprehensive review*, *Constr Build Mater.* 306 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2021.124850>

[7] F. Babak, H. Abolfazl, R. Alimorad, G. Parviz, *Preparation and mechanical properties of graphene oxide: Cement nanocomposites*, *The Scientific World Journal.* 2014(2014). <https://doi.org/10.1155/2014/276323>.

[8] X. Li, A.H. Korayem, C. Li, Y. Liu, H. He, J.G. Sanjayan, W.H. Duan, *Incorporation of graphene oxide and silica fume into cement paste: A study of dispersion and compressive strength*, *Constr Build Mater.* 123(2016)327–335. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2016.07.022>.

[9] H. Yang, H. Cui, W. Tang, Z. Li, N. Han, F. Xing, *A critical review on research progress of graphene/cement based composites*, *Compos Part A Appl Sci Manuf.* 102 (2017) 273–296. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2017.07.019>.

[10] J.G. Sanjayan, C.M. Wang, W.H. Duan, S. Chuah, Z. Pan, *Nano reinforced cement and concrete composites and new perspective from graphene oxide*, *Constr Build Mater.* 73(2014)113–124. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2014.09.040>.

[11] V. Papadopoulos, P. Seventekidis, G. Sotiropoulos, *Stochastic multiscale modeling of graphene reinforced composites*, *Eng Struct.* 145 (2017) 176–189.

یک نمونه شاهد، تنش حدالاستیک نسبت به نمونه شاهد برای دو ضریب منظر ۱۰ و ۲۰ به ترتیب ۲۷ و ۳۲ درصد افزایش یافت و کرنش نظیر این تنش نیز از ۰/۰۰۱۵ در نمونه شاهد به ۰/۰۰۲۱ در ضریب منظر ۱۰ و ۲۰ تغییر رو به رشد را نشان داد. همچنین اصلاح رفتار پلاستیک و افزایش نرمی در ماتریس کامپوزیت با افزایش ۱۶ و ۲۵ درصدی چقرمگی نمونه‌های مسلح شده نسبت به نمونه شاهد همراه بوده است.

- در بررسی جهت گیری نانولوله‌های کربنی در ماتریس سیمانی، مدل سازی در سه وضعیت قرارگیری الیاف، شامل جهت گیری موازی، عمود بر نیرو و رندوم انجام گردید. بهترین نتایج مقاومت مکانیکی برای وضعیت قرارگیری الیاف در امتداد نیرو حاصل شد. افزایش درصد الیاف از ۰/۵ به ۱/۰ درصد با کاهش ۲/۸ درصدی مقاومت مکانیکی فشاری در وضعیت رندوم و ۲/۵ درصدی در وضعیت عمود بر امتداد نیرو نسبت به جهت گیری موازی به همراه بود. همچنین نتایج نشان داد تأثیر پارامتر جهت گیری الیاف در نتایج مدول الاستیسیته بسیار کم و ناچیز بوده است.

- در بررسی تأثیر برهم کنش بین سطوح با پیوندهای کامل و محدود بر خواص مکانیکی، افزایش درصد حجمی الیاف از ۰/۵ به ۱/۰، سبب افزایش ناچیز در مقاومت فشاری پیوند کامل و کاهش ۱/۲ درصدی پیوند محدود گردید، ولی تأثیر چندانی در مدول الاستیسیته ماتریس در پیوند کامل بوجود نیاورد. همچنین استفاده از نتایج دینامیک مولکولی با مفهوم پیوند محدود در تئوری سطح چسبنده، سبب تغییر ناچیز ولی کاهش در نتایج مقاومت فشاری ماتریس گردید. ضمناً تغییر در مدل رفتاری پیوند از کامل به محدود بین ۳/۰ تا ۶/۰ درصد کاهش مقاومت در نمونه‌های با ۰/۵ و ۱/۰ درصد الیاف ایجاد نمود.

۵- مراجع

- [1] C. Pei, J.H. Zhu, F. Xing, *Photocatalytic property of cement mortars coated with graphene/TiO₂ nanocomposites synthesized via sol-gel assisted electrospray method*, *J Clean Prod.* 279 (2021) 123590. <https://doi.org/10.1016/J.JCLEPRO.2020.123590>.
- [2] F.R. Lamastra, M. Chougan, E. Marotta, S. Ciattini, S.H. Ghaffar, S. Caporali, F. Vivio, G. Montesperelli, U. Ianniruberto, M.J. Al-Kheetan, A. Bianco, *Toward a better understanding of multifunctional cement-based materials: The*

5747.

[23] S. Ros, H. Shima, RELATIONSHIP BETWEEN SPLITTING TENSILE STRENGTH AND COMPRESSIVE STRENGTH OF CONCRETE AT EARLY AGE WITH DIFFERENT TYPES OF CEMENTS AND CURING TEMPERATURE HISTORIES, 2013. <https://www.researchgate.net/publication/251231886>.

[24] J. Lee, G.L. Fenves, Plastic-damage model for cyclic loading of concrete structures, *J Eng Mech.* 124 (1998) 892–900. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9399\(1998\)124:8\(892\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9399(1998)124:8(892)).

[25] A.K. Salve, S.N. Jalwadi, Implementation of Cohesive Zone in ABAQUS to Investigate Fracture Problems, National Conference for Engineering Post Graduates RIT. (2011) 60–66.

[26] P.P. Camanho, C.G. Davila, M.F. de Moura, Numerical Simulation of Mixed-Mode Progressive Delamination in Composite Materials, *J Compos Mater.* 37 (2003) 1415–1438. <https://doi.org/10.1177/0021998303034505>.

[27] ابوالفضل علی زاده صحرایی، بررسی تغییر خواص موثر نانو کامپوزیت اپوکسی / نانولوله کربنی تحت کشش: رهیافت تجربی و محاسباتی، (1398).

[28] Reeder J.R., 3D Mixed-Mode Delamination Fracture Criteria—An Experimentalist's Perspective James R. Reeder, 21st Annual Technical Conference. (2006) 1–19.

[29] M. Safaei, A. Sheidaei, M. Baniassadi, S. Ahzi, M. Mosavi Mashhadi, F. Pourboghra, An interfacial debonding-induced damage model for graphite nanoplatelet polymer composites, *Comput Mater Sci.* 96 (2015) 191–199. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.08.036>.

[30] V. Papadopoulos, M. Mpraimakis, Multiscale modeling of carbon nanotube reinforced concrete, *Compos Struct.* 182 (2017) 251–260. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2017.09.061>.

<https://doi.org/10.1016/j.engstruct.2017.05.015>.

[12] Q.H. Zeng, A.B. Yu, G.Q. Lu, Multiscale modeling and simulation of polymer nanocomposites, *Progress in Polymer Science (Oxford).* 33 (2008) 191–269. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2007.09.002>.

[13] M. Cho, S. Yang, Multiscale Modeling of Polymer-Nanotube Nanocomposites, *Polymer Nanotubes Nanocomposites: Synthesis, Properties and Applications: Second Edition.* 9781118945 (2014) 117–166. <https://doi.org/10.1002/9781118945964.ch3>.

[14] Z. Qian, Multiscale Modeling of Fracture Processes in Cementitious Materials, 2012.

[15] P. Paristech, G. Ye, E. Schlangen, K. van Breugel, Modeling Fracture Behavior of Cement Paste Based on Its, (2012) 21–23.

[16] P.K. Valavala, G.M. Odegard, Modeling techniques for determination of mechanical properties of polymer nanocomposites, *Reviews on Advanced Materials Science.* 9 (2005) 34–44.

[17] Y. Li, G.D. Seidel, Multiscale modeling of the interface effects in CNT-epoxy nanocomposites, *Comput Mater Sci.* 153 (2018) 363–381. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.07.015>.

[18] K. Maekawa, T. Ishida, T. Kishi, Multi-scale Modeling of Concrete Performance Integrated Material and Structural Mechanics, 1 (2003) 91–126.

[19] A.M. Reichanadter, C.M. Hadden, E.J. Pineda, I. Miskioglu, S. Gowtham, J.A. King, G.M. Odegard, D.R. Klimek-McDonald, Mechanical properties of graphene nanoplatelet/carbon fiber/epoxy hybrid composites: Multiscale modeling and experiments, *Carbon N Y.* 95 (2015) 100–112. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.08.026>.

[20] J.F. Wang, L.W. Zhang, K.M. Liew, A multiscale modeling of CNT-reinforced cement composites, *Comput Methods Appl Mech Eng.* 309 (2016) 411–433. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.06.019>.

[21] A. Buyukkaragoz, I. Kalkan, NUMERICAL ANALYSIS OF AERATED CONCRETE AND HOLLOW BRICK WALLS STRENGTHENED WITH STEEL-FIBERED CONCRETE PANELS, *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics.* 62 (2021) 193–199. <https://doi.org/10.1134/S0021894421020024>.

[22] J.J. Liao, J.J. Zeng, C. Jiang, J.X. Li, J.S. Yuan, Stress-strain behavior and design-oriented model for FRP spiral strip-confined concrete, *Compos Struct.* 293 (2022) 115747. <https://doi.org/10.1016/J.COMPSTRUCT.2022.11>

Multiscale modeling of the mechanical properties of carbon nanotube reinforced cement composites

Ali SadrMomtazi

Professor, Civil Engineering Department Faculty, Guilan University, Rasht, Iran.

HamidReza NaserSaeed *

PhD Student, Civil Engineering Department Faculty, Guilan University, Rasht, Iran.

Abstract

Carbon nanotube, a product of chemical exfoliation of graphite, is a suitable additive for use as nanoreinforcement in cement-based materials due to its high aspect ratio, good water dispersibility and excellent mechanical properties. In the present study, the effect of volume fraction, aspect ratio, distribution orientation and interaction between surfaces on the mechanical properties of cement matrix reinforced with carbon nanotubes using multi-scale modeling was investigated. To Model in the Abaqus software, with the conceptual understanding of the volume representative element, a developed MATLAB and Python scripts were applied. To observe the interphase behavior between the matrix and fillers, the cohesive surface theory was used. Also, the output results of molecular dynamics modeling was used to determine the cohesive surface parameters. Modeling was done in the states of full and limited bonding between two phases in nano-composite with compressive axial loading. The cement models with 0, 0.5, 1, and 1.5 vol% with aspect ratios of 10 and 20 were evaluated and discussed. Furthermore, the distribution effect was studied by defining the nanotubes to be parallel, perpendicular and random regarding the force direction. The results showed that increasing the volume fraction of CNTs improves the yield strength and toughness of the samples. Increasing the CNT aspect ratio from 10 to 20 leads to an increase of elastic limit and an improvement of plastic behavior of the next matrix. Finally, the cohesive modeling of the interactions of matrix and CNT eventuated in 3 to 6% reductions per 0.5 and 1% CNT/cement composites.

Keywords: Carbon nanotube, multi-scale modeling, molecular dynamics, volume representative element.

* Corresponding Author: h_nasersaeed@hotmail.com

