



## عملکرد نانوصفحات گرافن اکساید بر دیسپرسیون نانوذرات اکسید سیلیس و تأثیر آن بر خصوصیات مکانیکی ملات سیمانی

علی اکبر رمضانیان پور<sup>۱</sup>، محمدمهدی زائری امیرانی<sup>۲</sup>، سیدسجادمیروولد<sup>۳\*</sup>

۱- دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران.  
۲- دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

### تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۹/۱۱/۲۶  
بازنگری: ۱۴۰۰/۱۰/۱۷  
پذیرش: ۱۴۰۰/۱۱/۱۲  
ارائه آنلاین: ۱۴۰۱/۰۲/۳۱

### کلمات کلیدی:

گرافن اکساید، نانوسیلیس  
پوزولان‌های طبیعی  
خواص مکانیکی  
شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

**خلاصه:** در مطالعه حاضر مکانیزم رسوب‌گذاری نانوذرات اکسید سیلیس (NS) بر روی نانو صفحات گرافن اکساید (GO) از طریق هیدرولیز تترا ارتو سیلیکات (TEOS) در محلول آب و الکل و عملکرد آن در ملات سیمانی مورد بررسی قرار گرفته است. در بخش اول این پژوهش نحوه برهم‌کنش‌های احتمالی مابین نانوذرات، به کمک طیف‌سنج پرتوهای مرئی (UV-Vis) و میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM) و در بخش دوم به خصوصیات مکانیکی ماده کامپوزیت متشکل از نانوسیلیس و گرافن اکساید (NS&GO) توسط تکنیک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پراخته شده است. در نهایت کاربرد نانوذرات به صورت منفرد و کامپوزیت در ملات سیمانی و تأثیرات آن بر خصوصیات مکانیکی ملات‌های حاوی پوزولان‌های طبیعی و فاقد آن مورد ارزیابی و مقایسه قرار گرفت. بهبود دیسپرسیون ذرات نانوسیلیس بر روی صفحات گرافن اکساید بدون استفاده از سورفکتانت‌ها در تصاویر TEM قابل رؤیت است. همچنین نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی افزایش ۷۵ درصدی مقدار تنش قابل تحمل و افزایش ۲۵۰ درصدی مدول یانگ ماده کامپوزیت نسبت به نانوسیلیس منفرد را نشان می‌دهد. مقاومت فشاری و کششی ۲۸ روزه ملات‌های حاوی کامپوزیت نانومواد نیز به ترتیب با افزایش ۳۱٪ و ۱۰۰٪ نسبت به طرح کنترل همراه بوده است. در یک نتیجه‌گیری کلی دیسپرسیون و توزیع مناسب نانوذرات، خاصیت هسته‌زایی نانوسیلیس، خاصیت پل‌زنی گرافن اکساید در کنار فعالیت بالای پوزولان ژئولیت موجب عملکرد مناسب ملات ZNS&GO گردیده است.

### ۱- مقدمه

خاصیت سیمانی ندارد؛ اما زمانی که به صورت ریز آسیاب می‌شوند، در دمای محیط و با حضور رطوبت، به طور شیمیایی، با آهک آزاد شده از هیدراتاسیون سیمان پرتلند واکنش داده، و ترکیباتی با خاصیت سیمانی تشکیل می‌دهد [۴]. ایران نیز منابع سرشاری از پوزولان‌های طبیعی در دست دارد؛ که بهره گرفتن از آن‌ها در صنعت سیمان می‌تواند مزایای متنوعی به همراه داشته باشد. از جمله این مزایا بهبود خواص دوامی بتن از طریق فعالیت پوزولانی می‌باشد؛ که طی یک واکنش ثانویه ساختار خمیر سیمانی از طریق مصرف کلسیم هیدروکسید حاصل از فرایند هیدراتاسیون و تولید ژل کلسیم سیلیکات هیدراته شده اصلاح می‌شود [۵].

در سال ۲۰۱۰ رمضانیان پور و همکاران [۶]، جایگزینی چهار نوع پوزولان طبیعی پومیس خاش، تراس جاجرود، توف آبیگ و پومیس اسکندان را در درصد‌های مختلف و به منظور بررسی خصوصیات دوامی بتن‌های آمیخته با پوزولان مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها عملکرد مناسب پومیس خاش با ۲۰٪ جایگزینی در سنین ۹۰ و ۱۸۰ روزه را برای آزمون‌های مقاومت

تاکنون، مطالعات گسترده‌ای پیرامون بهبود خصوصیات مواد و مصالح انجام شده است. در این بین بتن به عنوان دومین ماده پرکاربرد در طبیعت سهم عمده‌ای از مطالعات را به خود اختصاص داده است. بتن در اثر هیدراتاسیون سیمان با آب و تشکیل ماده چسبی مستحکم در فضای بین سنگدانه ایجاد می‌شود [۱]. در فرایند تولید سیمان مقدار قابل‌توجهی دی‌اکسیدکربن تولید خواهد شد و به عبارتی تولید هر تن سیمان با تولید حدود ۱ تن دی‌اکسیدکربن همراه است [۲]. همچنین بازگشت ضایعات ناشی از اتمام عمر مفید سازه‌های بتنی به چرخه محیط‌زیست، دردسرساز قلمداد می‌شود [۳]. از همین رو در سال‌های اخیر ایده استفاده از مواد جایگزین سیمان که خاصیت سیمانی دارند و در طبیعت به پوزولان‌های طبیعی معروف هستند رونق گرفته است.

پوزولان یک ماده سیلیسی یا سیلیسی-آلومینی است، که به تنهایی

\* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: mirvalad@iust.ac.ir



است و به همین دلیل سطح ویژه‌ای در حدود  $1600-2600 \text{ m}^2/\text{g}$  دارد که اکثر خصوصیات آن نشأت گرفته از همین ویژگی است [۱۵]. پنگ هو و همکارانش [۱۶]، در یک مطالعه آزمایشگاهی عملکرد ملات‌های حاوی گرافن اکساید را در درصدهای جایگزینی ۰/۱، ۰/۳ و ۰/۵ و نسبت‌های آب به سیمان متفاوت مورد بررسی قرار دادند که در نهایت ۰/۳ درصد جایگزینی به عنوان مقدار بهینه موجب افزایش مقاومت فشاری و خمشی شد. موارد متعدد دیگری نیز وجود دارد که عملکرد گرافن اکساید را در بهبود خصوصیات مکانیکی ملات‌های سیمانی تأیید می‌کند و همه‌ی آن‌ها در اینکه خاصیت پل‌زنی و هسته‌زایی عامل اصلی این پدیده است اتفاق نظر دارند [۱۸ و ۱۷].

در نهایت مواردی را نیز می‌توان یافت که برهم‌کنش‌ها میان نانوسیلیس و گرافن اکساید و تاثیر حضور همزمان آن‌ها در ملات‌ها یا سایر ترکیبات سیمانی را مورد ارزیابی قرار داده‌اند. در همین راستا در سال ۲۰۱۸ لی و همکاران [۱۹]، ملات حاوی ترکیب NS/GO را با ملات کنترل و همچنین با ملات‌های حاوی نانوسیلیس و یا گرافن اکساید منفرد مقایسه کردند. آن‌ها دریافتند علاوه بر بهبود دیسپرسیون ذرات سیلیس با حضور گرافن اکساید در محلول مایع منفذی که توسط آب و کلسیم هیدروکسید شبیه‌سازی شده بود، خصوصیات مکانیکی، انتقالی و ریزساختاری ملات‌های حاوی نانو کامپوزیت ترکیبی از سایر ملات‌ها بهتر است. یا در مطالعه دیگر لین و همکاران [۲۰] در حین بررسی یک نانو کامپوزیت حاوی نانوسیلیس و گرافن اکساید متوجه شدند پیوندهای کوالانسی Si-O که در نتیجه تشکیل پوشش سیلیکونی بر سطح ورقه‌های گرافن تشکیل می‌شوند از کلوخه شدن ورقه گرافنی در محلول قلیایی جلوگیری می‌کند. در ادامه عملکرد نانو کامپوزیت GOS (حاوی نانوسیلیس و گرافن اکساید) در ملات سیمانی مورد بررسی قرار گرفت که افزایش مقاومت فشاری و کششی از جمله مشاهدات آن‌ها است. در یک نتیجه‌گیری کلی می‌توان گفت حضور همزمان گرافن اکساید و نانوسیلیس باعث هم‌افزایی در بهبود خصوصیات مکانیکی، دوامی و ریزساختار ملات‌های سیمانی می‌شود. هدف از مطالعه حاضر بررسی ویژگی‌های NS&GO، تهیه شده از هیدرولیز Tetraorth (TEOS) silicate با حضور ورقه‌های گرافن اکساید در یک فرآیند سنتز شیمیایی، با استفاده از تکنیک شبیه‌سازی دینامیکی و بررسی عملکرد نانو کامپوزیت مورد نظر در ملات‌های آمیخته پوزولانی است. بدین منظور پس از بررسی خصوصیات مکانیکی نانو کامپوزیت NS&GO در مقیاس مولکولی از طریق شبیه‌سازی دینامیکی، نحوه توزیع و دیسپرسیون مناسب ذرات در

فشاری نسبت به سایر پوزولان‌ها گزارش کردند. همچنین مشخص شد پوزولان‌های طبیعی علی‌رغم افزایش مقاومت فشاری در سنین بالا، مقاومت فشاری سنین اولیه را کاهش می‌دهند. همچنین نجیمی و همکاران [۷]، طی یک برنامه آزمایشگاهی خصوصیات دوامی بتن‌های حاوی زئولیت را بررسی کردند. مقاومت فشاری آزمون‌های بتنی به ترتیب با ۱۵٪ و ۳۰٪ جایگزینی زئولیت پس از ۲۸ روز عمل‌آوری، ۳/۷٪ و ۲۴/۵٪ کاهش یافت. در یک برنامه آزمایشگاهی دیگر، صمیمی و همکاران [۸]، تأثیرات مثبتی از جایگزینی ۱۵٪ درصد زئولیت و پومیس در برابر حمله اسیدی را گزارش کردند. مدوری و همکاران [۹] نیز پس از بررسی بتن‌های آمیخته با زئولیت با درصدهای جایگزینی ۳۰٪ و ۴۰٪ درصد دریافتند، اگر چه تا ۳۰٪ جایگزینی زئولیت مصونیت بتن در برابر تهاجم یون کلراید را افزایش می‌دهد اما کاهش چشم‌گیر در مقاومت فشاری و خمشی قابل چشم‌پوشی نیست. لذا اگر چه خصوصیات مکانیکی کامپوزیت‌های سیمانی آمیخته با پوزولان‌های طبیعی زئولیت و پومیس در موارد متعدد روند افزایشی داشته اما در بسیاری از مطالعات اخیر تأثیرات بسیار ناچیز بوده، و حتی در مواردی نیز تأثیرات منفی گزارش شده است.

از طرفی مطالعات اخیر، اثربخشی مناسب جایگزینی برخی نانوذرات با سیمان را از طریق یک ویژگی منحصر به فرد به نام هسته‌زایی نشان می‌دهد. در این میان، نانوسیلیس (NS) و نانوصفحات اکسید گرافن، حجم بالایی از مطالعات را به خود اختصاص می‌دهند. در سال ۲۰۱۸، مین‌لئو و همکارانش [۱۰]، تأثیر ۱٪ تا ۴٪ نانوسیلیس بر مقاومت سنین اولیه سیمان‌های حاوی خاکستر بادی<sup>۲</sup> با درصد جایگزینی بالا را مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان می‌دهد مقاومت فشاری آزمون‌های حاوی نانوسیلیس، پس از ۹ ساعت عمل‌آوری و طی یک فرآیند با گرمادهی معین، تا ۱۰۶٪ نسبت به آزمون‌های فاقد آن افزایش داشته است. همچنین مقاومت فشاری با افزایش درصد جایگزینی نانوسیلیس افزایش می‌یابد. نظری و ریاحی [۱۱] نیز در تحقیقات خود با جایگزینی ۱ تا ۵ درصد نانوسیلیس به نتایج مشابهی دست یافتند. علاوه بر نوع نانوسیلیس جایگزین شده با سیمان، اندازه ذرات [۱۲]، درصد جایگزینی [۱۴ و ۱۳] و همچنین توزیع یکنواخت ذرات در ماتریس سیمانی نیز بسیار حائز اهمیت است.

از سویی دیگر یکی از کشف‌های بسیار مهم بشر در سال‌های نزدیک ماده‌ای با خواص شگفت‌انگیز به نام گرافن بوده است. گرافن یک ابر رسانای بسیار قوی است که از یک لایه گرافیت با ساختار شش ضلعی ساخته شده

1 Min Liu

2 Fly ash

جدول ۱. مشخصات فیزیکی سیمان و پوزولان‌های طبیعی

Table 1. Properties of cement and natural pozzolans

مشخصه فیزیکی	پومیس خاش	سیمان تیپ ۱-۴۲۵	زئولیت
وزن مخصوص (g/cm <sup>3</sup> )	۲/۶۱	۳/۱۴	۲/۱۱
نرمی (cm <sup>2</sup> /g)	۴۱۰۰	۳۲۰۰	۵۲۰۰

جدول ۲. خصوصیات شیمیایی سیمان پرتلند

Table 2. Chemical properties of Portland cement

ترکیبات شیمیایی (%)	سیمان تیپ ۱-۴۲۵	پومیس خاش	زئولیت
Na <sub>2</sub> O	۰/۵۸	۵/۱۶	۲/۶۱
MgO	۲/۵۱	۱/۴۷	۰/۵۵
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	۳/۸۹	۱۴	۱۰/۰۹
SiO <sub>2</sub>	۱۸/۷۵	۵۸/۱	۶۸/۷۰
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	—	۰/۲۱	—
SO <sub>3</sub>	۳/۰۹	۰/۴۱	۰/۲۵
K <sub>2</sub> O	۰/۷۳	۱/۸۷	۱/۱۲
CaO	۶۲/۵۲	۱۱/۵	۴/۲۴
TiO <sub>2</sub>	۰/۴۰۵	۰/۵۱	۰/۱۹
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	۳/۲۴	۳/۵۷	۱/۲۰
MnO	۰/۱۲۹	۰/۰۷۶	—
Sr	—	۰/۰۵۴	۰/۰۸
L.O.I	۴/۰۱	۳/۰۹۷	۱۰/۸۷

طبیعی ایرانی پومیس (تولید کارخانه سیمان خاش) و زئولیت (تولید کارخانه سیمان) استفاده شده است. مشخصات شیمیایی و فیزیکی سیمان مصرفی و پوزولان‌های طبیعی در جداول ۱ و ۲ آمده است. همچنین مشخصات فیزیکی و شیمیایی سیمان و پوزولان‌های طبیعی با محدودیت‌های قید شده در استاندارد ملی ۳۸۹ ایران، مربوط به سیمان و استاندارد ملی ۳۴۳۳ ایران، مربوط به پوزولان‌های طبیعی، کنترل شده است. همچنین سنگدانه مصرفی جهت ساخت ملات، ماسه سیلیسی در دانه‌بندی مطابق با استاندارد [۲۱] ASTM C778-17 می‌باشد. در شکل ۱ درصد‌های عبوری از الک به همراه حد بالا و پایین استاندارد ذکر شده است.

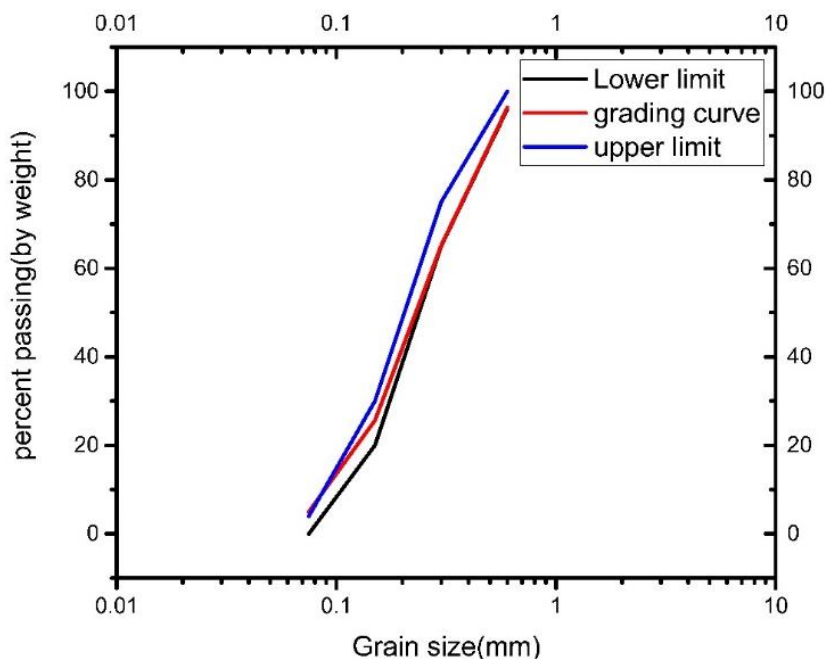
نانوسیلیس مصرفی در این پژوهش به صورت پودر، با میانگین اندازه ذرات ۱۲ نانومتر و خلوص ۹۹/۹۹ درصد، محصول تجاری از شرکت آلمانی

محلول آبی توسط عکس برداری میکروسکوپ الکترونی عبوری و خصوصیات مکانیکی طرح مخلوط‌ها از جمله مقاومت فشاری و کششی مورد ارزیابی قرار گرفت. در نهایت با مقایسه نتایج به دست آمده مشخص می‌شود که نانو کامپوزیت NS&GO نه تنها کاهش‌های احتمالی که ممکن است در خصوصیات مکانیکی به سبب جایگزینی پوزولان‌های طبیعی ایجاد شود را جبران می‌کند بلکه باعث افزایش چشم‌گیر در مقایسه با نمونه کنترل خواهد گشت.

۲- برنامه آزمایشگاهی

۲-۱- مصالح مصرفی

عنوان در این پژوهش از سیمان پرتلند تیپ ۱ به همراه پوزولان‌های



شکل ۱. نمودار دانه بندی سنگدانه سیلیسی

Fig. 1. Silica sand grading

جدول ۳. آنالیز عنصری گرافن اکساید

Table 3. Elemental analysis of graphene oxide

مقدار (%)	ترکیبات
۵۸-۶۳	کربن
۰-۲	نیتروژن
۱-۲	سولفور
۳۳-۳۸	اکسیژن

سیلیکونی (Tetraortho silicate (TEOS انجام شده است. در این فرآیند ابتدا ۰/۴ گرم گرافن اکساید در ۱۰۰۰ میلی لیتر مخلوط آب اتانول (نسبت ۱ به ۵) دیسپرس گردید و مدت یک ساعت در حمام آلتراسونیک ۴۰۰ وات قرار گرفت. پس از آن pH محلول با اضافه کردن محلول آمونیاک به ۹ رسید. در ادامه ۱۰ میلی لیتر TEOS به آرامی به سوسپانسیون اضافه گردید. سوسپانسیون به مدت یک ساعت بر روی همزن مغناطیسی قرار گرفت. دوباره به مدت یک ساعت حمام آلتراسونیک قرار گرفت و سه بار توسط اتانول شستشو داده شد و درون محلول آب و الکل نگهداری شد. بدین ترتیب یک پوشش سیلیکونی در سطح گرافن اکساید ایجاد گردید. در انتها برای استفاده از ماده کامپوزیت در ملات لازم بود الکل موجود در سیستم با

Evonik بوده است.

گرافن اکساید کلوییدی با پایداری مناسب، محصول شرکت ناماگو تهیه شد، که مشخصات آن در جدول ۳ آمده است. سوسپانسیون حاوی نانو صفحات گرافن اکساید با ضخامت ۳ تا ۷ لایه است؛ ضخامت هر لایه کمتر از ۱ نانومتر و اندازه هر صفحه ۲/۷ تا ۶/۸ میکرون می باشد. همچنین به توصیه استانداردهای ملی از آب آشامیدنی برای ساخت طرح مخلوط‌های ملات استفاده گردیده است.

## ۲-۲- آماده سازی کامپوزیت NS&GO

آماده سازی کامپوزیت NS&GO از طریق هیدرولیز پیش ماده

جدول ۴. مقادیر بهینه گرافن اکساید و نانوسیلیس

Table 4. Optimal amounts of graphene oxide and nanoSiO<sub>2</sub>

طرح	GO%	SiO <sub>2</sub> %	۳ روزه	۷ روزه
			(MPa)	(MPa)
GO	۰/۰۱		۲۳/۲	۳۱
	۰/۰۲		۲۷/۶	۳۶/۱
	۰/۰۳		۲۴/۱	۳۳
NS		۰/۵	۲۷/۳	۳۵/۶
		۱	۳۳/۶	۴۱/۱
		۲	۳۱/۲	۳۸/۶
		۳	۲۲/۹	۳۱
Hybrid	۰/۰۲	۰/۵	۴۳/۲	۴۹/۶
		۱	۴۱/۴	۴۶/۵
		۲	۳۹	۴۳

۲-۴- شرح آزمایش

۲-۴-۱- آزمایش مقاومت فشاری

آزمونه‌های ملات با ابعاد ۵×۵×۵ سانتی‌مترمکعب مطابق با آیین‌نامه استاندارد ASTM C109 تهیه شدند. آزمونه‌ها تا سن مورد نظر برای آزمایش در محلول آب-آهک اشباع عمل‌آوری شدند. در نهایت مقاومت فشاری در سنین ۳، ۷، ۲۸ و ۹۰ روز اندازه‌گیری شد.

۲-۴-۲- آزمایش مقاومت کششی

جهت بررسی مقاومت کششی از آزمونه‌های بریکت مندرج در استاندارد [۲۳] ASTM C307 استفاده شده است. آزمونه‌ها مقاومت کششی شرایط محیطی یکسانی را با آزمونه‌های مقاومت فشاری از نظر عمل‌آوری تجربه کردند.

۲-۴-۳- طیف‌سنج پرتو مرئی

در این پژوهش، جهت بررسی تأثیر گرافن اکساید بر دیسپرسیون ذرات نانوسیلیس از دستگاه طیف‌سنج پرتو مرئی بهره گرفته شد. این دستگاه بر اساس اندازه‌گیری میزان پرتوهای بازگشتی در اثر برخورد به ذرات یا پرتوهای عبوری از سوسپانسیون مدنظر کار می‌کند. برای این منظور سه

آب جایگزین شود. برای این کار مقدار ۱۰۰۰ میلی‌لیتر از سوسپانسیون درون ظرف مدرج ریخته شد و در دمای ۸۰ درجه در آن قرار گرفت. پس از مدت زمان ۲۰ دقیقه ظرف حاوی سوسپانسیون از آن بیرون آمده و مقدار کاهش حجم ناشی از تبخیر الکل با آب جایگزین شد.

۲-۳- طرح مخلوط‌ها

در این برنامه آزمایشگاهی ۱۲ طرح مخلوط جهت مقایسه ملات‌های دوگانه (حاوی سیمان و پوزولان)، سه گانه (سیمان، پوزولان و نانومواد) گنجانده شده است. تمامی طرح مخلوط‌ها مطابق با دستورالعمل‌های مندرج در آیین‌نامه استاندارد [۲۲] ASTM C109 ساخته شده‌اند. در تمام طرح مخلوط‌ها نسبت آب به سیمان برابر ۰/۴۸۵ و نسبت ماسه به سیمان برابر ۲/۷۵ در نظر گرفته شده است. مقدار جایگزینی پوزولان‌های طبیعی پومیس و زئولیت ۱۵٪ وزنی سیمان انتخاب شده است. مقادیر بهینه گرافن اکساید و نانوسیلیس بر اساس نتایج مقاومت فشاری ملات‌های ۳ و ۷ روزه انتخاب گردیده است که در جدول ۴ قابل مشاهده می‌باشد. همچنین طرح مخلوط‌های نهایی در جدول ۵ آورده شده است.

جدول ۵. جزئیات طرح اختلاط (کیلوگرم بر مترمکعب بتن)

Table 5. Details of mixtures (kg/m<sup>3</sup>)

طرح مخلوط	سیمان	پومیس	زئولیت	GO	SiO <sub>2</sub>
Ctrl	۶۶۶	-	-	-	-
Z	۵۶۶	-	۱۰۰	-	-
P	۵۶۶	۱۰۰	-	-	-
GO	۶۶۵/۸	-	-	۰/۱۳	-
ZGO	۵۶۵/۸	-	۱۰۰	۰/۱۳	-
PGO	۵۶۵/۸	۱۰۰	-	۰/۱۳	-
NS	۶۵۹/۳	-	-	-	۶/۶۶
ZNS	۵۵۹/۳	-	۱۰۰	-	۶/۶۶
PNS	۵۵۹/۳	۱۰۰	-	-	۶/۶۶
NS&GO	۶۶۲/۵	-	-	۰/۱۳	۳/۳۳
ZNS&GO	۵۶۲/۵	-	۱۰۰	۰/۱۳	۳/۳۳
PNS&GO	۵۶۲/۵	۱۰۰	-	۰/۱۳	۳/۳۳

به (Lammps) استفاده شد [۲۴] و خروجی‌های تصویری تماماً توسط نرم‌افزار آویتو (Ovito) تهیه گشتند [۲۵]. شرایط مرزی در تمامی جهات به صورت دوره‌ای انتخاب شد تا حالت بالک ماده را مدل کرده و خواص مکانیکی برای حالت بالک اندازه‌گیری شود. ابعاد باکس شبیه‌سازی به ترتیب در راستای بردار  $X$ ،  $Y$  و  $Z$  برابر با حدود ۴۰، ۴۰ و ۲۰ آنگستروم می‌باشد. صفحه گرافنی به صورت دوره‌ای در راستای بردار  $Z$ ،  $Y$  در میان باکس شبیه‌سازی قرار گرفته و طرفین آن را دی‌اکسید اکسیژن محاط کرده است. بر روی صفحه گرافنی عوامل سطحی اکسیژن‌دار شامل هیدروکسیل و اپوکسی قرار داده شده‌اند تا برهم‌کنش احتمالی این عوامل با دی‌اکسید سیلیکون مدنظر قرار گیرد. در این ساختار نسبت تعداد اتم‌های اکسیژن به اتم‌های کربن در گرافن به حدود ۱۰ درصد می‌رسد (شکل ۲).

همچنین به منظور ایجاد پیوند میان عوامل اکسیژنی بر روی سطح گرافن و صفحه گرافنی، و در نظر گرفتن احتمال ایجاد پیوند بین این عوامل با دی‌اکسید سیلیکون، تمامی برهم‌کنش‌های بین اتمی سیستم توسط پتانسیل Reaxff مدل گشت [۲۷ و ۲۶]. از ویژگی‌های بنیادین پتانسیل ReaxFF این است که باندها در پیوندهای کووالانسی نظیر پیوند Si-O، C-O و O-H به صورت پیوندهایی ثابت در نظر گرفته نمی‌شوند، بلکه مرتبه پیوند بر اساس موقعیت لحظه‌ای اتمی به صورت پیوسته تخمین زده

دسته سوسپانسیون کلوئیدی حاوی نانوذرات اکسید سیلیس، نانوصفات گرافن اکساید و کامپوزیت نانو مواد تهیه شد. سوسپانسیون‌ها از دو فاز عمده تشکیل می‌شوند. فاز اول محلول زمینه و فاز دوم ذرات کلوئیدی می‌باشند که درون فاز محلول غوطه‌ور خواهند شد. در جدول ۵ مشخصات سوسپانسیون‌ها در غلظت‌های مختلف نانوذرات کلوئیدی موجود است. لازم به ذکر است جهت آماده‌سازی هر یک از سوسپانسیون‌ها از دستگاه حمام آلتراسونیک با توان ۲۰۰ وات به مدت ۳۰ دقیقه استفاده شد.

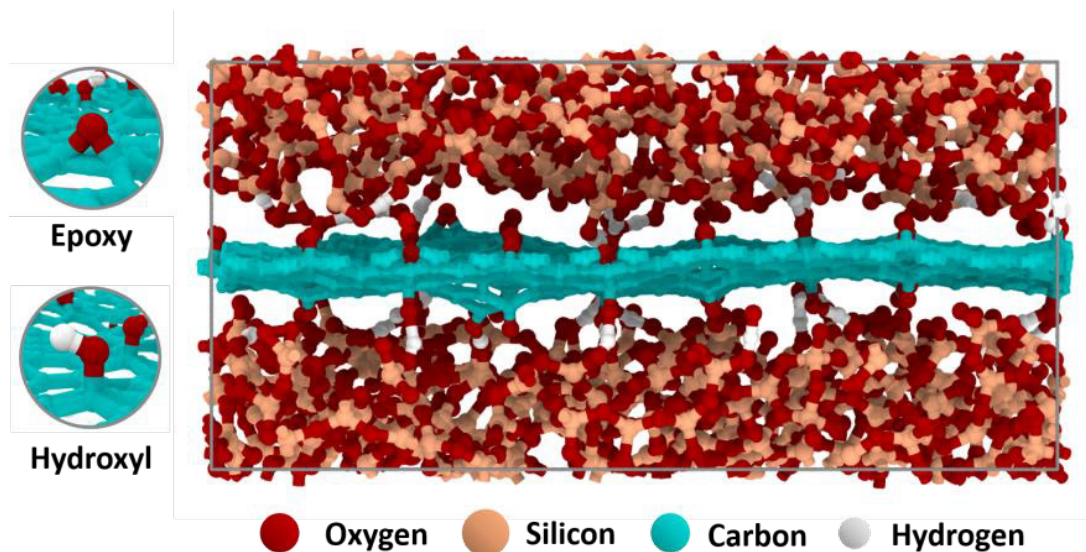
#### ۲-۴-۴ میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM)

برای مشاهده ریزساختار و برهم‌کنش‌ها مابین نانوذرات مقدار بسیار کمی از سوسپانسیون کلوئیدی NS&GO تهیه شد. پس از آماده‌سازی از طریق حمام آلتراسونیک چند قطره از سوسپانسیون بر روی گرید ریخته شد و درون میکروسکوپ قرار گرفت.

#### ۲-۴-۵ روش پیاده‌سازی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

جهت بررسی خصوصیات مکانیکی کامپوزیت NS&GO شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شد. برای انجام بخش شبیه‌سازی از پکیج نرم‌افزاری شبیه‌ساز اتمی/مولکولی بزرگ مقیاس به شدت موازی موسوم





شکل ۲. تصویر کامپوزیت اکسید گرافن و دی اکسید سیلیکون از پهلو

Fig. 2. Simulation box of GO and nonoSiO2 from the side

بیشترین میزان جذب پرتوهای مرئی برای نانوسیلیس و گرافن اکساید بر اساس نمودارهای موجود در شکل ۳ (الف و ب) در طول موجی بین ۲۰۰ تا ۳۰۰ نانومتر اتفاق افتاده است. از طرفی افزایش غلظت نانوسیلیس و گرافن اکساید باعث افزایش جذب پرتوهای مرئی شده است؛ که البته این افزایش از رابطه خطی پیروی می کند.

با مقایسه نمودارهای الف و ج متوجه افزایش میزان جذب پرتوهای مرئی در غلظت‌های برابر نانوسیلیس خواهید شد. به عبارتی خط برازش داده شده در تصویر (ج) از هر دو خط برازش یافته موجود در شکل‌های (الف) و (ب) بالاتر قرار می گیرد. برای مثال در غلظت ۱۵۰۰ میلی گرم بر لیتر نانوسیلیس بیشترین مقدار جذب از حدود ۰/۶ برای سوسپانسیون NO.1 به حدود ۱ برای سوسپانسیون NO.9 رسیده است. همین روند برای سایر غلظت‌ها نیز صادق است. در توجیه این پدیده دو فرضیه قابل طرح است. در فرضیه اول افزایش غلظت فاز کلئیدی موجود در سوسپانسیون حاوی کامپوزیت نانو مواد به دلیل اضافه شدن صفحات گرافن اکساید باعث افزایش مقدار جذب پرتوهای مرئی می شود. این تئوری اگر چه در حالت کلی کاملاً درست است اما در این مطالعه برای حذف تأثیرات ناشی از افزایش غلظت، در هر مرحله از انجام آزمایش برای ماده کامپوزیت، ابتدا ماده زمینه حاوی مقادیر متناظر از گرافن اکساید به دستگاه معرفی شده است و نمودار جذب ناشی

شده و بروزسانی می گردد تا بتواند شکست و تشکیل پیوندها در سیستم را مدل کند. ساختار دی اکسید سیلیکون به گونه ای ایجاد شد که چگالی ای برابر با  $2/196 \text{ gr/cm}^3$  [۲۸] متناسب با چگالی سیلیکای با ساختار آمورف داشته باشد. ساختار دی اکسید سیلیکون آمورف نیز به کمک پکیج نرم افزاری پک مول ایجاد گشت [۲۹].

مقدار گام زمانی شبیه سازی برابر با ۰/۵ فمتوثانیه در نظر گرفته شد. در تمامی شبیه سازی‌های انجام شده پیش از اعمال آزمون مکانیکی، کل سامانه ضمن به کارگیری الگوریتم کمینه سازی به مدت ۲۵ پیکوثانیه در دمای ۳۰۰ کلوین و تنش صفر توسط ترموستات Nose-Hoover و باروستات ریلکس شد [۳۰ و ۳۱] تا تنش‌های احتمالی داخل ساختار، ناشی از موقعیت اولیه اتم‌ها از سیستم خارج شود. قابل ذکر است که نمودارهای خروجی تست مکانیکی حاصل میانگین گیری از ۴ آزمون با شرایط یکسان می باشند.

### ۳- نتایج و بحث

#### ۳-۱- دیسپرسیون نانو مواد

شکل ۳ مقادیر جذب پرتوهای مرئی سوسپانسیون‌های کلئیدی حاوی نانو مواد در غلظت‌های مختلف را ارائه می دهد. همچنین جدول ۶ غلظت نانوسیلیس و گرافن اکساید هر یک از سوسپانسیون‌ها را نشان می دهد.

جدول ۶. مشخصات سوسپانسیون‌های کلئیدی تهیه شده برای آزمون طیف سنج پرتو مرئی

Table 6. Specifications of colloidal suspensions prepared for Uv- Vis test

نام سوسپانسیون	غلظت نانوسیلیس (mg/Lit)	غلظت گرافن اکساید (mg/Lit)
NO.1	۱۵۰۰	-
NO.2	۲۰۰۰	-
NO.3	۲۵۰۰	-
NO.4	۳۰۰۰	-
NO.5	-	۱۰
NO.6	-	۲۵
NO.7	-	۵۰
NO.8	-	۱۰۰
NO.9	۱۵۰۰	۱۰
NO.10	۲۰۰۰	۲۵
NO.11	۲۵۰۰	۵۰
NO.12	۳۰۰۰	۱۰۰

کامپوزت از طریق هیدرولیز TEOS با روش فیزیکی موجود در شکل ۴-ب نحوه پراکندگی و توزیع ذرات نانوسیلیس می‌باشد. کامپوزیت NS&GO در تصویر (ب) ساختار به مراتب یکنواخت‌تری دارد که به دلیل قرارگیری ذرات نانوسیلیس بر روی سطح صفحات گرافن اکساید از طریق تشکیل پیوندهای کوالانسی Si-O مابین سیلیسیوم و گروه‌های عاملی اکسیژن‌دار می‌باشد.

۳-۲- نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

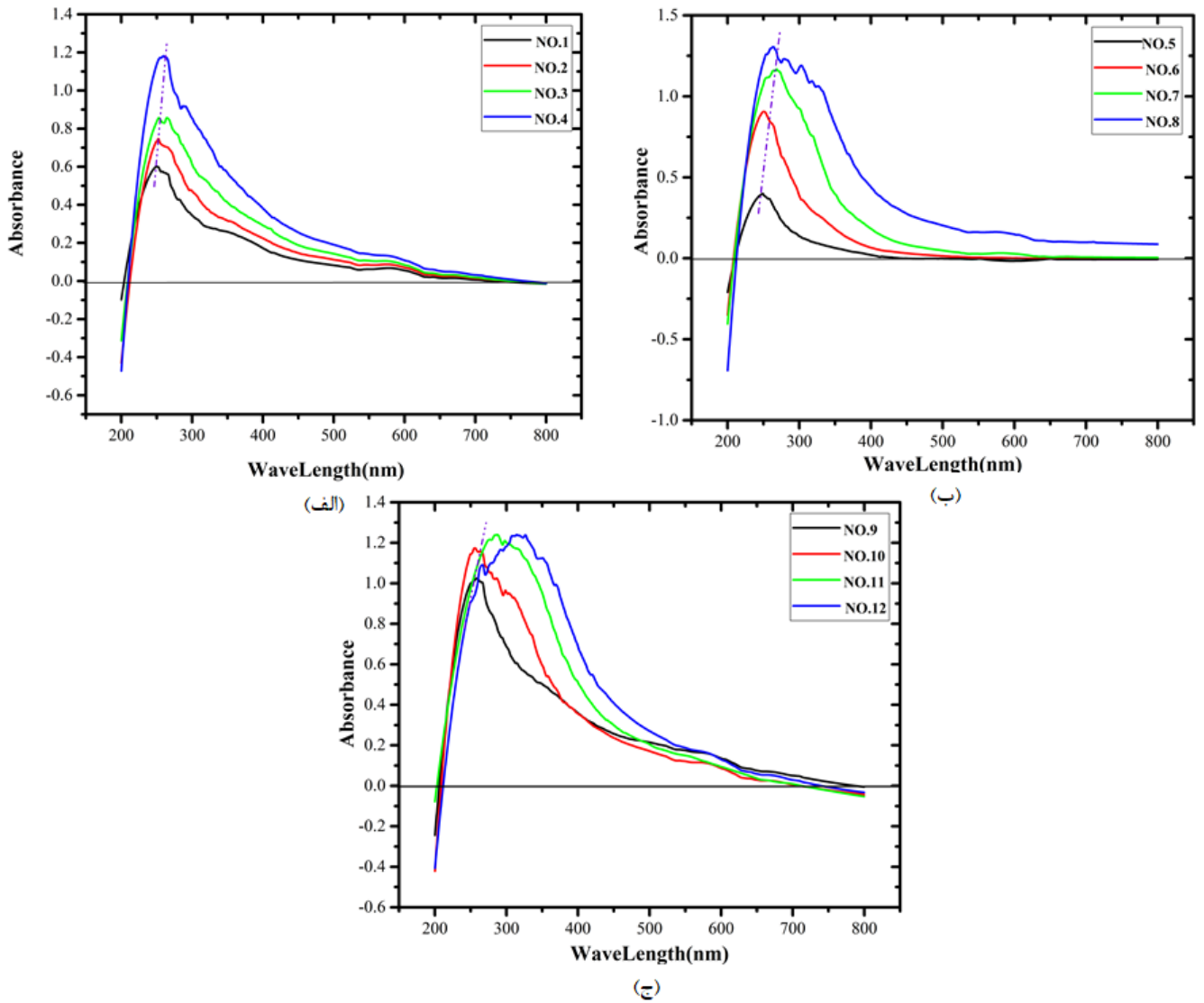
جهت انجام آزمون مکانیکی، تمامی سامانه در دمای ۳۰۰ کلوین و تنش صفر در راستای بردار Z و Y تحت ترموستات Nose-Hoover و باروستات قرار داده شد. در ادامه آزمون تنش- کرنش بر روی کامپوزیت اکسید گرافن و دی‌اکسید سیلیکون انجام گرفت. در این آزمون فرآیند کشش در راستای بردار X هم راستا با جهت زیگراگ ساختار گرافن صورت گرفت و مقدار نرخ کشش با توجه به حجم بالای محاسباتی ناشی از انتخاب پتانسیل ReaxFF برابر با  $0.1 \text{ fs}^{-1}$  انتخاب شد تا فرآیند شبیه‌سازی سرعت گیرد. نمودار حاصل جهت افزایش دقت و صحت از میانگین ۴ آزمون با شرایط مشابه به دست آمده است. به منظور مقایسه و بررسی تأثیر افزودن اکسید

از گرافن اکساید از نمودار ماده کامپوزیت کسر گردیده است. در این حالت عملاً تأثیرات ناشی از افزایش غلظت بر شدت جذب پرتوهای مرئی در ماده کامپوزیت ناچیز خواهد بود.

فرضیه دیگری که در توجیه افزایش پیک نمودارهای مربوط به ماده کامپوزیت قابل بیان است، تأثیرات ناشی از دیسپرسیون بهتر ذرات نانوسیلیس در حضور نانو صفحات گرافن اکساید می‌باشد. از طرفی چون پذیرش فرضیه دوم با اکتفا به نتایج طیف‌سنج پرتوهای مرئی غیرقابل قبول خواهد بود سعی شد با عکس‌برداری توسط میکروسکوپ الکترونی عبوری، این فرضیه را به اثبات رساند. در همین راستا تصاویر (الف و ب) از شکل ۴ به نحوه اثرگذاری گرافن اکساید بر دیسپرسیون نانوسیلیس اشاره دارد. با استناد به این تصاویر به دام افتادگی و در نتیجه پراکندگی هر چه بهتر ذرات نانوسیلیس با حضور گرافن اکساید به وضوح در تصویر (ب) مشخص است. بر این اساس برهم‌کنش‌های احتمالی بین نانوسیلیس و گرافن اکساید به پراکندگی ذرات نانوسیلیس و در نتیجه افزایش سطح ویژه موجود ختم شده است.

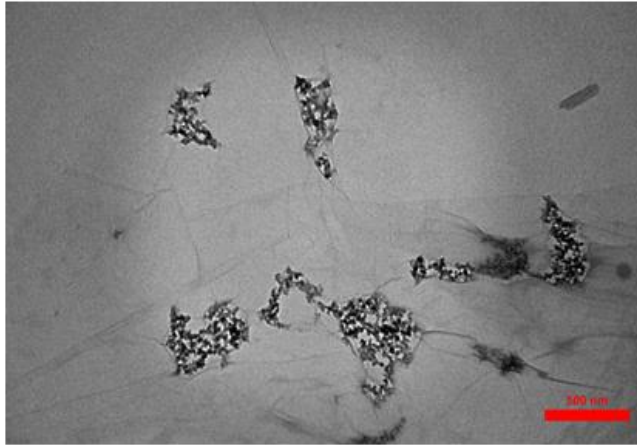
در شکل ۵ نحوه رسوب‌گذاری ذرات  $\text{SiO}_2$  بر روی سطح گرافن اکساید به صورت لکه‌های روشن نمایان شده است. تفاوت اصلی روش تولید



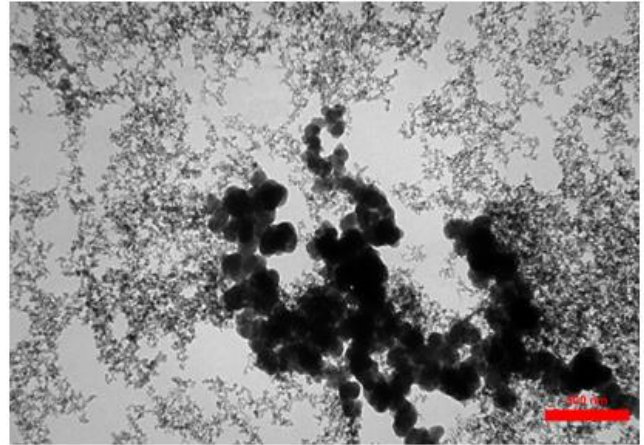


شکل ۳. نمودار جذب-طول موج طیفسنج پرتوهای مرئی (الف: سوسپانسیون‌های کلئیدی حاوی نانوسیلیس ب: سوسپانسیون‌های کلئیدی حاوی گرافن اکساید ج: سوسپانسیون‌های کلئیدی حاوی ماده کامپوزیت)

Fig. 3. Absorption-wavelength diagram of Uv-Vis (A: nanoSiO<sub>2</sub> suspensions B: GO suspensions C: NS&GO suspensions)



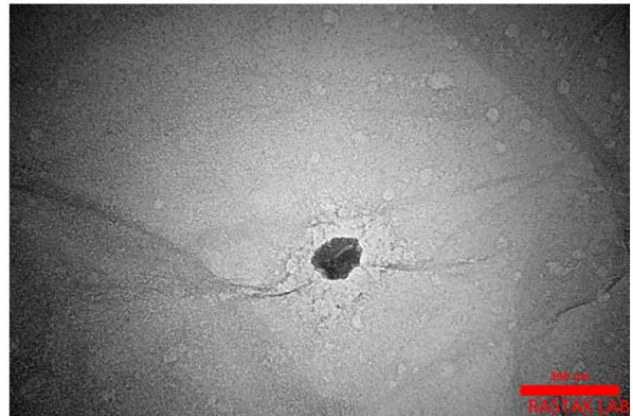
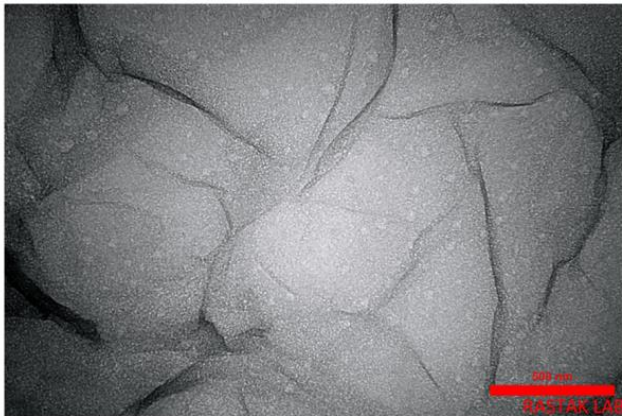
(ب)



(الف)

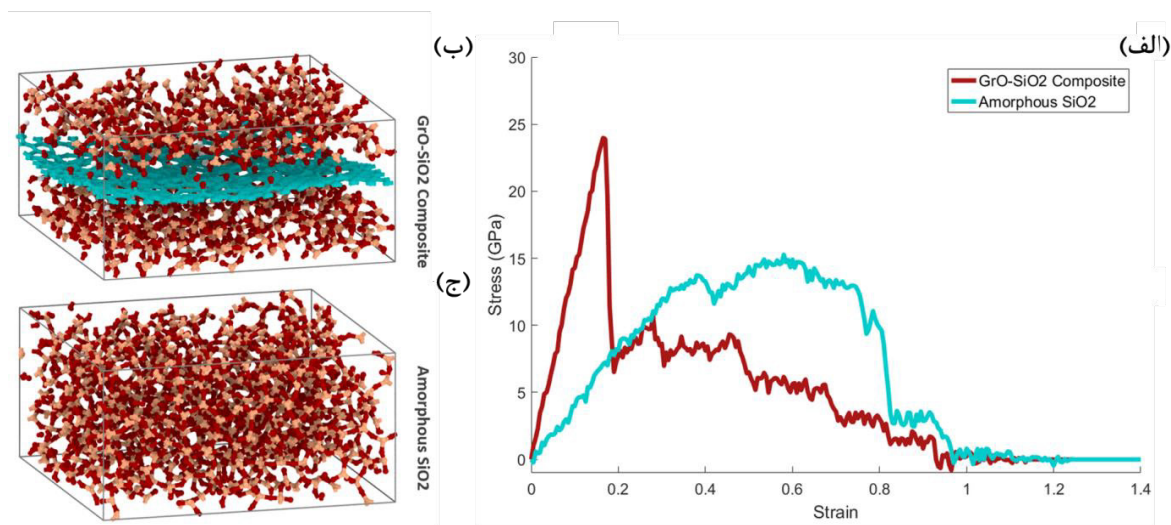
شکل ۴. تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری NS+GO (الف: ذرات نانوسیلیس بدون حضور گرافن اکساید ب: ذرات نانوسیلیس در حضور گرافن اکساید)

Fig. 4. Transmission electron microscope of NS+GO (A: single nanoSiO2 B: Combination of nanoSiO2 and GO)



شکل ۵. تصویر TEM از کامپوزیت NS&GO

Fig. 5. Transmission electron microscope of NS&GO



شکل ۶. الف) نمودار تنش- کرنش کامپوزیت اکسید گرافن-دی اکسید سیلیکون و سیلیکا آمورف خالص. ب) تصویر باکس شبیه سازی اکسید گرافن-سیلیکا ج) تصویر باکس شبیه سازی سیلیکا آمورف خالص

Fig. 6. A: Comparison of Stress-strain diagram of amorphous silica and GO-Silica B: image of GO-Silica simulation box C: image of silica simulation box

قرار گرفته اند و این یعنی تا قبل از رسیدن تنش های کششی به آستانه شکست، ورقه گرافن اکساید عمده تنش اعمال شده را جذب می کند. حال آن که درست تا لحظه شکست سهم تنش های کششی که توسط ذرات سیلیکا تحمل می شود در حال افزایش خواهد بود. و در نهایت با قرار گرفتن تنش های کششی در آستانه شکست، ورقه گرافنی گسسته می شود و پس از آن ماده کامپوزیت کرنش های بسیار بزرگی را تجربه خواهد کرد. این لحظه دقیقاً منطبق بر کرنش  $0.2$  در نمودار شکل ۶-الف می باشد.

### ۳-۳- مقاومت فشاری و کششی

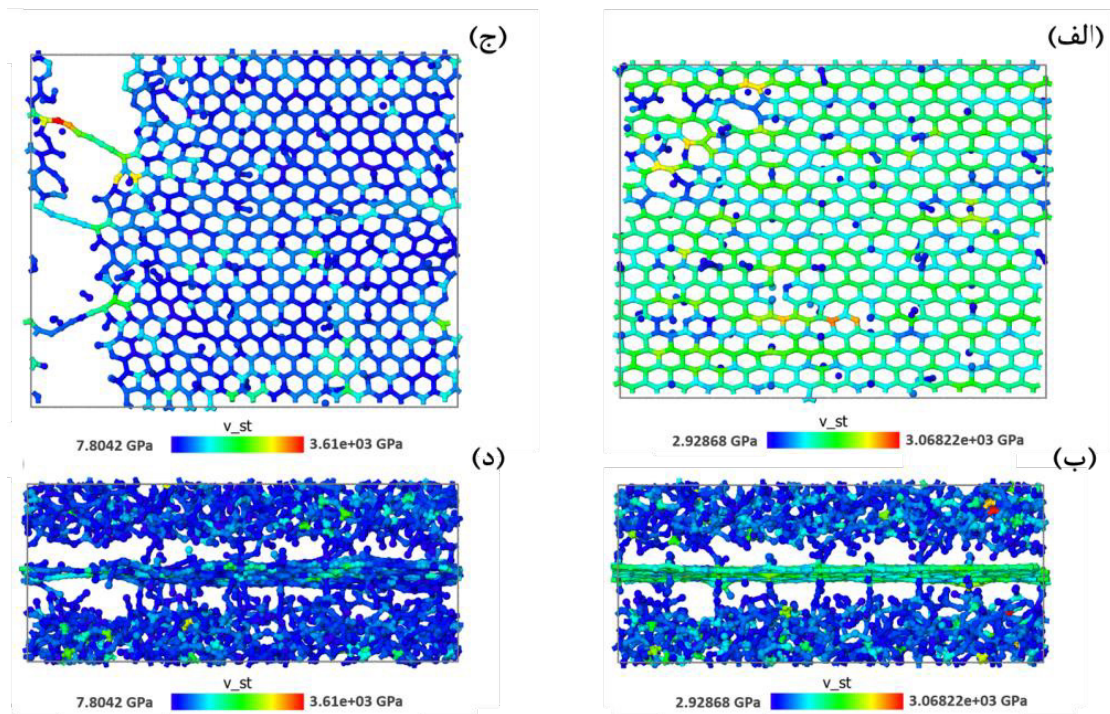
نمودارهای موجود در شکل های ۸ تا ۱۱ به ترتیب مقاومت فشاری، درصد تغییرات مقاومت فشاری نسبت به ملات کنترل، مقاومت کششی و درصد تغییرات مقاومت کششی نسبت به ملات کنترل را برای طرح مخلوط های مختلف و در سنین متفاوت گزارش می کنند.

- مقاومت فشاری و کششی طرح های مخلوط های مختلف با افزایش سنین عمل آوری افزایش یافته است که این موضوع با توجه به تکمیل فرآیند هیدراسیون کاملاً بدیهی است.

- در مقایسه طرح مخلوط های دوگانه حاوی پوزولان های طبیعی، طرح های  $Z$  و  $P$ ، با طرح کنترل دو نکته قابل برداشت است:

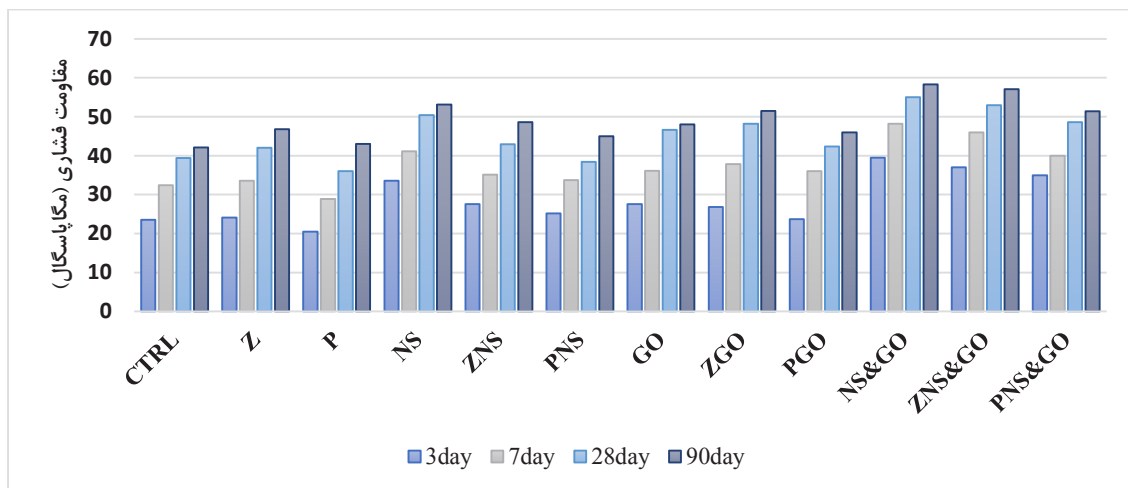
گرافن درون دی اکسید سیلیکون آمورف، آزمونی دیگر با شرایط مشابه برای حالتی که تنها سیلیکا در سامانه وجود دارد نیز انجام شد. طبق نتایج حاصله در شکل ۶ مشاهده می شود که در نمودار مربوط به ماده نانو کامپوزیت، حضور اکسید گرافن نقطه اوجی با شیب تند را در نمودار باعث شده است. مقدار حداکثر تنش قابل تحمل در نوک این نمودار به حدود ۲۵ گیگاپاسکال می رسد که چیزی حدود ۶۵ درصد بیش از مقدار حداکثر تنش قابل تحمل در سیلیکای آمورف خالص است. همچنین بر اساس محاسبات انجام شده برای کامپوزیت اکسید گرافن و دی اکسید سیلیکون مقدار مدول یانگ به حدود ۱۴۰ گیگاپاسکال می رسد، حال آن که مقدار مدول یانگ محاسبه شده برای دی اکسید سیلیکون خالص حدود ۴۰ گیگاپاسکال می باشد. بر این اساس میزان مدول یانگ نیز با افزودن اکسید گرافن حدود ۲۵۰ درصد افزایش یافته که مقداری قابل توجه می باشد.

همچنین کانتور تنش فون میسر در شکل ۷ که خروجی نرم افزار ovito می باشد تنش ها را قبل از شکست و بعد از شکست از دو زاویه مختلف به تصویر می کشد. با دقت در تصاویر الف و ب، که تنش های کششی اعمال شده کمتر از آستانه شکست کامپوزیت نانو مواد است، مشاهده می شود که گرافن اکساید در محدوده سبز و ذرات سیلیکا در محدوده آبی نوار تنش



شکل ۷. کانتور تنش فون میسز از کامپوزیت اکسید گرافن-سیلیکا الف) تصویر از بالا پیش از لحظه شکست. ب) تصویر از جلو پیش از لحظه شکست. ج) تصویر از بالا پس از لحظه شکست. د) تصویر جلو پس از لحظه شکست

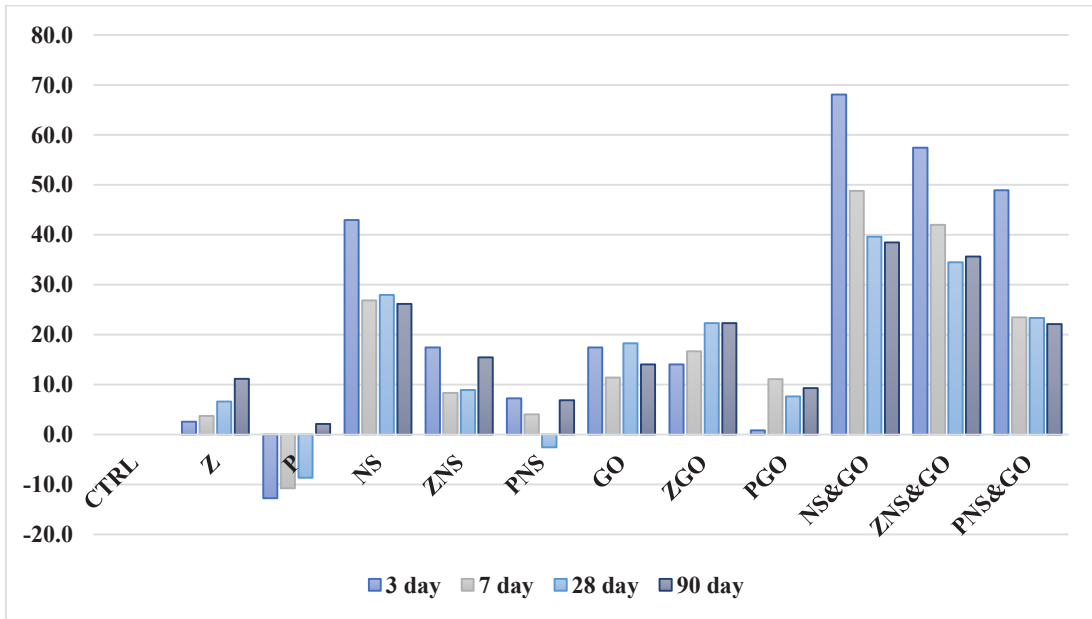
Fig. 7. Von Mises stress contour of GO-Silica A: top of the simulation box-before breaking B: front of the simulation box- before breaking C: top of the simulation box-after breaking D: front of the simulation box-after breaking



شکل ۸. مقاومت فشاری طرح مخلوط‌های ملات در سنین مختلف (مگاپاسگال)

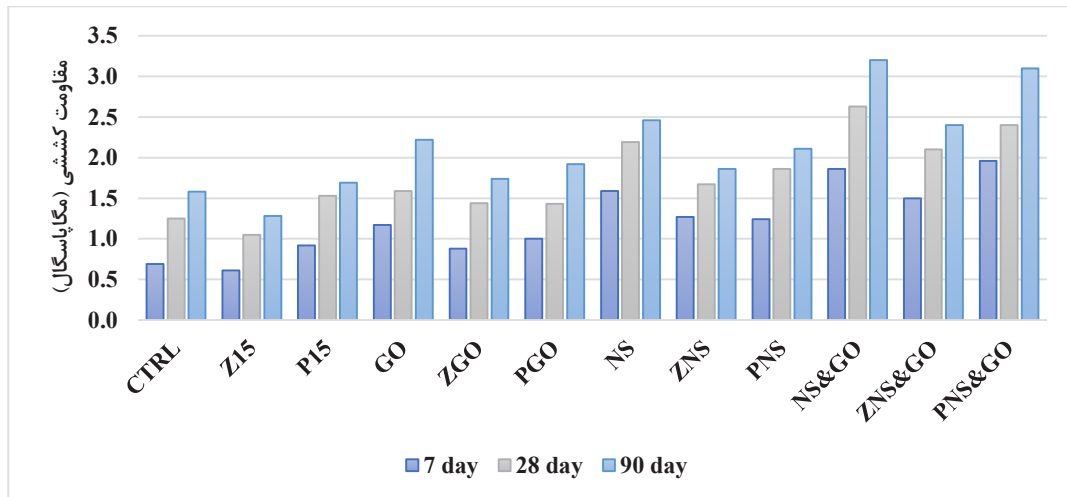
Fig. 8. Compressive strength of mortar specimens in different ages (MPa)





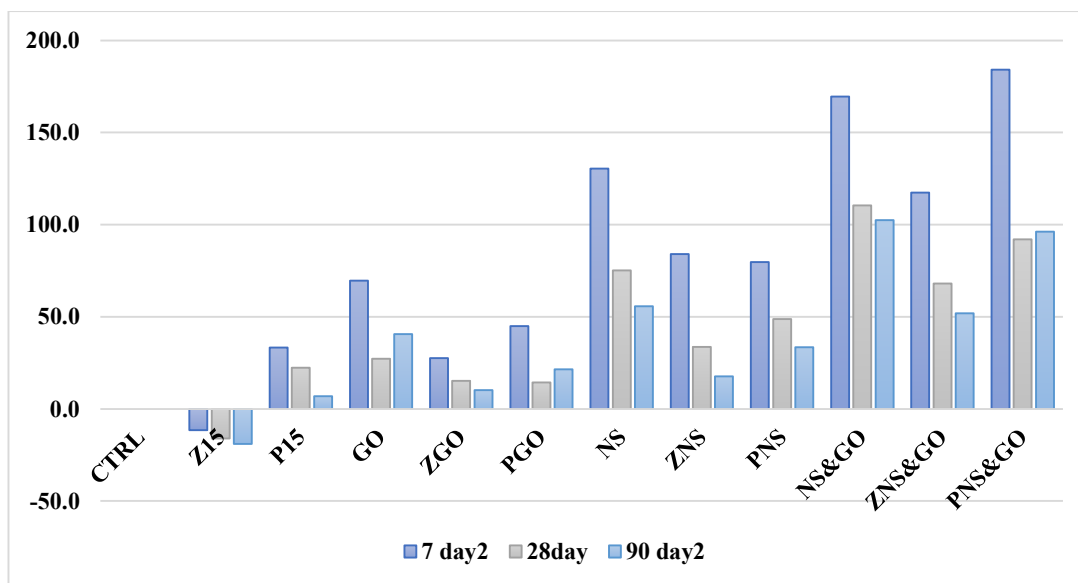
شکل ۹. درصد تغییرات مقاومت فشاری طرح مخلوط‌های ملات نسبت به ملات کنترل (مگاپاسگال)

Fig. 9. Percentage of compressive strength changes in mortar mixtures compared with control mortar



شکل ۱۰. مقاومت کششی طرح مخلوط‌های ملات در سنین مختلف (مگاپاسگال)

Fig. 10. Tensile strength of mortar specimens in different ages (MPa)



شکل ۱۱. درصد تغییرات مقاومت کششی طرح مخلوط‌های ملات نسبت به ملات کنترل

Fig. 11. Percentage of Tensile strength changes in mortar mixtures compared with control mortar

Ctrl داشته است. این بهبودها با خاصیت هسته‌زایی نانوسیلیس و خاصیت پل‌زنی گرافن اکساید که به چگال‌تر شدن فضای ماتریس سیمانی کمک می‌کند قابل توجیه است.

- افزودن ژئولیت و پومیس در طرح مخلوط‌های حاوی نانوسیلیس باعث کاهش مقاومت فشاری و کششی نسب به نمونه‌های مشابه بدون پوزولان در سنین مختلف شده است. این موضوع احتمالاً به دلیل کاهش مقدار کلسیم هیدروکسید در ناحیه خمیر سیمانی به دلیل وجود پوزولان‌های طبیعی و عدم دسترسی نانوسیلیس به آن برای تکمیل فرایند هیدراسیون و تبدیل به ژل مؤثر C-S-H بوده است. در نتیجه ذرات نانوسیلیس موجود در ملات سیمانی کلوخه شده و خود تشکیل نقاط ضعف اساسی در نواحی مختلف ملات خواهند شد [۷].

- جایگزینی گرافن اکساید در طرح مخلوط‌های حاوی پوزولان‌های طبیعی، طرح مخلوط‌های ZGO و PGO را به عنوان ملات‌های سه گانه شامل می‌شود. پوزولان ژئولیت در ترکیب با گرافن اکساید در روند کسب مقاومت فشاری اثر افزایشی و در روند کسب مقاومت کششی اثر کاهنده داشته است. این در حالی است که حضور پومیس در ترکیب با گرافن اکساید در طرح PGO مقاومت فشاری و کششی را در تمامی سنین کاهش داده است. دقت شود برداشته‌های فوق از مقایسه طرح مخلوط‌های نام برده با

۱-افزودن پوزولان طبیعی ژئولیت در بهبود روند کسب مقاومت فشاری مؤثر واقع شده است در حالی که مقاومت کششی ملات را کاهش داده است. این مطلب برای پوزولان طبیعی پومیس کاملاً برعکس است.

۲-نرخ فرایند هیدراسیون برای ملات حاوی ژئولیت در سنین اولیه نسبت به طرح کنترل افزایش یافته است. در مورد پومیس علی‌رغم پایین‌تر بودن نرخ فرایند هیدراسیون تا سن ۲۸ روز، با افزایش سن عمل‌آوری مقاومت فشاری ۹۰ روزه از هر دو طرح Ctrl و Z بالاتر رفته است.

۳-مقاومت فشاری و کششی ملات P نسبت به ملات کنترل و پس از ۲۸ روز عمل‌آوری به ترتیب ۹٪ کاهش و ۲۲٪ افزایش داشته که در توجیه آن با فعالیت پوزولانی به تناقض برخوایم خورد. این پدیده را می‌توان به علت وجود آب اضافه در ملات کنترل دانست که به منظور حفظ شرایط ثابت در ساخت آزمون‌ها برای همه طرح مخلوط‌ها برابر مقدار ثابت ۰/۴۸۵ در نظر گرفته شد. از طرفی به دلیل حساسیت بیشتر مقاومت کششی نسبت آب به سیمان، افت مقاومت کششی نسبت به مقاومت فشاری ملموس‌تر است [۳۳].

- افزودن نانوسیلیس و گرافن اکساید به صورت منفرد باعث افزایش مقاومت فشاری و کششی در سنین مختلف شده است. طرح GO و NS پس از ۲۸ روز عمل‌آوری در آب-آهک اشباع به ترتیب ۱۸٪ و ۲۸٪ افزایش مقاومت فشاری و ۲۷٪ و ۷۵٪ افزایش مقاومت کششی نسبت به طرح



مولکولی اندرکنش‌های میان گرافن اکساید و نانوسیلیس را مثبت نشان داده و خصوصیات مکانیکی نانو کامپوزیت NS&GO از جمله مدول یانگ و مقاومت کششی نهایی را افزایشی ارزیابی کرده است. در نهایت عملکرد نانو کامپوزیت NS&GO در ملات‌های حاوی پوزولان‌های طبیعی نیز نواقص احتمالی در خصوصیات مکانیکی از جمله مقاومت فشاری و کششی را مرتفع می‌نماید. پیشنهاد می‌شود در ادامه روند مطالعه کنونی از این ملات به عنوان ملات‌های پوششی بر روی سطح بتن در محیط‌های مخرب از جمله در معرض یون کلراید و سولفات استفاده و عملکرد آن بررسی شود.

### منابع

- [1] I. Odler, Hydration, setting and hardening of Portland cement, Lea's Chemistry of cement and concrete, (1998).
- [2] L. Turanli, B. Uzal, F. Bektas, Effect of large amounts of natural pozzolan addition on properties of blended cements, Cement and concrete research, 35(6) (2005) 1106-1111.
- [3] N. Lushnikova, L. Dvorkin, Sustainability of gypsum products as a construction material, in: Sustainability of Construction Materials, Elsevier, 2016, pp. 643-681.
- [4] R. Rodriguez-Camacho, R. Uribe-Afif, Importance of using the natural pozzolans on concrete durability, Cement and concrete research, 32(12) (2002) 1851-1858.
- [5] M. Shannag, High strength concrete containing natural pozzolan and silica fume, Cement and concrete composites, 22(6) (2000) 399-406.
- [6] A.A. Ramezani-pour, S. Mirvalad, E. Aramun, M. Peidayesh, Effect of four Iranian natural pozzolans on concrete durability against chloride penetration and sulfate attack, in: Proceedings of the 2nd international conference on sustainable construction materials and technology, 2010, pp. 28-30.
- [7] M. Najimi, J. Sobhani, B. Ahmadi, M. Shekarchi, An experimental study on durability properties of concrete containing zeolite as a highly reactive natural pozzolan, Construction and building materials, 35 (2012) 1023-1033.
- [8] K. Samimi, S. Kamali-Bernard, A.A. Maghsoudi, Durability of self-compacting concrete containing

طرح مخلوط GO حاصل شده است که با توجه به نمودارها نیز بهتر قابل مشاهده است.

• در پایان و در بررسی جایگزینی کامپوزیت NS&GO در ملات‌های سیمانی نکات زیر قابل برداشت خواهد بود.

۱- کامپوزیت نانو مواد عملکرد مناسب‌تری در بهبود خصوصیات مکانیکی (مقاومت فشاری و کششی) ملات‌های سیمانی نسبت به حالت منفرد داشته است.

۲- ملات NS&GO با ۳۹٪ افزایش مقاومت فشاری ۲۸ روزه بیشترین مقاومت فشاری را داشته است.

۳- افزودن پوزولان‌های طبیعی در ملات‌های حاوی کامپوزیت نانو مواد باعث کاهش مقاومت کششی در تمامی سنین عمل‌آوری شده است.

از تحلیل داده‌های جدول فوق می‌توان به تاثیرات مثبت کامپوزیت نانو مواد در بهبود خصوصیات مکانیکی ملات‌های سیمانی پی برد. ایجاد خاصیت هسته‌زایی در ناحیه خمیری و کاهش خلل و فرج موجود در ملات و به اصطلاح تشکیل یک ملات چگال‌تر دلیل اصلی بهبود صورت گرفته است. از طرفی جایگزینی پوزولان‌های طبیعی با درصد نسبتاً بالا باعث مصرف کلسیم هیدروکسید موجود در ناحیه خمیری و تولید ژل C-S-H می‌گردد. این فرایند که در تکنولوژی بتن به خاصیت پوزولانی موسوم است باعث اصلاح ساختار ملات می‌گردد. همچنین دیسپرسیون مناسب نانوذرات سیلیس با توجه به نتایج فوق نشان می‌دهد کاهش پارامترهای مکانیکی ملات‌ها به دلیل افزودن پوزولان‌های طبیعی از طریق جایگزینی کامپوزیت نانو مواد قابل جبران خواهد بود.

### ۴- نتیجه‌گیری

بهره‌مندی از فناوری نانو در زمینه ساخت روکش‌ها باعث تقویت خواص مکانیکی خواهد شد. از طرفی جهت استفاده از حداکثر ظرفیت ممکن در بهبود خواص مکانیکی ملات‌های سیمانی از طریق جایگزینی نانو مواد باید از دیسپرسیون مناسب آن‌ها اطمینان حاصل شود. در مطالعه حاضر از طریق هیدرولیز TEOS در حضور ورقه‌های گرافن اکساید و بدون بهره بردن از سورفکتانت‌ها به جداسازی ذرات نانوسیلیس پرداخته شده است. پوشش سیلیکونی ایجاد شده در سطح ورقه‌های گرافن اکساید نیز از تشکیل پیوندهای کوالانسی میان  $Ca^{2+}$  موجود در مایع منفذی و گروه‌های عاملی موجود در سطح گرافن اکساید، که عامل اصلی کلوخه شدن ورقه‌ها است، جلوگیری می‌کند. از طرفی نتایج شبیه‌سازی دینامیک

- [18] M. Mokhtar, S. Abo-El-Enein, M. Hassaan, M. Morsy, M. Khalil, Mechanical performance, pore structure and micro-structural characteristics of graphene oxide nano platelets reinforced cement, *Construction and Building Materials*, 138 (2017) 333-339.
- [19] H. Liu, Y. Yu, H. Liu, J. Jin, S. Liu, Hybrid effects of nano-silica and graphene oxide on mechanical properties and hydration products of oil well cement, *Construction and Building Materials*, 191 (2018) 311-319.
- [20] J. Lin, E. Shamsaei, F.B. de Souza, K. Sagoe-Crentsil, W.H. Duan, Dispersion of graphene oxide-silica nanohybrids in alkaline environment for improving ordinary Portland cement composites, *Cement and Concrete Composites*, 106 (2020) 103488.
- [21] C. ASTM, Standard specification for standard sand, in: American Society for, 2013.
- [22] A. Standard, ASTM C109-standard test method for compressive strength of hydraulic cement mortars, ASTM International, West Conshohocken, PA, (2008).
- [23] A. Designation, C307-03 (Reapproved 2012) Standard Test Method for Tensile Strength of Chemical-Resistant Mortar, Grouts, arid Monolithic Surfacing, (2012).
- [24] S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *Journal of computational physics*, 117(1) (1995) 1-19.
- [25] A. Stukowski, Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool, *Modelling and simulation in materials science and engineering*, 18(1) (2009) 015012.
- [26] S.H. Hahn, J. Rimsza, L. Criscenti, W. Sun, L. Deng, J. Du, T. Liang, S.B. Sinnott, A.C. Van Duin, Development of a ReaxFF reactive force field for NaSiO<sub>x</sub>/water systems and its application to sodium and proton self-diffusion, *The Journal of Physical Chemistry C*, 122(34) (2018) 19613-19624.
- [27] A.C. Van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, W.A. Goddard, ReaxFF: a reactive force field for hydrocarbons, *The Journal of Physical Chemistry A*, 105(41) (2001) 9396-9409.
- [28] W.M. Haynes, *CRC handbook of chemistry and physics*, pumice and zeolite against acid attack, carbonation and marine environment, *Construction and building materials*, 165 (2018) 247-263.
- [9] P. Madhuri, B.K. Rao, A. Chaitanya, Improved performance of concrete incorporated with natural zeolite powder as supplementary cementitious material, *Materials Today: Proceedings*, 47 (2021) 5369-5378.
- [10] M. Liu, H. Tan, X. He, Effects of nano-SiO<sub>2</sub> on early strength and microstructure of steam-cured high volume fly ash cement system, *Construction and Building Materials*, 194 (2019) 350-359.
- [11] A. Nazari, S. Riahi, RETRACTED: The effects of SiO<sub>2</sub> nanoparticles on physical and mechanical properties of high strength compacting concrete, in, Elsevier, 2011.
- [12] A.N. Givi, S.A. Rashid, F.N.A. Aziz, M.A.M. Salleh, Experimental investigation of the size effects of SiO<sub>2</sub> nano-particles on the mechanical properties of binary blended concrete, *Composites Part B: Engineering*, 41(8) (2010) 673-677.
- [13] M. Ltifi, A. Guefrech, P. Mounanga, A. Khelidj, Experimental study of the effect of addition of nano-silica on the behaviour of cement mortars, *Procedia engineering*, 10 (2011) 900-905.
- [14] A. Guefrech, P. Mounanga, A. Khelidj, Experimental study of the effect of addition of nano-silica on the behaviour of cement mortars Mounir, *Procedia Engineering*, 10 (2011) 900-905.
- [15] E. Shamsaei, F.B. de Souza, X. Yao, E. Benhelal, A. Akbari, W. Duan, Graphene-based nanosheets for stronger and more durable concrete: A review, *Construction and Building Materials*, 183 (2018) 642-660.
- [16] H. Peng, Y. Ge, C. Cai, Y. Zhang, Z. Liu, Mechanical properties and microstructure of graphene oxide cement-based composites, *Construction and Building Materials*, 194 (2019) 102-109.
- [17] W. Li, X. Li, S.J. Chen, Y.M. Liu, W.H. Duan, S.P. Shah, Effects of graphene oxide on early-age hydration and electrical resistivity of Portland cement paste, *Construction and Building Materials*, 136 (2017) 506-514.

- [30] S. Nosé, A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods, The Journal of chemical physics, 81(1) (1984) 511-519.
- [31] W.G. Hoover, Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions, Physical review A, 31(3) (1985) 1695.
- CRC press, 2014.
- [29] L. Martínez, R. Andrade, E.G. Birgin, J.M. Martínez, PACKMOL: a package for building initial configurations for molecular dynamics simulations, Journal of computational chemistry, 30(13) (2009) 2157-2164.

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

A. A. Ramezaniapour, M. M. Zaeri Amirani, S. Mirvalad, Performance of Graphene Oxide nanosheets on the dispersion of nano SiO<sub>2</sub> and its effect on the mechanical properties of cement mortar, Amirkabir J. Civil Eng., 54(10) (2023) 3759-3776.

DOI: 10.22060/ceej.2022.18528.6891



