



Abordagem de Modelo Elétrico para Análise do Comportamento de Compósitos de Nanotubos de Carbono à Base de Cimento

Ryan ARAÚJO¹, Luis Carlos NASCIMENTO FILHO², Jerfson MOURA³ and Esequiel MESQUITA⁴

¹Graduando em Engenharia Civil - UFC, Ceará, Brasil, ryan.ara31@gmail.com

²Graduado em Engenharia Civil - UFC, Ceará, Brasil, filho.lcf@gmail.com

³Doutor em Engenharia Civil - UFC, Ceará, Brasil, jerfson.lima@ufc.br

⁴Doutor em Engenharia Civil - UFC, Ceará, Brasil, emesquita@ufc.br

Resumo: A utilização de materiais compósitos complementa a tecnologia de concretos e argamassas no descobrimento de novas propriedades. Semelhante a isso, a descoberta dos nanotubos de carbono de paredes múltiplas (NTC's) possibilitou o desenvolvimento de diversos materiais automatizados e inteligentes. Dessa forma a junção dos nanotubos e as pastas cimentícias permitiu o avanço no estudo de concretos com propriedades elétricas. Os estudos das propriedades normalmente se desenvolvem a partir de ensaios de laboratório e com isso surgem algumas limitações, como a utilização de corpos de prova geometricamente padronizados e a dificuldade de obter materiais pouco encontrados no mercado, como os NTC's. Assim, este documento tem como objetivo desenvolver simulações numéricas de ensaios desenvolvidos em laboratório e abranger, através da calibrações de modelos virtuais, estudos com compósitos cimentícios dopados de nanotubos de carbono de paredes múltiplas, assim, permitindo a aplicação em diferentes geometrias e até variações de propriedades. Desse modo, com a aplicação do Método dos Elementos Finitos (MEF), o artigo conseguiu representar, com ensaios antes feitos em laboratório, e apontar este como um novo meio no estudo de materiais compósitos cimentícios com nanotubo de carbono.

Palavras Chaves: Compósito Cimentício; Nanotubos de Carbono; Modelagem Numérica.

Abstract: The use of composite materials complements the technology of concretes and mortars in the discovery of new properties. Similar to this, the discovery of multi-walled carbon nanotubes (NTC's) enabled the development of several automated and intelligent materials. In this way, the combination of nanotubes and cement pastes allowed progress in the study of concretes with electrical properties. The studies of properties are usually developed from laboratory tests and with that some limitations arise, such as the use of geometrically standardised specimens and the difficulty of obtaining materials rarely found in the market, such as NTC's. Thus, this document aims to develop numerical simulations of tests developed in the laboratory and to cover, through the calibration of virtual models, studies with cementitious composites doped with multi-walled carbon nanotubes, thus allowing the application in different geometries and even variations of properties. Thus, with the application of the Finite Element Method (FEM), the article was able to represent, with tests previously carried out in the laboratory, and point out this as a new means in the study of cement composite materials with carbon nanotube.

Keywords: Cement composite; Carbon Nanotubes; Numerical Modeling.

1. Introdução

Com a utilização do concreto como matéria prima estrutural, na década de 1950, verifica-se o aumento de pesquisas que objetivam a descoberta de novas propriedades desse insumo. Além disso, a descoberta dos Nanotubos de Carbono (NTC) por Iijima em 1991 proporcionou um enorme avanço em inúmeras áreas da Ciência, como no desenvolvimento de materiais avançados e/ou inteligentes, dispositivos eletrônicos e células combustíveis. Dentre as variações do concreto, os NTCs são opções para o monitoramento estrutural quanto ao comportamento mecânico sendo estático e dinâmico, além da correlação dessas com propriedades eletromagnéticas (D'Alessandro, 2015; Materazzi, 2013; Loh, 2007). Os nanotubos de carbono são excepcionalmente multifuncionais devido à combinação de suas excelentes propriedades mecânicas com suas propriedades elétricas e térmicas (alta resistência e ao mesmo tempo sendo elástico, e suas propriedades elétricas similares com as de semicondutores).

A detecção inteligente, uma das técnicas de verificação da saúde estrutural, sucede devido a aplicação de um estímulo externo sobre a estrutura (variação de tensão, temperatura e umidade) que, devido às propriedades do sensor inserido na estrutura, ocasiona variações em sua configuração interna, acarretando na alteração de suas propriedades, gerando resposta ao estímulo. Um exemplo em que o estímulo externo seja configurado por uma deformação mecânica, a resposta ao estímulo, por meio do sensor, é a variação na resistência elétrica, fenômeno esse denominado piezoresistividade (AVILÉS et al., 2019)

Estudos da literatura implicam em pesquisas, relacionadas aos materiais à base de cimento dopados com inclusões de carbono, concentrado na fabricação e caracterização experimental, e estudos teóricos que explicam os princípios físicos subjacentes ao seu comportamento complexo são limitados (D'Alessandro, 2015). De acordo com o artigo de D'Alessandro (2015), realizou-se a avaliação do modelo eletromecânico, expresso matematicamente, para NTC, desenvolvido por Materazzi (2013), baseado em um circuito passivo concentrado. O modelo compreende em um capacitor, associado à polarização interna do compósito, juntamente com dois resistores, referente à condutividade da interface eletrodos-sensores e do compósito. A deformação mecânica do composto modula os parâmetros do circuito, resultando assim em uma resposta elétrica dependente da deformação do sensor.

Conforme os experimentos realizados por D'Alessandro (2015), o preparativo para o estudo de cimento a base de NTC requer a utilização de métodos desde a dosagem até o ensaio com corpos de prova, os quais requer a definição de dimensões normalizadas. Além disso, os ensaios em laboratório quer seja estático, quer seja dinâmico tendem a obedecer condições de contornos específicas para a obtenção de processamentos mecânicos válidos relacionados com respostas elétricas. Observa-se a influência dos fatores geométricos nos resultados, podendo destacar a variação da resistência interna (R_0) causada pelo distanciamento dos eletrodos. Dessa forma, as variantes nas condições de contorno tendem a limitar os resultados deixando um espaço entre os ensaios laboratoriais e a aplicabilidade dos NTC em estruturas existentes.

Assim, para expandir a aplicabilidade dos NTC's, este trabalho objetiva fazer um paralelo entre os resultados de laboratório comprovados com cálculo analítico e dados obtidos através de uma plataforma de simulações numéricas, isto é, uma análise de nanopartículas em compósitos cimentícios, utilizando o Métodos dos Elementos Finitos (MEF) através do software comercial COMSOL Multiphysics.

2. Método Experimental

Os ensaios desenvolvidos neste documento se referem à relação entre o comportamento elétrico dos compósitos de cimento com adição de nanotubos de carbono. As configurações dos ensaios foram retiradas dos trabalhos de D'Alessandro (2015).

No estudo em questão, D'Alessandro (2015), realizou ensaios com corpos de provas de compósito cimentício com nanotubos de carbono. Foi aplicado uma diferença de potencial para a observação com comportamento condutor do compósito. Observou-se que o ensaio eletromecânico com compósitos cimentícios com NTC podem ser analogamente entendido como um sistema com associação de capacitores e resistores. A Figura 1, (I) abaixo, apresenta as características geométricas do ensaio, em (II) por sua vez, pode ver o circuito análogo que descreve o comportamento da corrente através do corpo.

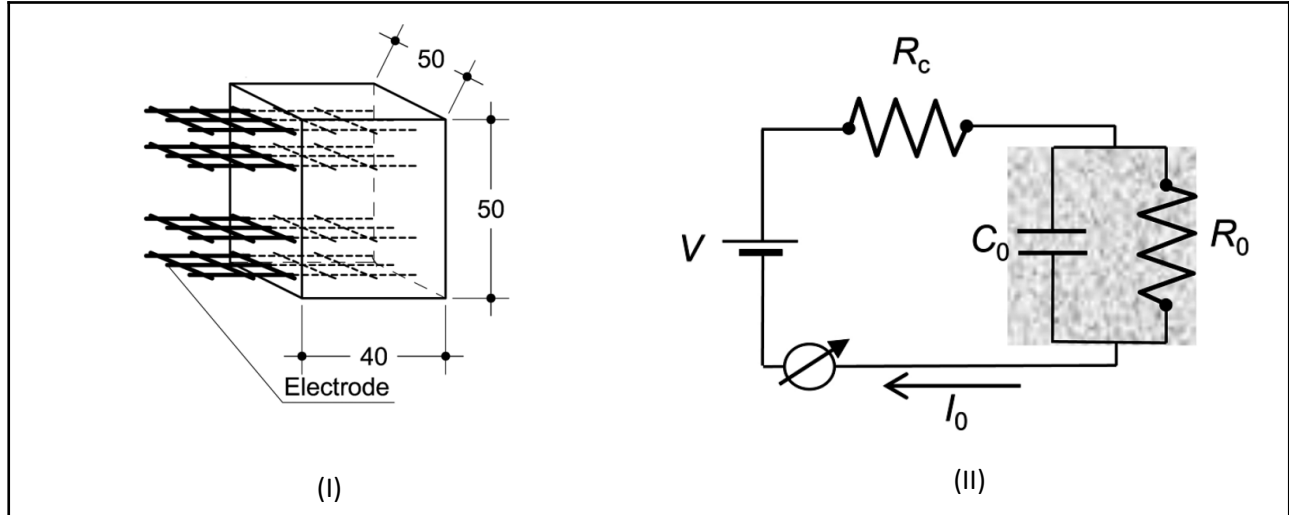


Figura 1 – (I) Geometria do ensaio de D'Alessandro (2015) e (II) Circuito equivalente.

Com o objetivo de analisar a resistência interna do corpo, a resistência do sistema R foi subdividida entre a resistência dos acessórios do ensaio (cabos, eletrodos e contatos) e a resistência interna útil do corpo de prova, sendo R_c e R_0 , respectivamente. A Equação 01 descreve o comportamento da corrente no sistema quando submetido a diferença de potencial, sendo τ tempo característico do circuito dado pela Equação 02 (D'ALESSANDRO, 2015).

$$I_0 = \frac{V}{\bar{R}} \left(\frac{R_0}{R_c} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) + 1 \right) \quad (1)$$

$$\tau = \frac{C_0 R_0 R_c}{\bar{R}} \quad (2)$$

$$\bar{R} = R_0 + R_c \quad (3)$$

Conforme a Equação 01, tanto a resistência do corpo de prova quanto o tempo característico dependem de fatores geométricos, uma vez que se tratam de resistência elétrica e capacitância. Assim, no estudo foram analisados diferentes comprimentos de corpos de prova, sendo 10, 30 e 40 milímetros. Devido a mudança de comprimento, quando aplicado uma diferença de potencial V (Volts) o corpo tem uma variação na condutividade. Dessa forma, D'ALESSANDRO (2015), desenvolveu gráficos da variação da condutividade em função do tempo, descrevendo com precisão a corrente nos comprimentos de corpos de prova estudados, justificando com comportamento análogo a um circuito com a presença de capacitores.

3. Modelo Numérico

Para a busca de resultados convergentes aos ensaios realizados por D'Alessandro (2015). Os modelos numéricos foram desenvolvidos com o software COMSOL Multiphysics o qual utiliza o Métodos dos Elementos Finitos (MEF). Esse método é bastante utilizado na engenharia para o desenvolvimento de análises físicas que fogem da abrangência do cálculo analítico. Dessa forma, o MEF é a ferramenta capaz de descrever o comportamento elétrico de compósitos e ainda permite expandir para analisar geometria diferentes de corpos de prova prismáticos.

As análises correspondem a três simulações numéricas com corpos de prova de concreto construídos com NTC, uma para cada distância estudada, sendo 10, 30 e 40 milímetros (D'ALESSANDRO, 2015). Aplicou-se uma diferença de tensão para a obtenção de resultados de corrente, assim, o modelo buscará encontrar valores de corrente elétrica semelhantes à literatura.

Inicialmente, o desenvolvimento da geometria fez-se com o próprio programa de simulação, COMSOL. Nessa etapa, os corpos foram modelados nas dimensões apontadas nos documentos analisados, basicamente se trata de um corpo de prova constituído do compósito de cimento e NTC'S em formato de paralelepípedo com largura de 40 x 50 x 50 mm, já os eletrodos foram desenhados com uma geometria retangular, com as dimensões 40 x 1.5 mm, ambas geometrias apresentados na Figura 2 (II). Além disso, os eletrodos foram representados por corpos maciços com propriedades indicadas na Tabela 01.

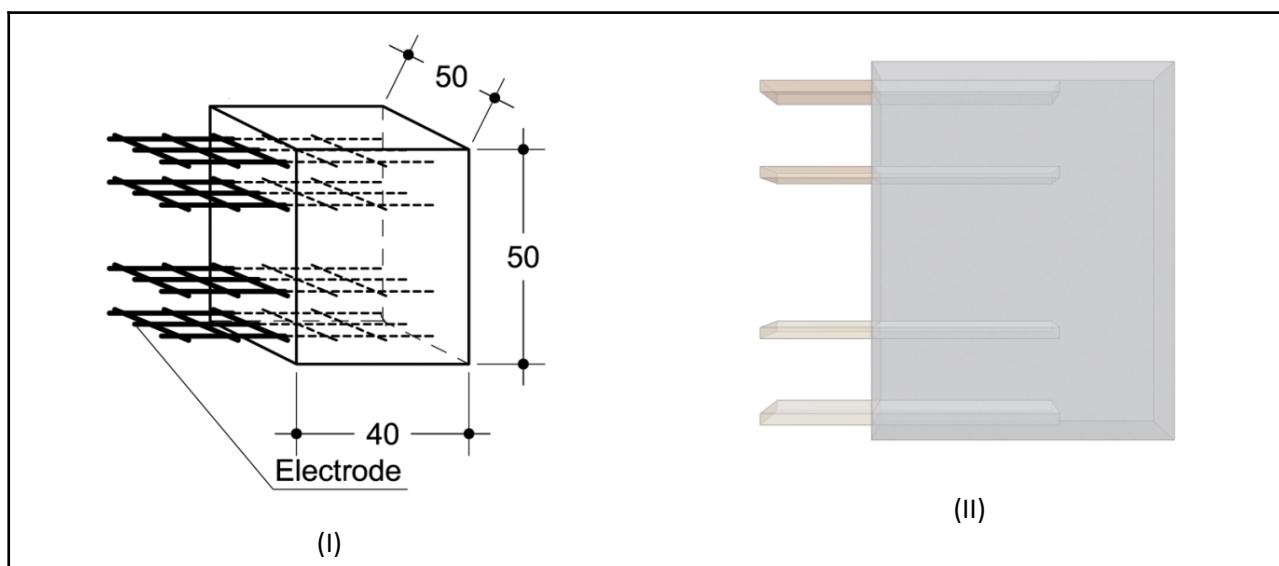


Figura 2 – Modelo geométrico virtual (II) análogo ao desenvolvido em laboratório (I) (D'Alessandro, 2015).

Na sequência fluxo de desenvolvimento consiste, no levantamento dos materiais que compõem a simulação, assim buscou-se na literatura algumas propriedades elétricas para o corpo de prova juntamente com os eletrodos. Utilizando propriedades dos materiais iguais para ambas simulações, dessa forma, de acordo com o estudo de D'Alessandro (2015), verifica-se a resistividade do concreto com adição de NTC's, assim como, módulo elasticidade e coeficiente de poisson. Para os eletrodos, buscou uma material cuja a condutividade ajudasse no estudo apenas do corpo de prova, adotando assim, um material metálico de boa condutância. Os demais valores que compõem o modelo numérico estão presentes na tabela abaixo.

Tabela 1 – Propriedades da Simulação Numérica.

DESCRIÇÃO	CONCRETO + NTC'S			ELETRODO
	1 cm	3 cm	4 cm	1, 3 e 4 cm
Density [kg/m ³]	2300.00	2300.00	2300.00	88940.00
Módulo de Young [Pa]	25x10 ⁹	25x10 ⁹	25x10 ⁹	126x10 ⁹
Poisson	0.20	0.20	0.20	0.34

Vale ressaltar que os valores de condutividade elétrica e permissividade relativa foram extraídos indiretamente dos artigos bases. Isso se deve ao fato de dependerem diretamente de fatores do experimento, sendo fatores geométricos, e fatores que dependem do tipo de material. Dessa forma, essas duas grandezas foram calculadas conforme as equações 4 e 5 a seguir.

$$C = \frac{L}{RA} \quad (4)$$

$$\epsilon_r = \frac{cd}{\epsilon_0 A} \quad (5)$$

A primeira análise foi dividida em três partes: (I) eletrodo de cobre (II) corpo prismático e (III) junção dos sistemas (I) e (II). Após a divisão, por conta de um experimento controlado, criou-se circuitos simples como observado na Figura 3, baseado na primeira Lei de Ohm, possibilitando verificar a corrente elétrica do sistema, e comparando com o resultado apresentado pelo programa.

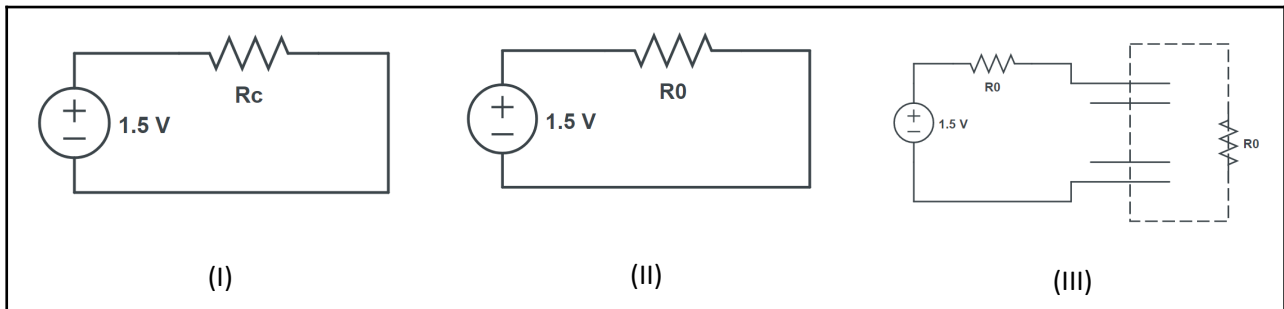


Figura 3 – Esquema dos circuitos para o estudo individual (I) e (II), e geral (III).

Com o intuito de comparar os resultados, necessita-se da implementação dos valores de entrada que o software COMSOL solicita ao usuário, como a variável condutividade elétrica, propriedade que define a possibilidade que os materiais possuem de transportar cargas elétricas, e permissividade relativa, relacionado com o aumento da capacidade de armazenagem de energia em um meio dielétrico sob efeito de um campo elétrico. Assim, por meio das Equações 4 e 5, encontram-se os valores de condutividade elétrica e permissividade relativa, para que seja gerado a variável de interesse, corrente elétrica, e consequentemente, compará-lo com o resultado analítico.

A Figura 4, apresenta os resultados obtidos pelo software referente a corrente elétrica do eletrodo e do corpo prismático, para a distância entre os eletrodos de 4 cm. Desse modo, entende-se que após a verificação e validação, de cada componente do sistema, realiza-se a união dos materiais no software COMSOL multiphysics para a análise do sistema como um todo. Assim, logo após a união dos sistemas, resulta-se em um valor diferente do calculado (Figura 5), possuindo uma diferença de $2.38\text{E-}06\text{ A}$, pode-se entender que ao acoplar o eletrodo, a parte que está dentro da geometria do corpo prismático, seja desconsiderada, influenciando diretamente na condutividade elétrica do sistema (a).

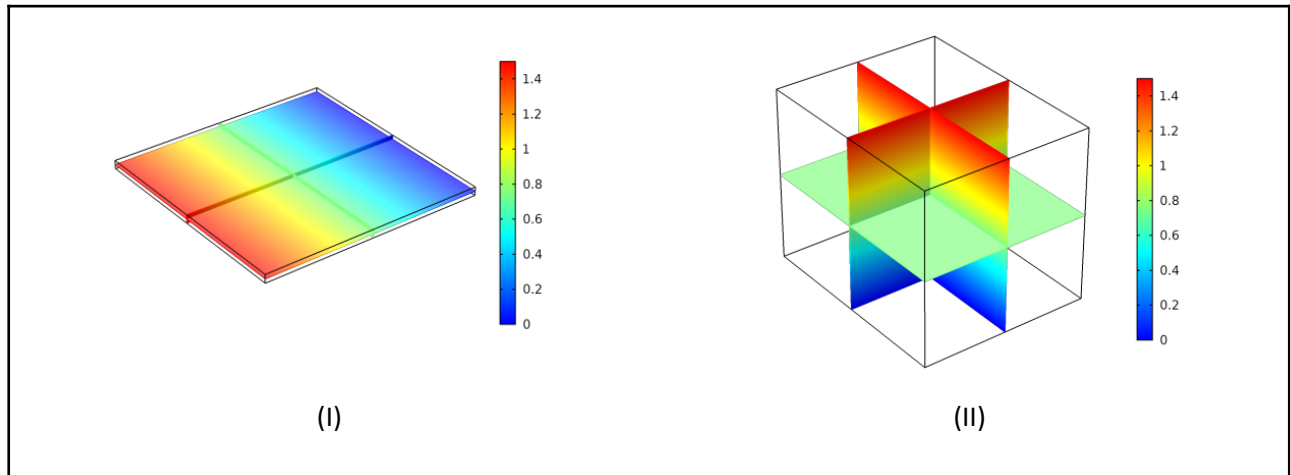


Figura 4 – (I) Eletrodo; (II) Corpo prismático com comprimento de 4 cm.

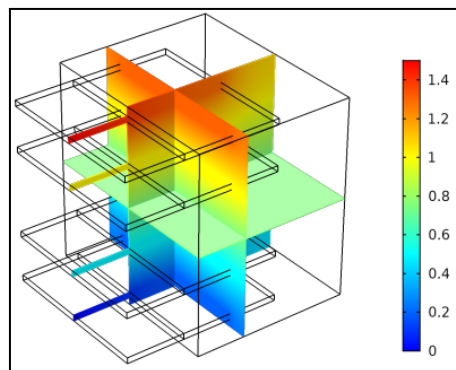


Figura 5 – Sistema completo com eletrodo e corpo de prova.

O Método dos Elementos Finitos é desenvolvido realizando uma discretização dos sistema físico por meio de uma malha de elementos com o formato adequado para a geometria a ser representada. Os elementos podem ter diversas formas geométricas e cada um possui nós ligados por arestas que delimitam o contorno de cada elemento e consequentemente define o limite do sistema. A partir da discretização é que se realiza os cálculos matemáticos, as propriedades dos materiais e condições de contorno são passadas para cada nó e conforme a interação dos nós é definido as propriedades dos sistema físico a ser analisado.

Partindo disso, por se tratar um problema com geometria regular, no entanto, quando analisa o sistema global, há uma maior complexidade para a resolução do problema, assim, foi definido um elemento de malha tetraédrico com com um discretização de malha fina com tamanho máximo do elemento de 3 mm. A Figura 6 abaixo representa a discretização em elementos tetraédricos.

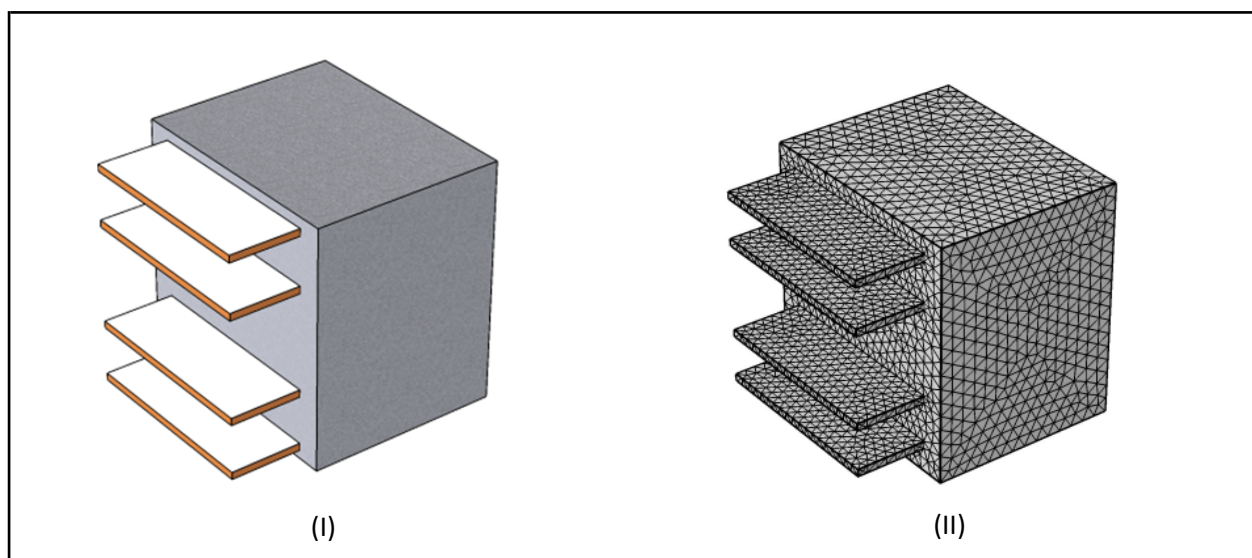


Figura 6 – Geometria discretizada em elementos finitos (II).

4. Resultados

Os resultados obtidos das simulações, implicam na validação do modelo numérico com a comparação entre os resultados experimentais e analítico, utilizando a corrente elétrica como referência de validação do sistema, da produção de D'Alessandro (2015), na qual realiza-se respostas elétricas do material nanocompósito à base de cimento (à base de cimento e nanotubo de carbono), sem a aplicação de carregamento. Os resultados foram construídos através de duas etapas, a primeira consistiu na separação dos materiais que constitui o sistema (eletrodo de cobre ancorado no corpo prismático composto por pasta cimentícia e nanotubos de carbono de paredes múltiplas) em que analisa-se cada componente de forma isolada, nos permitindo encontrar valores de entrada no Software, como condutividade elétrica (Equação 04), e a segunda etapa utilizou-se a Equação 05 para encontrar a permissividade relativa, por meio dos dados apresentados pela autora, e incluir no sistema, para a realização da simulação do modelo.

Tabela 2 – Resultados de Condutividade e Permissividade relativa.

DESCRIÇÃO	CONCRETO + NTC'S			ELETRODO		
	1 cm	3 cm	4 cm	1 cm	3 cm	4 cm
Permissividade Relativa	2.91E+08	8.64E+08	4.44E-04	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Condutividade Elétrica [S/m]	2.70E-04	4.62E-04	1.28E+09	4.67E-02	4.65E-02	4.66E-02

A segunda etapa do estudo consiste no cálculo e inclusão da permissividade relativa nos dados de entrada do sistema e, consequentemente, comparar com os resultados da autora. Os valores utilizados para a aplicação da fórmula foram retirados das medições realizadas por D'Alessandro, 2015, na qual utilizou-se os

valores da capacitância (c), distância entre os eletrodos (L), Permissividade do vácuo (ϵ_0) e área transversal do material compósito cimentício dopado com nanotubos de carbono de paredes múltiplas. Por conta da alteração da distância dos eletrodos (1, 3 e 4 cm), a permissividade relativa de estudo será diferente para cada distância.

Com isso, após incluir o segundo parâmetro no COMSOL multiphysics, efetuou-se a simulação do sistema. Em primeira análise, observa-se, inicialmente, na Figura 7, a influência direta da condutividade elétrica sobre a corrente elétrica no meio de estudo, visto que ela é o inverso da resistividade elétrica e da permissividade relativa, na qual atua semelhante a um capacitor, em que há um carregamento gradativo, impedindo a passagem da corrente elétrica por completo, assim, ao carregar, pode-se notar no gráfico, a partir do tempo 100s em que ele se estabiliza, permitindo a passagem total da corrente.

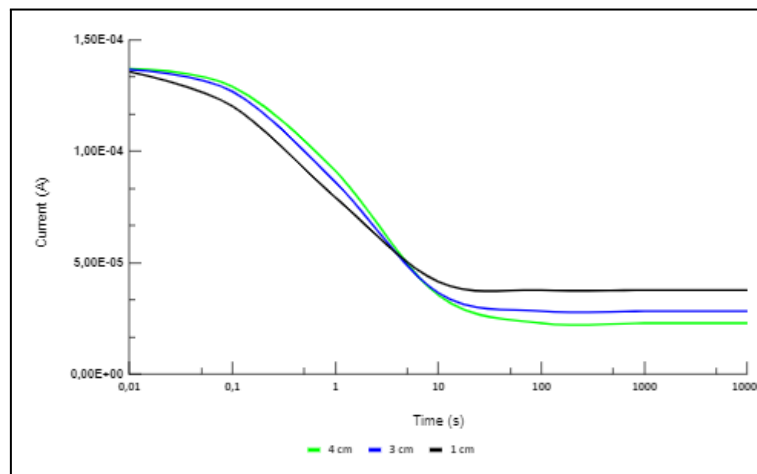


Figura 7 – Corrente Elétrica em função do tempo.

Ademais, a partir dos resultados encontrados pelo Software, realiza-se o comparativo no gráfico da Figura 8, por meio da influência da resistência do sistema em função do tempo, entre os valores experimentais e analítico da autora com o modelo numérico encontrado, a fim de sanar a resposta elétrica do sensor.

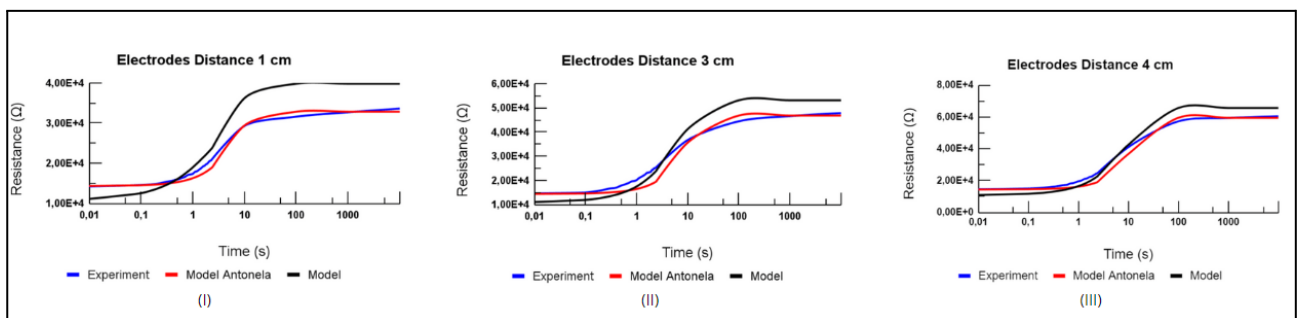


Figura 8 – Comparação entre resultados experimentais, analíticos e do modelo numérico com distâncias variáveis entre os eletrodos ativos: (I) 1 cm, (II) 3 cm e (III) 4 cm.

Com isso, verifica-se na Figura 8 a viabilidade de utilizar o modelo numérico proposto para o estudo elétrico em questão, ademais, vê-se que a partir do gráfico (II) distância do eletrodo 3 cm, a curva se torna mais semelhante, fator este que pode estar relacionado com a condutividade do material, já que quanto mais realizam-se medições com distanciamento maiores, menor será a resistência daquele sistema, consequentemente, maior será a condutividade.

5. Conclusão

A fim de expandir o desenvolvimento desse conhecimento de sensores a base de cimento nanocompósito, o presente trabalho permitiu a correlação entre os resultados experimentais do estudo de D'Alessandro com a simulação numéricas através do software COMSOL Multiphysics, sendo assim, tornaram-se mais acessíveis e claras as informações quanto ao comportamento elétrico desses meios de monitoramento de estruturas.

Com base no que foi apresentado, a simulação numérica do ensaio realizado em laboratório através de modelo numérico do métodos dos elementos finitos apresentou resultados coerentes quanto ao comportamento da corrente e resistência elétrica. Com o modelo de elementos finitos pode-se notar o comportamento das propriedades elétricas e a proximidade com os resultados experimentais. Assim ratifica-se o uso de modelos matemáticos para tal simulação uma vez que seus resultados demonstram-se assertivos quando estabelecida essa comparação.

Notou-se também que quanto maior a distância entre os eletrodos, o que aumenta o comprimento do corpo de prova, os gráficos tendem a ficar mais próximos do que foi medido em laboratório e calculado analiticamente. As propriedades elétricas que foram calculadas sendo essas a permissividade relativa e condutividade térmica possuem grande influência na validação dos resultados e assim podem ser melhor trabalhadas no processo de calibragem do modelo.

Dessa forma, a aplicação da modelagem numérica é de extrema importância para o estudo dos compósito cimentícios com adição de NTC's uma vez que possibilita variações geométricas após o processo de validação, e abrange a possibilidade de expandir o conhecimento para o estudo piezoresistivo de estruturas com monitoramento com a utilização do Nanotubos de Carbono.

Referências

- AVILÉS, F. et al. Effect of carbon nanotube length on the piezoresistive response of poly (methyl methacrylate) nanocomposites. *European Polymer Journal*, v. 110, p. 394–402, 2019.
- D'ALESSANDRO, Antonella et al. Electromechanical modelling of a new class of nanocomposite cement-based sensors for structural health monitoring. *Structural Health Monitoring*, v. 14, n. 2, p. 137-147, 2015.
- D'ALESSANDRO, Antonella; MATERAZZI, Annibale Luigi; UBERTINI, Filippo (Ed.). *Nanotechnology in cement-based construction*. CRC Press, 2020.
- IJIMA, Sumio. Helical microtubules of graphitic carbon. *nature*, v. 354, n. 6348, p. 56-58, 1991.
- LI, Chunyu; THOSTENSON, Erik T.; CHOU, Tsu-Wei. Sensors and actuators based on carbon nanotubes and their composites: a review. *Composites science and technology*, v. 68, n. 6, p. 1227-1249, 2008.
- MATERAZZI, Annibale Luigi; UBERTINI, Filippo; D'ALESSANDRO, Antonella. Carbon nanotube cement-based transducers for dynamic sensing of strain. *Cement and Concrete Composites*, v. 37, p. 2-11, 2013.