



## استفاده از روش دینامیک مولکولی در تخمین خواص مکانیکی خمیر سیمان سخت شده در مقیاس نانو

داود توکلی<sup>1</sup>، امیر طریقت<sup>2\*</sup>

1- دانشجوی دکتری، مهندسی عمران - سازه، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

2- استادیار، مهندسی عمران - سازه، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

\* تهران، صندوق پستی 16785-136، tarighat@srutu.edu

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 04 فروردین 1395

پذیرش: 18 اردیبهشت 1395

ارائه در سایت: 22 خرداد 1395

کلید واژگان:

خواص الاستیک

دینامیک مولکولی

خمیر سیمان سخت شده

شبیه سازی

نانو مقیاس

### چکیده

خواص بتن به خواص خمیر سیمان سخت شده وابسته است. خمیر سیمان سخت شده از موادی با ویژگی‌های مختلف تشکیل شده است و دارای پیچیدگی‌هایی در ساختار می‌باشد. با توجه به اینکه خواص مصالح وابستگی زیادی به ساختار اتمی خود دارند، بررسی محصولات هیدراتاسیون در مقیاس نانو می‌تواند تا حدود زیادی در شناخت خواص بتن کمک کننده باشد. در این مطالعه به بررسی خواص مکانیکی مهمترین محصولات هیدراتاسیون شامل کلسیم سیلیکات هیدراته، کلسیم هیدروکسید، اترینگایت، هیدروگارت و منوسولفوالومینات پرداخته خواهد شد. برای این منظور با استفاده از روش دینامیک مولکولی و با کمک‌گیری از پنج میدان نیروی مختلف شامل: کامپس، کامپس II، اینترفیس، یونیورسال و دریدینگ شبیه‌سازی صورت گرفته و سپس با استفاده از روابط الاستیسیته، مدول برشی، مدول حجمی، ضریب پواسون و مدول یانگ تعیین شده و همچنین بهینه‌ترین میدان نیرو نیز تعیین خواهد شد. همچنین نتایج بدست آمده اولیه با در نظر گرفتن تخریب ماده، توسط مدل میکرومکانیکی با مدل‌های واقعی معادل‌سازی شده‌اند. در نهایت نتایج بدست آمده با نتایج موجود در ادبیات فنی مقایسه خواهند شد. در پایان خواص الاستیک محصولات تشکیل دهنده خمیر سیمان با دقت مناسبی تخمین زده شد و نتایج نشان داد که روش دینامیک مولکولی تا حد زیادی توانایی تخمین خواص الاستیسیته خمیر سیمان سخت شده را دارد.

## Estimation of mechanical properties of hardened cement paste with molecular dynamics simulation method at nano scale

Davoud Tavakoli, Amir Tarighat\*

Department of Civil Engineering, Shahid Rajaei Teacher Training University, Tehran, Iran.

\* P.O.B. 16785-136 Tehran, Iran, tarighat@srutu.edu

### ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper  
Received 23 March 2016  
Accepted 07 May 2016  
Available Online 11 June 2016

#### Keywords:

Elastic properties  
Molecular dynamics  
Hardened cement paste  
Simulation  
Nano scale

### ABSTRACT

The cement paste properties as the matrix in concrete are of great importance in specifying its properties. Recent advances in concrete industry have highlighted the need for accurate knowledge about its nano-structure and components. To estimate the important mechanical properties such as Young's modulus, bulk modulus and Poisson's ratio of the hardened cement paste at the nanoscale, a comprehensive set of crystalline structures that represent the main hardened cement paste constituents (CSH, CH, Ettringite, Hydrogarnet and monosulphoaluminate) is developed for Molecular Dynamics (MD) simulations. Five different force fields (COMPASS, COMPASS II, INTERFACE, Universal and Deriding) were used and compared with each other to be able to measure the mechanical properties of these compounds. Also, the properties of two types of C-S-H with high and low density were determined by using Mori-Tanaka method. Lastly, simulation results reported by the authors were compared with existing computational and experimental values. The results show that using molecular dynamics method was suitable in estimating mechanical properties of hardened cement paste. These findings might be applied on larger scales and also multi-scale simulations.

### 1-مقدمه

بروز خواص متفاوتی در بتن می‌شوند. هرگونه تغییر و یا نقص در محصولات خمیر سیمان هیدراته می‌تواند منجر به تغییر خواص نهایی بتن شود؛ بنابراین استفاده از روش‌ها و تکنولوژی‌های جدید برای شناخت بیشتر محصولات خمیر سیمان هیدراته لازم است. محصولات اصلی هیدراتاسیون در خمیر سخت شده سیمان شامل: کلسیم سیلیکات هیدراته، هیدروکسید کلسیم، اترینگایت، هیدروگارت و منوسولفو آلومینات می‌باشند. ترکیب این محصولات در خمیر سیمان سخت شده منجر به تولید یک کامپوزیت ناهمگن

مهمترین مصالح ساختمانی بتن است. استفاده از بتن در جهان یک تن به ازای هر نفر می‌باشد. تقریباً در اکثر سازه‌ها از بتن در بخشی و یا در همه سازه استفاده می‌گردد و این موضوع اهمیت شناخت و مطالعه هر چه بیشتر آن را یادآوری می‌کند [1]. بتن ترکیبی از سیمان، آب و سنگدانه است که ترکیب سیمان با آب منجر به واکنش هیدراتاسیون شده و این واکنش شیمیایی محصولاتی را تولید می‌کند که مقدار و کیفیت این محصولات باعث

Please cite this article using:

D. Tavakoli, A. Tarighat, Estimation of mechanical properties of hardened cement paste with molecular dynamics simulation method at nano scale, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 6, pp. 71-78, 2016 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

محصولات مورد نظر به روش دینامیک مولکولی مورد شبیه‌سازی قرار خواهند گرفت و سپس با استفاده از روابط الاستیسیته خواص مکانیکی آن‌ها استخراج شده و با نتایج مطالعات قبلی مقایسه خواهند شد. همچنین با توجه به اهمیت میدان‌های نیرو در نتایج نهایی، میدان نیروی مختلف در شبیه‌سازی‌ها به کار برده شده و دقت آنها برای این مواد بررسی شده است. بررسی خواص مکانیکی محصولات خمیر سیمان سخت شده می‌تواند به شناخت بهتر عوامل تأثیرگذار بر خواص مکانیکی بتن کمک کرده و منجر به بهبود برخی از نواقص در ساختار بتن گردد.

## 2- محصولات تشکیل دهنده خمیر سیمان سخت شده

مهمترین جزء کامپوزیتی به نام بتن، سیمان است. سیمان در واکنش با آب در نهایت خمیرسیمان سخت شده را به وجود می‌آورد. ترکیب خمیر سیمان و سنگدانه باعث به وجود آمدن بتن می‌گردد. در واقع در بتن، خمیر سیمان نقش ماتریس<sup>6</sup> را بازی می‌کند و سنگدانه‌ها نقش اینکلوزن<sup>7</sup> را دارند. خمیر سیمان نقش اصلی در خواص نهایی بتن را بازی می‌کند. در اثر واکنش هیدراتاسیون سیمان محصولاتی در خمیر سیمان تشکیل می‌گردد که خواص نهایی خمیر سیمان و در بعد بزرگتر بتن وابسته به آن‌ها می‌باشد. محصولات مهم تشکیل دهنده خمیر سیمان شامل: ژل کلسیم سیلیکات هیدراته، هیدروکسید کلسیم<sup>8</sup>، اترینگایت<sup>9</sup>، هیدروگارت<sup>10</sup> و منوسولفوآلومینات<sup>11</sup> می‌باشند.

مهمترین محصول تشکیل شده در سیمان، ژل کلسیم سیلیکات هیدراته می‌باشد. این ژل از ترکیب فازهای دی‌کلسیم‌سیلیکات<sup>21</sup> و تری‌کلسیم‌سیلیکات<sup>31</sup> سیمان با آب تولید می‌شود. این ماده حدود 50 تا 70 درصد از خمیر سیمان سخت شده را تشکیل می‌دهد. بیشتر خواص مقاومتی و دوامی و همچنین خواص پایداری ابعادی بتن وابسته به این محصول می‌باشد [11]. کلسیم سیلیکات هیدراته تقریباً به صورت آمورف بوده و علی‌رغم سال‌های زیادی که از کشف این ماده در بتن گذشته است و همچنین با وجود تکنولوژی‌های مدرن در زمینه شناسایی مواد هنوز ساختار دقیق و نسبت مواد تشکیل دهنده آن مشخص نشده است. با توجه به مشخص نبودن درصد مواد تشکیل دهنده این ماده معمولاً به صورت HSC نوشته می‌شود. با این وجود بیشتر محققان بر این باورند که این ژل یک ساختار لایه‌ای شبیه به یک ماده معدنی به اسم توبرموریت دارد. توبرموریت دارای زنجیره‌های سیلیکاتی با اتمهای کلسیم در بین زنجیره‌ها می‌باشد. حدود 30 ماده مختلف با ساختار مشابه با کلسیم سیلیکات هیدراته تاکنون شناسایی و پیشنهاد شده است ولی تحقیقات نشان داده که بیشترین شباهت در زمینه ساختار و خواص در توبرموریت وجود دارد. توبرموریت دارای چهار گونه مختلف شامل 9 آنگستروم، 11 آنگستروم، 41 آنگستروم و کلینوتوبرموریت می‌باشد. در این بین بیشترین شباهت در زمینه خواص مکانیکی در توبرموریت 41 آنگستروم مشاهده شده است [3]. این نوع از توبرموریت بیشتر از سایر گونه‌ها، هیدراته شده است. با توجه به بیشترین شباهت اثبات شده بین این ماده و ژل کلسیم سیلیکات هیدراته موجود در محصولات خمیر سیمان، در این مطالعه از این ماده جهت بررسی خواص مکانیکی کلسیم سیلیکات هیدراته استفاده شده

و پیچیده می‌شود که شناخت خواص آن نیاز به مطالعات وسیع دارد. در سال‌های اخیر تحقیقات وسیعی بر روی محصولات هیدراتاسیون انجام گرفته است. با توجه به محدودیت‌های آزمایشگاهی شناخت ریز ساختار خمیر سیمان به خصوص در بعد نانو، استفاده از روش‌های شبیه‌سازی در سال‌های اخیر مورد توجه بیشتری قرار گرفته است [2]. مطالعه نانو ساختار محصولات خمیر سیمان هیدراته با بررسی نقص‌ها و ماهیت ماده به بهبود خواص در بعد ماکرو کمک می‌کند.

یکی از روش‌های مطالعه مواد در بعد نانو و شناخت ساختار اتمی مواد استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی<sup>1</sup> است. نتایج مطالعات نشان داده است که روش دینامیک مولکولی روش مناسبی برای شبیه‌سازی ترکیبات مختلف است و در زمینه خواص مکانیکی نتایج مطلوبی را ارائه داده است. این روش اخیراً در مطالعات مربوط به محصولات پایه سیمانی نیز مورد استفاده قرار گرفته است و نتایج مناسبی داشته است. ولی با توجه به جدید بودن این حوزه از پژوهش هنوز نتایج این روش شبیه‌سازی به همگرایی مناسبی برای محصولات پایه سیمانی نرسیده است و تلاش برای شبیه‌سازی‌های بهینه‌تر و کسب نتایج بهتر ادامه دارد.

جامعترین مطالعه در زمینه استفاده از روش دینامیک مولکولی محصولات هیدراتاسیون در پایان‌نامه‌ای توسط مانزانو مورد توجه قرار گرفته است [3] در این مطالعه اکثر محصولات هیدراتاسیون و همچنین فازهای سیمان شبیه‌سازی شده و خواص مختلف آن مورد بررسی قرار گرفتند. شبیه‌سازی توبرموریت<sup>2</sup> 11 و 41 آنگستروم به روش دینامیک مولکولی نیز در مطالعه دیگری مورد توجه قرار گرفته است [4]. نتایج این مطالعه نشان داده است که استفاده از روش دینامیک مولکولی برای محصولات هیدراتاسیون می‌تواند مناسب باشد. استفاده از روش نظریه تابع چگالی<sup>3</sup> جهت ارتقا میدان نیروی<sup>4</sup> استفاده شده و همچنین شبیه‌سازی با این روش جهت تخمین خواص مکانیکی نیز در مطالعه‌ای بررسی شده است [5]. در این مطالعه یک میدان نیروی جدید جهت شبیه‌سازی ژل کلسیم سیلیکات هیدراته<sup>5</sup> معرفی شده است. محققان دیگری نیز خواص برخی از محصولات خمیر سیمان هیدراته و همچنین فازهای تشکیل دهنده سیمان را در مطالعاتی به روش دینامیک مولکولی بررسی نمودند [6,7]. استفاده از روش‌های دیگر شبیه‌سازی و مدل‌سازی عددی در مقیاس‌های مختلف مطالعاتی نیز در سال‌های اخیر مورد بررسی قرار گرفته است [8,2,10].

با توجه به اینکه در تحقیقات صورت گرفته تاکنون کلیه محصولات خمیر سیمان هیدراته به صورت همزمان مورد بررسی قرار نگرفته‌اند و همچنین با توجه به لزوم انتخاب میدان نیروی مناسب برای تخمین خواص مکانیکی خمیر سیمان و توجه به این موضوع که در مطالعات گذشته همگرایی در زمینه میدان نیرو، لزوم بررسی دقیق‌تر خواص الاستیک این مواد احساس می‌شود. از سوی دیگر همگرایی نتایج در مطالعات قبل با توجه به جدید بودن موضوع به حد مناسبی نرسیده و نیاز به کار بیشتر جهت تعیین خواص محصولات هیدراتاسیون سیمان است. همچنین نگاه جامعی در مطالعات گذشته در زمینه بتن و خمیر سیمان سخت شده و بررسی میکرومکانیکی این ماده وجود نداشته است. در مطالعه حاضر ساختار پنج محصول اصلی خمیر سیمان مورد بررسی قرار خواهد گرفت. برای این منظور

<sup>6</sup> Matrix

<sup>7</sup> Inclusion

<sup>8</sup> Calcium hydroxide

<sup>9</sup> Ettringite

<sup>10</sup> Hydrogarnet

<sup>11</sup> monosulphoaluminate

<sup>12</sup> C<sub>2</sub>S

<sup>13</sup> C<sub>3</sub>S

<sup>1</sup> Molecular dynamics

<sup>2</sup> Tobermorite

<sup>3</sup> Density Function Theory (DFT)

<sup>4</sup> Force Field

<sup>5</sup> Calcium silicate hydrate (C-S-H)

محصولات دیگر همچون منوسولفوالومینات  $(Ca_3Al_2(OH)_{12})$  و هیدروگارت  $([Ca_2Al(OH)_6]^+ \cdot [0.5SO_4 \cdot 3H_2O])$  نیز مقادیر کمی از محصولات هیدراتاسیون را تشکیل می‌دهند و اثر زیادی بر خواص نهایی بتن ندارند. این مواد دارای ساختار کریستالی منظم می‌باشند [3]. هیدروگارت در شکل 4 و منوسولفوالومینات در شکل 5 نشان داده شده است.

### 3-روش‌شناسی، مدل‌سازی، شبیه‌سازی و حل مسأله

روش دینامیک مولکولی یکی از روش‌های قدرتمند در شبیه‌سازی مواد و ساختارهای مختلف می‌باشد. پیش‌بینی خواص مکانیکی مواد یکی از توانایی‌های این روش است که با دقت مناسبی انجام می‌گیرد. مبنای اصلی این روش حل معادلات نیوتن با لحاظ پتانسیل بر هم‌کنش بین مولکول‌ها و عوامل مؤثر خارجی می‌باشد. روند کلی این روش به این صورت است که قبل از شروع، مکان و سرعت اتم‌ها تعیین می‌گردد و سپس با استفاده از توابع پتانسیل و انتگرال‌گیری از معادلات حرکت، مکان و سرعت جدید ذرات محاسبه می‌شود. سپس این حلقه تکرار شده تا سیستم به تعادل برسد. پس از انجام شبیه‌سازی با استفاده از تحلیل‌های مکانیک آماری خواص مختلف ماده قابل استخراج است [14-16].

یکی از مهمترین مشخصات در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انتخاب توابع پتانسیل و میدان نیروی مناسب می‌باشد. میدان‌های نیرو می‌توانند باعث تغییر شدید در نتایج شوند. در زمینه مواد با پایه‌ی سیمانی میدان‌های نیروی زیادی استفاده شده است. یکی از میدان‌های نیرویی که اخیراً در برخی از مطالعات استفاده شده و نتیجه خوبی نیز از آن گرفته شده است میدان نیروی کامپس<sup>1</sup> می‌باشد. این میدان نیرو، یک میدان نیرو آب اینیشیو می‌باشد که به صورت گسترده در شبیه‌سازی مایعات، فاز جامد، پلیمرها و کریستال‌ها به کار گرفته می‌شود. به علت وجود عبارت‌های پیچیده متقابل

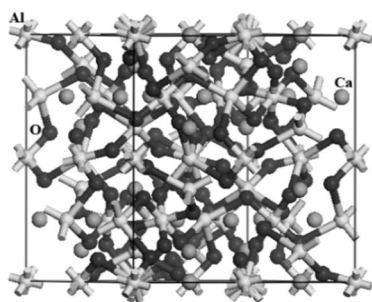


Fig. 4 Atomistic structure of hydrogarnet

شکل 4 ساختار اتمی هیدروگارت

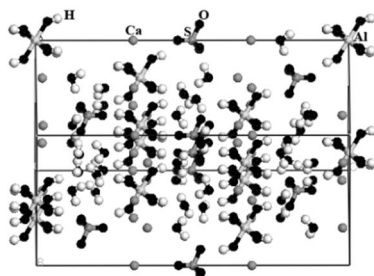


Fig. 5 Atomistic structure of monosulphoaluminate

شکل 5 ساختار اتمی منوسولفوالومینات

است. شکل 1 ساختار کریستالی توپرموریت 41 آنگستروم را نشان داده است. دومین محصول از نظر اهمیت هیدروکسید کلسیم  $(Ca(OH)_2)$  می‌باشد. نام‌گذاری معدنی این ماده پرتلندایت می‌باشد. این ماده به صورت کریستالی بوده و از نظر مقاومتی تقریباً ضعیف می‌باشد. شکل پرتلندایت در بعد میکرو به صورت صفحه‌ای است. تقریباً حدود 20 تا 52 درصد از خمیر سیمان را این محصول تشکیل می‌دهد. با توجه به حجم اشغالی تأثیر زیادی بر خواص خمیر سیمان هیدراته دارد [12]. ساختار اتمی این محصول به صورت کریستالی منظم بوده که در آن اتم‌های کلسیم در کناره‌های شبکه کریستالی قرار می‌گیرند و در میان سولول ترکیب HO وجود دارد. ساختار اتمی این ماده در شکل 2 نشان داده شده است.

سومین محصول تشکیل شده در خمیر سیمان اترینگایت  $(Ca_6[Al(OH)_6]_2(SO_4)_3 \cdot 24H_2O)$  می‌باشد. این ماده در اثر واکنش گچ موجود در سیمان با آب تشکیل می‌شود. این ماده در بعد میکرو به صورت سوزنی می‌باشد و مقاومت کمی دارد [13]. مقدار اندک از این ماده در محصولات هیدراتاسیون تا حدودی مفید است ولی در صورت ازدیاد این ماده در محصولات به علت این که تشکیل این ماده با افزایش حجم همراه است، ممکن است باعث ایجاد مشکلاتی در خمیر سخت شده گردد. ساختار اتمی این ماده کاملاً شناسایی شده است و به صورت کریستالی می‌باشد. شکل 3 ساختار اتمی این ماده را نشان داده است.

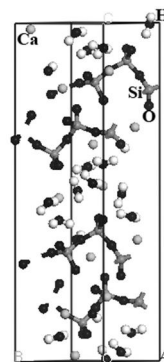


Fig. 1 Atomistic structure of tobermorite 14 Å

شکل 1 ساختار اتمی توپرموریت 14 آنگستروم

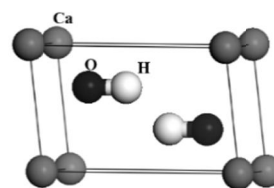


Fig. 2 Atomistic structure of Calcium hydroxide

شکل 2 ساختار اتمی هیدروکسید کلسیم

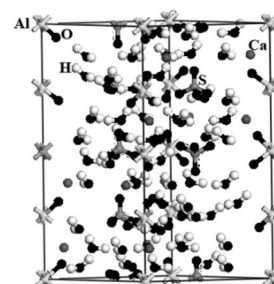


Fig. 3 Atomistic structure of Ettringite

شکل 3 ساختار اتمی اترینگایت

<sup>1</sup> COMPASS

میدان نیروی اینترفیس<sup>3</sup> اخیرا توسعه داده شده است. این میدان نیرو بر اساس میدان نیروی پی-سی-اف-اف بوده که جهت شبیه‌سازی برخی از مواد از جمله برخی از محصولات هیدراتاسیون توسعه داده شده و دارای دقت مناسبی برای استفاده در این مواد است. توسعه‌دهندگان این میدان نیرو استفاده از این میدان نیرو را برای توبرموریت، اترینگایت و منوسولفوالومینات توصیه کرده‌اند؛ همچنین قبلا از این میدان نیرو در مواد پایه سیمانی برای شبیه‌سازی فازهای سیمان استفاده شده است [20]؛ از این روی برای اولین بار از این میدان نیرو در مواد ذکر شده استفاده خواهد شد و نتایج آن مورد ارزیابی قرار خواهد گرفت.

در این مطالعه در نهایت پنج میدان نیروی ذکر شده جهت شبیه‌سازی استفاده شده است.

برای شبیه‌سازی مواد ابتدا ساختار این مواد آماده شده و شبکه اتمی اولیه برای انجام فرایند شبیه‌سازی مورد بررسی قرار گرفته است. پارامترهای شبکه کریستال‌های مورد بررسی در جدول 1 آورده شده است.

قبل از شروع شبیه‌سازی لازم است که ساختار مورد نظر از نظر ابعادی بهینه شود<sup>4</sup>. بهینه کردن ساختار کریستالی و حداقل سازی انرژی توسط روش اسمارت<sup>5</sup> که ترکیبی از روش‌های حداقل سازی نیوتن-رافسون<sup>6</sup>، روش شیب کاهشی<sup>7</sup> و روش گرادین<sup>8</sup> است انجام گرفته است. پس از حداقل سازی ساختار، فرایند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بر روی ساختارها انجام گرفته است. شرایط مرزی تناوبی در هر سه جهت بر ساختارها اعمال شده است. برای انتگرال‌گیری از معادلات دینامیک مولکولی در زمان از الگوریتم ورتل سرعتی استفاده شده است. لازم به ذکر است که کلیه شبیه‌سازی‌ها در این مطالعه در محیط برنامه مترپال استدیو انجام گرفته است.

پارامترهای فرض شده جهت شبیه‌سازی در جدول 2 آورده شده است. پس از انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، خواص الاستیک ماده توسط روابط الاستیسیته محاسبه می‌شود. برای این منظور ساختارهای شبیه‌سازی شده توسط الگوهای مختلف کرنشی در گام‌های مختلف اعمال شده و نهایتا ماتریس‌های 6x6 سختی و نرمی بدست می‌آید. در محاسبه خواص الاستیک مواد جهت اطمینان از تغییر شکل خطی مواد حداکثر کرنش در محدوده 0.003 نگه داشته شده است. در پایان ضریب سختی الاستیک  $C_{ijkl}$  در دمای ثابت T توسط رابطه (1) به تنش  $\sigma_{ij}$  و کرنش  $\epsilon_{ij}$  مربوط می‌شود [3].

جدول 1 پارامترهای شبکه محصولات سیمان هیدراته

Table 1 Crystallographic lattice parameters of hydrated cement compounds

نام ترکیب	$a$ (Å)	$b$ (Å)	$c$ (Å)	$\alpha$ (°)	$\beta$ (°)	$\gamma$ (°)
توبرموریت	6.73	7.42	27.98	90	90	123.25
پرتلندایت	3.59	3.59	4.90	90	90	120
اترینگایت	11.26	11.26	21.48	90	90	120
هیدروگارت	12.37	12.37	12.37	90	90	90
منوسولفوآلومینات	11.51	11.51	26.79	90	90	120

جفتی در توابع پتانسیل این میدان نیرو، کامپس به عنوان یک میدان نیروی منحصر به فرد شناخته می‌شود. فرایند تعیین پارامتر این میدان نیرو از دو بخش اب اینیشیو و آزمایشگاهی تشکیل شده است. در بخش اول شارژها و پارامترهای والانس مورد توجه قرار گرفته و در بخش دوم صحت‌یابی با داده‌های آزمایشگاهی مد نظر بوده است. در این میدان نیرو جهت بیان اندرکنش‌های واندروالس از پتانسیل لنارد-جونز 6-9 و برای بیان اندرکنش‌های الکترواستاتیکی از قانون کلمب استفاده شده است. مطابق با لیست مولکول‌ها و اندرکنش‌هایی که برای این میدان نیرو ارائه شده است به نظر می‌رسد که محدودیتی برای استفاده از این میدان نیرو برای مواد موجود در این مطالعه وجود ندارد؛ از طرفی نتایج قبل نشان داده است که این میدان نیرو برای مواد با پایه سیمانی مناسب است [17,7,6]. این میدان نیرو دارای دو نسخه کامپس و کامپس II می‌باشد. کامپس II در واقع یک نسخه توسعه یافته برای کامپس می‌باشد. در این نسخه تعداد اتم‌های قابل پوشش افزایش یافته و از سوی دیگر عبارات میدان نیرو نیز افزایش قابل توجهی داشته است. از این میدان نیرو نیز در اکثر مواردی که کامپس مناسب است می‌توان استفاده نمود. این خانواده میدان نیرو توانایی شبیه‌سازی دامنه وسیعی از مولکول‌ها را داشته و توانایی پیش‌بینی خواص مختلف فیزیکی و مکانیکی مواد را تحت شرایط مختلف دمایی و فشاری دارند. با توجه به ویژگی‌های این خانواده میدان نیرو و استفاده از آن‌ها در مطالعات قبل از این میدان نیرو در این مطالعه استفاده شده است.

میدان نیروی دیگری که در این مطالعه استفاده شده است یونیورسال<sup>1</sup> می‌باشد. این میدان نیرو یک میدان نیروی کاملا قطری و هارمونیک است. کشش پیوندها توسط عبارات هارمونیک، خم‌شدگی زاویه‌های چرخش و پیچش توسط عبارات فوریه کسینوسی بیان شده است. در این میدان نیرو اندرکنش‌های واندروالس توسط تابع پتانسیل لنارد-جونز و اندرکنش‌های الکترواستاتیکی توسط قانون کلمب توضیح داده شده است. این میدان نیرو کلیه اتم‌های جدول تناوبی را پوشش می‌دهد و از این جهت دارای برتری نسبت به میدان‌های نیروی دیگر است [18]. با توجه به این موضوع این میدان نیرو برای شبیه‌سازی اکثر مواد همواره توصیه شده است.

با توجه به پوشش کامل جدول تناوبی و استفاده موفق این میدان نیرو در برخی مطالعات مواد پایه سیمانی [7,6] در این مطالعه این میدان نیرو جهت ارزیابی و مقایسه انتخاب شده است.

میدان نیروی دریدینگ<sup>2</sup> یک میدان نیروی کاملا قطری به همراه عبارات والانس هارمونیک و عبارت فوریه کسینوسی برای پیچش است. اندرکنش‌های واندروالس در این میدان نیرو توسط تابع پتانسیل لنارد-جونز و اندرکنش‌های الکترواستاتیکی توسط قانون کلمب توضیح داده شده است. پیوند هیدروژنی در این میدان نیرو توسط تابع پتانسیل لنارد-جونز 10-12 بیان شده است. ثابت و پارامترهای هندسی این میدان نیرو بر اساس روش پیوندی می‌باشد. از این میدان نیرو نیز در برخی از کارها برای مواد سیمانی استفاده شده است [19] و به همین منظور در اینجا نیز مورد استفاده قرار خواهد گرفت.

این میدان نیرو به همراه یونیورسال به نسبت کامپس دارای سرعت محاسباتی بیشتری می‌باشند. سرعت در محاسبات دینامیک مولکولی از اهمیت زیادی برخوردار است به همین جهت این دو میدان نیرو می‌تواند در این زمینه دارای برتری باشند.

<sup>1</sup> Universal

<sup>2</sup> Dreiding

<sup>3</sup> INTERFACE

<sup>4</sup> Geometry optimization

<sup>5</sup> Smart

<sup>6</sup> Newton-Raphson

<sup>7</sup> Steepest descent

<sup>8</sup> Conjugate gradient

آمده برای خواص الاستیک محصولات هیدراتاسیون سیمان سخت شده شامل مدول حجمی ( $K$ )، مدول برشی ( $G$ )، مدول یانگ ( $E$ ) و ضریب پواسون ( $\nu$ ) در جداول 3 تا 7 نشان داده شده است. مطالعات انجام گرفته قبلی بر روی مواد جهت مقایسه و تأیید نتایج استفاده شده است [30-21, 7, 5, 3]. مطالعات قبلی با استفاده از روش‌های مختلف از جمله نظریه تابعی چگالی، دینامیک مولکولی و کارهای آزمایشگاهی می‌باشند.

به عنوان نمونه ماتریس‌های سختی و نرمی محاسبه شده برای توپرموریت 14 آنگستروم با استفاده از میدان نیروی کامپس در روابط 10 و 11 آورده شده است. لازم به ذکر است که برای هر کدام از مواد و هر کدام از میدان‌های نیرویی چنین ماتریس‌هایی محاسبه شده و سپس توسط روابط (2) تا (9) مقادیر خواص الاستیک مواد با اطلاعات ماتریس‌ها محاسبه شده و در جداول درج شده است.

$C_{ij}$  (GPa) =

$$\begin{bmatrix} 58.57 & 34.94 & 33.55 & 3.95 & -4.30 & 7.25 \\ 34.94 & 81.24 & 33.31 & 2.80 & 2.62 & 6.89 \\ 33.55 & 33.31 & 62.68 & 2.47 & -2.1 & -2.5 \\ 3.95 & 2.80 & 2.47 & 22.72 & -2.79 & -9.2 \\ -4.30 & 2.62 & -0.21 & -2.79 & 21.15 & -1.17 \\ 7.25 & 6.89 & -2.5 & -9.2 & -1.17 & 21.08 \end{bmatrix} \quad (10)$$

$S_{ij}$  (1/TPa) =

$$\begin{bmatrix} 29.96 & -7.40 & -12.01 & -2.56 & 6.12 & -7.80 \\ -7.40 & 18.35 & -5.78 & -1.01 & -4.18 & -3.8 \\ -12.01 & -5.78 & 25.46 & 0.15 & -1.10 & 6.28 \\ -2.56 & -1.01 & 0.15 & 45.42 & 5.79 & 3.53 \\ 6.12 & -4.18 & -1.10 & 5.79 & 49.90 & 2.28 \\ -7.80 & -3.80 & 6.28 & 3.53 & 2.28 & 51.71 \end{bmatrix} \quad (11)$$

جدول 3 خواص مکانیکی توپرموریت 14 آنگستروم

Table 3 Mechanical properties of Tobermorite 14Å

میدان نیرو	مدول حجمی، گیگاپاسکال	مدول برشی، گیگاپاسکال	مدول یانگ، گیگاپاسکال	ضریب پواسون
کامپس	43.93	18.81	49.38	0.31
کامپس II	38.86	17.99	46.75	0.30
اینترفیس	46.53	28.89	71.80	0.24
یونیورسال	46.89	15.33	41.47	0.35
دریدینگ	68.09	23.13	62.33	0.34
سایر	56.42 <sup>a</sup> , 44.80 <sup>b</sup>	31.65 <sup>a</sup>	80.00 <sup>a</sup>	0.26 <sup>a</sup>
مراجع	47±4 <sup>c</sup> , 35.91 <sup>d</sup> , 20.7-35.4 <sup>e</sup> , 38.6 <sup>f</sup> , 52.89 <sup>g</sup>	19.00 <sup>b</sup> , 19.0 <sup>c</sup> , 20.61 <sup>d</sup> , 2.78-	49.94 <sup>b</sup> , 51.90 <sup>d</sup>	0.31 <sup>b</sup> , 0.25-
		5.08 <sup>e</sup> , 22.5 <sup>f</sup> , 18.55 <sup>g</sup>	63.5 <sup>e</sup> , 56.5 <sup>f</sup> , 49.82 <sup>g</sup>	0.26 <sup>e</sup> , 0.34 <sup>g</sup>

a [21], b. [3], c. [22], d. [5], e. [23], f. [24], g. [7]

جدول 4 خواص مکانیکی پرتلندایت

Table 4 Mechanical properties of Portlandite

میدان نیرو	مدول حجمی، گیگاپاسکال	مدول برشی، گیگاپاسکال	مدول یانگ، گیگاپاسکال	ضریب پواسون
کامپس	137.98	27.97	78.59	0.40
کامپس II	35.66	20.15	50.86	0.26
یونیورسال	9.1	5.72	14.18	0.22
دریدینگ	8.55	5.72	14.03	0.22
سایر	31.1 <sup>a</sup> , 31.6 ±	13.4 <sup>a</sup>	35.2 <sup>a</sup> , 51.4	0.31 <sup>a</sup>
مراجع	0.3 <sup>b</sup> , 31.54 <sup>d</sup> , 39.65 <sup>e</sup>	20.9 ±	± 0.9 <sup>b</sup> , 40.3 <sup>c</sup> , 39.77-	0.23 ±
		18.3 <sup>d</sup>	44.22 <sup>e</sup> , 48 <sup>f</sup> , 35.2 <sup>g</sup>	0.01 <sup>b</sup> , 0.305-
		16.36 <sup>e</sup>		0.325 <sup>e</sup>

a. [3], b. [25], c. [26], d. [27], e. [28]. f. [7], g. [29]

جدول 2 شرایط به کار گرفته شده در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

Table 2 Molecular dynamics simulation condition

پارامتر	شرایط در این مطالعه
انسمبل	NPT
ترموستات	نوز <sup>1</sup>
دما (کلوین)	298 (دمای اتاق)
باروستات	برندنس <sup>2</sup>
فشار (گیگا پاسکال)	0.0001 (فشار جو)
گام زمان (فمتو ثانیه)	1
زمان شبیه‌سازی (پیکوثانیه)	100-300
روش جمع نیروهای واندروالس و الکترواستاتیک	اوالد <sup>3</sup>

$$C_{ijkl} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \epsilon_{kl}} \Big|_{T, \epsilon_{kl}} = \frac{1}{V_0} \frac{\partial^2 A}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}} \Big|_{T, \epsilon_{ij}, \epsilon_{kl}} \quad (1)$$

در این رابطه  $V_0$  حجم شبکه کریستالی در حالت تغییر شکل نیافته و  $A$  ثابت انرژی آزاد هلمولتز می‌باشد.

با محاسبه دو ثابت الاستیک مدول برش ( $G$ ) و مدول حجمی ( $K$ ) می‌توان سایر خواص الاستیک ماده را نیز محاسبه کرد. برای محاسبه این دو مقدار از روش‌های تقریب رئوس<sup>4</sup> و ویت<sup>5</sup> استفاده شده است. روابط (2) تا (5) رابطه بین ماتریس سختی و خواص الاستیک ماده را بیان کرده است. در این روابط اندیس‌های  $R$  و  $V$  به ترتیب نشان دهنده روش‌های رئوس و ویت می‌باشند. همچنین نشان دهنده درایه‌های ماتریس نرمی است [3].

$$G_V = \frac{1}{15} [C_{11} + C_{22} + C_{33} + 3(C_{44} + C_{55} + C_{66}) - (C_{12} + C_{13} + C_{23})] \quad (2)$$

$$G_R = 15 [4(S_{11} + S_{22} + S_{33} - S_{12} - S_{13} - S_{23}) + 3(S_{44} + S_{55} + S_{66})]^{-1} \quad (3)$$

$$K_V = \frac{1}{9} [C_{11} + C_{33} + 2(C_{12} + C_{13} + C_{23})] \quad (4)$$

$$K_R = [S_{11} + S_{22} + S_{33} + 2(S_{12} + S_{13} + S_{23})]^{-1} \quad (5)$$

با توجه به اینکه متد رئوس و ویت دامنه بالا و پایین ثابت‌های الاستیک را گزارش می‌کنند و با توجه به فاصله زیاد این دو مقدار روش هیل<sup>6</sup> برای گزارش مقادیر میانگین این دو عدد پیشنهاد شده است. در این پژوهش نیز عدد نهایی گزارش شده توسط تقریب ویت-رئوس-هیل<sup>7</sup> گزارش شده است. روابط (6) و (7) این تقریب را نشان می‌دهند [3].

$$K_{VRH} = \frac{K_V + K_R}{2} \quad (6)$$

$$G_{VRH} = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (7)$$

بعد از محاسبه مقادیر میانگین مدول برشی و مدول حجمی مواد، مقادیر میانگین مدول الاستیسیته ( $E$ ) و ضریب پواسون ( $\nu$ ) با استفاده از روابط (8) و (9) محاسبه می‌شوند [3].

$$E = \frac{9G}{3 + G/K} \quad (8)$$

$$\nu = \frac{3 - 2G/K}{6 + 2G/K} \quad (9)$$

#### 4- نتایج و بحث

پس از انجام شبیه‌سازی و استفاده از روابط ذکر شده در بخش 3 نتایج بدست

<sup>1</sup> Nose  
<sup>2</sup> Berendsen  
<sup>3</sup> Ewald  
<sup>4</sup> Reuss  
<sup>5</sup> Vogit  
<sup>6</sup> Hill  
<sup>7</sup> VRH

می‌شود. مطالعات نشان داده است که ژل کلسیم سیلیکات هیدراته دارای دو نوع کم تراکم و متراکم است. برای حالت کم تراکم آن حدوداً 35 درصد تخلخل و برای حالت متراکم آن حدود 25 درصد تخلخل در نظر گرفته می‌شود [31,26]. مدل‌های همگن‌سازی مختلفی برای همگن‌سازی مواد دارای ریز ساختار غیر همگن و متخلخل در علم میکرومکانیک تعریف شده است. از جمله می‌توان به مدل‌های موری - تاناکا<sup>1</sup> و روش خود سازگار<sup>2</sup> اشاره نمود. در این مطالعه جهت همگن‌سازی توپرموریت با تخلخل‌های گفته شده در دو حالت کم تراکم و متراکم از روش موری-تاناکا استفاده شده است [32]. در این روش برای بدست آوردن خواص الاستیک ماده جامد به عنوان ماتریس و تخلخل به صورت اینکلوزن در نظر گرفته می‌شود. این مدل برای کامپوزیت‌ها با اینکلوزن‌های بیضوی تصادفی گسترش داده شده است. برای بدست آوردن خواص نهایی ژل کلسیم سیلیکات هیدراته از روابط (12) و (13) استفاده می‌شود.

$$K_{CSH} = K_{solid} \frac{4G_{solid}(1-\phi)}{3K_{solid}\phi + 4G_{solid}} \quad (12)$$

$$G_{CSH} = G_{solid} \frac{6\phi(2G_{solid} + K_{solid}) + 8G_{solid} + 9K_{solid}}{6\phi(2G_{solid} + K_{solid}) + 8G_{solid} + 9K_{solid}} \quad (13)$$

در این روابط  $\phi$  نشان دهنده درصد تخلخل است و  $G_{solid}$  و  $K_{solid}$  مقادیر مربوط به ماده جامد خالص بدست آمده، که در اینجا خواص مربوط به توپرموریت است، می‌باشند. پس از محاسبه مقادیر مدول برشی و مدول حجمی ژل کلسیم سیلیکات هیدراته، با استفاده از روابط (8) و (9) مقادیر مدول یانگ و همچنین ضریب پواسون محاسبه می‌شود و مقادیر مدول الاستیسیته بدست آمده با مقادیر آزمایشگاهی مقایسه خواهد شد. با توجه به اینکه در برخی از کارهای آزمایشگاهی از روش نانواپاندنتیشن<sup>3</sup> استفاده شده است [35-33,26] با استفاده از رابطه (14) مدول ایندنتیشن ( $M$ ) محاسبه شده و در مقایسه‌ها استفاده می‌گردد. نتایج مربوط در جدول 8 نشان داده شده است.

$$M = \frac{E}{(1-\nu^2)} \quad (14)$$

همان‌طور که از جدول 8 مشاهده می‌شود، نتایج همخوانی مناسبی با نتایج آزمایشگاهی ژل کلسیم سیلیکات هیدراته داشته و با دقت بالایی خواص الاستیک پیش‌بینی شده است. تقریباً همه میدان‌های نیرو به خوبی نتایج مناسبی را ارائه کرده‌اند ولی در این بین کامپس II بیشترین شباهت را با نتایج آزمایشگاهی ارائه داده و میزان اختلاف این میدان نیرو با نتایج آزمایشگاهی قابل اغماض است.

جدول 8 مدول الاستیسیته کلسیم سیلیکات هیدراته

Table 8 Modulus of elasticity of CSH

میدان نیرو	مدول یانگ، گیگاپاسکال		مدول ایندنتیشن، گیگاپاسکال	
	کم تراکم	متراکم	کم تراکم	متراکم
کامپس I	23.75	29.61	25.72	32.22
کامپس II	22.48	28.03	24.21	30.31
اینترفیس	34.52	43.04	36.44	45.44
یونیورسال	19.98	24.90	21.95	27.54
دریدینگ	30.03	37.42	33.00	41.39
آزمایشگاهی	23.4±3.4 <sup>a</sup> , 21.7±2.1 <sup>b</sup> , 22.89 <sup>c</sup>	31.4±2.1 <sup>a</sup> , 29.4±2.4 <sup>b</sup> , 31.16 <sup>c</sup>	17.1-20 <sup>b</sup> , 18.1±4.0 <sup>d</sup>	28.3-30.7 <sup>b</sup> , 31.0±4.0 <sup>d</sup>

a. [33], b. [26], C [34], d [35]

<sup>1</sup> Mori-Tanaka Method (MT)<sup>2</sup> Self-Consistent (SC)<sup>3</sup> Nanoindentation

جدول 5 خواص مکانیکی اترینگایت

Table 5 Mechanical properties of Ettringite

میدان نیرو	مدول حجمی، گیگاپاسکال	مدول برشی، گیگاپاسکال	مدول یانگ، گیگاپاسکال	ضریب پواسون
کامپس I	23.00	10.22	26.70	0.30
اینترفیس	26.01	10.23	27.13	0.32
یونیورسال	15.62	9.67	24.04	0.24
دریدینگ	51.46	24.36	63.12	0.29
سایر مراجع	28.4 <sup>a</sup> , 27.3 ± 0.9 <sup>b</sup>	6.7 <sup>a</sup> , 9.5 ± 0.8 <sup>b</sup>	18.6 <sup>a</sup> , 25.0 ± 2 <sup>b</sup>	0.39 <sup>a</sup> , 0.34 ± 0.02 <sup>b</sup>

a. [3], b. [30]

جدول 6 خواص مکانیکی هیدروگارت

Table 6 Mechanical properties of hydrogarnet

میدان نیرو	مدول حجمی، گیگاپاسکال	مدول برشی، گیگاپاسکال	مدول یانگ، گیگاپاسکال	ضریب پواسون
کامپس I	35.54	18.63	47.57	0.27
کامپس II	30.14	14.17	36.75	0.29
یونیورسال	412.20	269.13	663.79	0.23
دریدینگ	462.67	172.18	459.53	0.33
سایر مراجع	41.2 <sup>a</sup>	21.7 <sup>a</sup>	55.5 <sup>a</sup>	0.35 <sup>a</sup>

a. [3]

جدول 7 خواص مکانیکی منوسولفوآلومینات

Table 7 Mechanical properties of monosulphoaluminate

میدان نیرو	مدول حجمی، گیگاپاسکال	مدول برشی، گیگاپاسکال	مدول یانگ، گیگاپاسکال	ضریب پواسون
کامپس I	43.10	15.65	41.88	0.33
کامپس II	38.68	14.75	39.25	0.33
اینترفیس	22.1	10.07	26.22	0.30
یونیورسال	45.25	17.19	45.77	0.33
دریدینگ	66.68	24.40	65.24	0.33
سایر مراجع	22.8 <sup>a</sup>	11.5 <sup>a</sup>	29.1 <sup>a</sup>	0.27 <sup>a</sup>

[3].a

مقادیر محاسبه شده برای مدول الاستیسیته توپرموریت 14 آنگستروم توسط میدان‌های نیروی مختلف در بازه 41 تا 72 گیگاپاسکال قرار دارد. مطالعات قبلی نیز مقادیری در بازه 49 تا 80 گیگاپاسکال را نشان می‌دهند. نتایج بدست آمده با همه میدان‌های نیرو تقریباً در بازه کارهای انجام شده قبلی قرار دارد. مقادیر بدست آمده توسط نظریه تابعی چگالی در مرجع [21] با عدد بدست آمده از میدان نیروی اینترفیس تقریباً برابر است. همچنین نتایج بدست آمده با خانواده کامپس با مقادیر بدست آمده از روش دینامیک مولکولی در مراجع [3] و [7] و همچنین نظریه تابعی چگالی مرجع [5] تقریباً مشابه است. مدول الاستیسیته بدست آمده از مرجع [23] نیز با میدان نیروی دریدینگ مشابه است. با مقایسه نتایج مدول الاستیسیته با نتایج بدست آمده برای توپرموریت می‌توان نتیجه گرفت که این ماده با اکثر میدان‌های نیرو دارای نتایج مشابهی است.

با توجه به اینکه توپرموریت 14 آنگستروم جهت پیش‌بینی خواص ژل کلسیم سیلیکات هیدراته استفاده می‌شود؛ بنابراین نتایج باید با نتایج مربوط به این محصول معادل‌سازی شوند. ژل کلسیم سیلیکات هیدراته ماده‌ای متخلخل است و با توجه به اینکه توپرموریت 14 آنگستروم شبیه‌سازی شده فاقد تخلخل می‌باشد باید این نقص در مدول الاستیسیته این ماده در نظر گرفته شود. برای این کار از مدل‌های همگن‌سازی برای این ماده استفاده

میدان نیروی مناسب برای هر ماده تعیین شده است. برای ژل کلسیم سیلیکات هیدراته به عنوان مهمترین محصول خمیر سیمان نیز مدل میکرومکانیکی در زمینه تخلخل به کار گرفته شده و در نهایت نتایج شبیه به نتایج آزمایشگاهی منتج شده است. در نهایت نتایج نشان داد که روش دینامیک مولکولی به صورت مناسبی قادر است که خواص مکانیکی محصولات خمیر سیمان هیدراته را پیش‌بینی کند.

### 6- فهرست علائم

A	ثابت انرژی آزاد هلمولتز
$C_{ijkl}$	ضریب سختی الاستیک
E	مدول یانگ
G	مدول برشی
K	مدول حجمی
M	مدول ایندیتیشن
V	حجم شبکه کریستال

### علائم یونانی

$\emptyset$	درصد تخلخل
$\hat{A}$	آنگستروم
$\alpha, \beta, \gamma$	نشانه‌های زاویه
$\varepsilon$	کرنش
$\nu$	ضریب پواسون
$\sigma$	تنش

### زیرنویس‌ها

H	هیل (Hill)
R	رئوس (Reuss)
V	ویت (Vogit)

### 7- مراجع

- [1] A. Heidari, D. Tavakoli, A study of the mechanical properties of ground ceramic powder concrete incorporating nano-SiO<sub>2</sub> particles, *Construction and Building Materials*, Vol. 38, No. 1, pp. 55-264, 2013.
- [2] A. Tarighat, B. Zehtab, D. Tavakoli, An introductory review of simulation methods for the structure of cementitious material hydrates at different length scales, *Pertanika Journal of Science & Technology (JST)*, Vol. 24, No. 1, pp. 27-39, 2016.
- [3] H. Manzano Moro, *Atomistic simulation studies of the cement paste components*, PhD Thesis, Department of Chemical Physics, University of the Basque Country, Basque, 2014.
- [4] S. J. Murray, V. Jankiram Subramani, R. P. Selvam, K. D. Hall, Molecular dynamics to understand the mechanical behavior of cement paste, *Transportation Research Record 2142*, pp. 75-82, 2010.
- [5] R. Shahsavari, R. J. M. Pellenq, F. J. Ulm, Empirical force fields s for complex hydrated calcio-silicate layered materials, *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 13, No. 3, pp. 1002-1011, 2011.
- [6] W. Weidong, A. Al-Ostaz, A. H-D. Cheng, C. R. Song, Computation of elastic properties of Portland cement using molecular dynamics, *Journal of Nanomechanics and Micromechanics*, Vol. 1, No. 2, pp. 84-90, 2011.
- [7] W. Weidong, A. Al-Ostaz, A. H-D. Cheng, C. R. Song, A molecular dynamics and microporomechanics study on the mechanical properties of major constituents of hydrated cement, *Composites Part B: Engineering*, Vol. 41, No. 7, pp. 543-549, 2010.
- [8] J. W. Bullard, Virtual cement and concrete testing laboratory (VCCTL) user guide: Materials and construction research division national institute of standards and technology gaithersburg, Maryland, USA, 2011.
- [9] SH. Bishnoi, *Vector modelling of hydrating cement microstructure*

ساختار سایر محصولات هیدراتاسیون کاملاً شناخته شده بوده و نیاز به مدل‌سازی خاصی جهت تبدیل این محصولات به محصولات اصلی نمی‌باشد. ساختار این محصولات بر خلاف ژل کلسیم سیلیکات هیدراته به صورت کریستالی کامل است.

در جدول 4 نتایج مربوط به هیدروکسید کلسیم آورده شده است. همان‌طور که از نتایج مشاهده می‌شود در مقایسه با ادبیات فنی تنها نتایج مربوط به کامپس II قابل قبول است. نتایج بدست آمده از این میدان نیرو با نتایج آزمایشگاهی در منابع [25] و [7] مشابه است. مدول الاستیسیته بدست آمده از روش دینامیک مولکولی در این روش توسط این میدان نیرو حدود 51 گیگاپاسکال است که با نتایج بدست آمده توسط این دو مطالعه در حدود 5 درصد اختلاف دارد. محدوده مدول الاستیسیته‌ی گزارش شده توسط روش‌های مختلف در مطالعات پیشین بین 35 تا 52 گیگاپاسکال بوده است که نتیجه بدست آمده در مطالعه حاضر نیز در این محدوده قرار دارد.

در مورد اترینگایت نتایج در جدول 5 نشان داده است که به غیر از میدان نیرو در دیدینگ که نتایجی خارج از محدوده گزارش کرده است سه میدان نیروی باقی مانده نتایج نزدیک به هم و مشابه به کار آزمایشگاهی صورت گرفته در منبع [30] ارائه کرده‌اند. نتایج ارائه شده برای مدول الاستیسیته در محدوده 24 تا 27 گیگاپاسکال بوده است که دقیقاً مشابه با نتیجه آزمایشگاهی می‌باشد. نتایج ناشی از روش دینامیک مولکولی در منبع [3] اندکی از نتایج بدست آمده در این مطالعه کمتر است. با توجه به نتایج مشخص است که شبیه‌سازی برای این محصول با روش دینامیک مولکولی با میدان نیروهای مختلف به خوبی انجام گرفته است.

برای هیدروگارتنت نتایج بدست آمده در جدول 6 نشان می‌دهد که میدان نیروی کامپس نتایجی تقریباً مشابه با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام گرفته در منبع [3] ارائه نموده است. نتایج مربوط به دو میدان نیرو یونیورسال و در دیدینگ نشان می‌دهد که این دو میدان نیرو قادر به شبیه‌سازی مناسب این ماده نبوده‌اند.

جدول 7 نشان می‌دهد که اینترفیس بهترین نتیجه را در مقایسه با کار قبلی برای منوسولفوالومینات ارائه نموده است. مدول الاستیسیته بدست آمده برای این ماده برابر با 26.22 گیگاپاسکال بوده است.

در همه موارد ذکر شده خانواده کامپس تقریباً نتایجی مناسب و با خطای اندک گزارش کرده است. همچنین نتایج ارائه شده برای محصولات خمیر سیمان سخت شده در مقایسه با کارهای قبل که با روشهای مختلفی بدست آمده بودند در محدوده بوده و کلیه محصولات به خوبی با روش دینامیک مولکولی شبیه‌سازی شده‌اند.

### 5- نتیجه گیری

در این مطالعه تحقیقاتی به بررسی خواص مکانیکی محصولات خمیر سیمان هیدراته پرداخته شد. برای این کار 5 محصول اصلی خمیر سیمان هیدراته شامل کلسیم سیلیکات هیدراته، هیدروکسید کلسیم، اترینگایت، هیدروگارتنت و منوسولفوالومینات توسط روش دینامیک مولکولی مورد شبیه‌سازی قرار گرفت. شبیه‌سازی انجام گرفته برای این مواد با استفاده از 5 میدان نیروی مختلف انجام شده و سپس با استفاده از روابط الاستیسیته، خواص مکانیکی نهایی مواد استخراج شد و در نهایت با مطالعات قبلی انجام گرفته مقایسه گردید. نتایج بدست آمده برای محصولات اکثراً نزدیک به کارهای آزمایشگاهی و مقادیر اختلاف زیر 10 درصد بوده است. همچنین در این مطالعه در هر مورد میدان‌های نیروی مختلف مورد بررسی قرار گرفته و

- determination of bulk modulus of  $14\text{\AA}$  tobermorite using high pressure synchrotron X-ray diffraction, *Cement and Concrete Research*, Vol. 42, No. 2, pp. 397-403, 2012.
- [23] R.M. Pellenq, N. Lequeux, H. Van Damme, Engineering the bonding scheme in C-S-H: The ionic-covalent framework, *Cement and Concrete Research*, Vol. 38, No. 2, pp. 159-174, 2008.
- [24] I. G. Richardson, G. W. Groves, Models for the composition and structure of calcium silicate hydrate (C-S-H) gel in hardened tricalcium silicate pastes, *Cement and Concrete Research*, Vol. 22, No. 6, pp. 1001-1010, 1992.
- [25] S. Speziale, H. J. Reichmann, F. R. Schilling, H. R. Wenk, P. J. M. Monteiro, Determination of the elastic constants of portlandite by Brillouin spectroscopy, *Cement and Concrete Research*, Vol. 38, No. 10, pp. 1148-1153, 2008.
- [26] G. Constantinides, F. J. Ulm, The nanogranular nature of C-S-H, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 55, No. 1, pp. 64-90, 2007.
- [27] J. L. Laugesen, Density functional calculations of elastic properties of portlandite,  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , *Cement and Concrete Research*, Vol. 35, No. 2, pp. 199-202, 2005.
- [28] P. J. Monteiro, C. T. Chang, The elastic moduli of calcium hydroxide, *Cement and Concrete Research*, Vol. 25, No. 8, pp. 1605-1609, 1995.
- [29] J. J. Beaudoin, Comparison of mechanical properties of compacted calcium hydroxide and Portland cement paste systems, *Cement and Concrete Research*, Vol. 13, No. 3, pp. 319-324, 1983.
- [30] S. Speziale, F. Jiang, Zh. Mao, P. J. M. Monteiro, H-R. Wenk, T. S. Duffy, F. R. Schilling, Single-crystal elastic constants of natural ettringite, *Cement and Concrete Research*, Vol. 38, No. 7, pp. 885-889, 2008.
- [31] M. Vandamme, F. J. Ulm, P. Fonollosa, Nanogranular packing of C-S-H at substoichiometric conditions, *Cement and Concrete Research*, Vol. 40, No. 1, pp. 14-26, 2010.
- [32] T. Mori, K. Tanaka, Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions, *Acta metallurgica*, Vol. 21, No. 5, pp. 571-574, 1973.
- [33] W. Zhu, J. J. Hughes, N. Bicanic, C. J. Pearce, Nanoindentation mapping of mechanical properties of cement paste and natural rocks, *Materials Characterization*, Vol. 58, No. 11, pp. 1189-1198, 2007.
- [34] P. Mondal, S. P. Shah, L. Marks, A reliable technique to determine the local mechanical properties at the nanoscale for cementitious materials, *Cement and Concrete Research*, Vol. 37, No. 10, pp. 1440-1444, 2007.
- [35] H. M. Jennings, J. J. Thomas, J. S. Gevrenov, G. Constantinides, F. J. Ulm, A multi-technique investigation of the nanoporosity of cement paste, *Cement and Concrete Research*, Vol. 37, No. 3, pp. 329-336, 2007.
- and kinetics, PhD Thesis, EPFL university, Switzerland, 2009.
- [10] E. A. B. Koenders, E. Schlangen, K. van Breugel, Multi-scale modeling: The Delft Code, International RILEM symposium on concrete modeling- CONMOD'08, Delft, Netherlands, May 26-28, 2008.
- [11] R. J. Pellenq, A. Kushima, R. Shahsavari, K. J. Van Vliet, M. J. Buehler, S. Yip, F. J. Ulm, A realistic molecular model of cement hydrates. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 106, No. 38, pp. 16102-16107, 2009.
- [12] P. K. Mehta, P. J. M. Monteiro, *Concrete: Microstructure, Properties, and Materials*, pp. 29, New York :McGraw-Hill, , 2006.
- [13] A. E. Moore, H. F. W. Taylor, Crystal structure of ettringite, *Acta Crystallographica Section B: Structural Crystallography and Crystal Chemistry*, Vol. 26, No. 4, pp. 386-393, 1970.
- [14] M. Sahebi, A. Azimian, Molecular dynamics investigation of the mechanisms of thermal creep flow in nanotubes, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 10, pp. 225-232, 2015. (in Persian فارسی)
- [15] B. Damirchi, M. Rismanian, M. S. Saidi, B. Firoozabadi, Coarse grain molecular dynamics simulation of drug carrier penetration into cell membrane, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 15, pp. 316-322, 2015. (in Persian فارسی)
- [16] Y. Bakhshan, A. Shadloo Jahromi, Molecular dynamics simulation of surface specific effects on the nanoscale fluid flow, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 5, pp. 176-184, 2015. (in Persian فارسی)
- [17] H. Sun, COMPASS: an ab initio force-field optimized for condensed-phase applications overview with details on alkane and benzene compounds, *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 102, No. 38, pp. 7338-7364, 1998.
- [18] A. K. Rappé, C. J. Casewit, K. S. Colwell, W. A. Goddard Iii, W. M. Skiff, UFF, a full periodic table force field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations, *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 114, No. 25, pp. 10024-10035, 1992.
- [19] S. L. Mayo, B. D. Olafson, W. A. Goddard, DREIDING: a generic force field for molecular simulations, *Journal of Physical Chemistry*, Vol. 94, No. 26, pp. 8897-8909, 1990.
- [20] R. K. Mishra, R. J. Flatt, H. Heinz, Force field for tricalcium silicate and insight into nanoscale properties: Cleavage, initial hydration, and adsorption of organic molecules, *Journal of Physics and Chemistry*, Vol. 117, No. 20, pp. 10417-10432, 2013.
- [21] C. C. Dharmawardhana, A. Misra, S. Aryal, P. Rulis, W. Y. Ching, Role of interatomic bonding in the mechanical anisotropy and interlayer cohesion of CSH crystals, *Cement and Concrete Research*, Vol. 52, No. 1, pp. 123-130, 2013.
- [22] J. E. Oh, S. M. Clark, H. R. Wenk, P. J. Monteiro, Experimental