

بررسی پلیمر جدید هوشمند توسط پویایی های مولکولی

صادق بیات

کارشناسی ارشد شیمی تجزیه، دانشگاه پیام نور شیراز
sadeq.chemistt@gmail.com

چکیده

ما در این مقاله به بررسی پلیمر جدید هوشمند با استفاده از پویایی مولکولی پرداخته ایم. تا کنون، محققان از نانو مواد پراکنده برای پر کردن منافذ ژلی مواد سیمانی استفاده کردند تا کانال های انتقال مایعات را مسدود کنند. اولتولو و همکاران دریافتند که ساروج پس از افزودن نانو-سیلیکا و نانو-آلومینا در برابر نفوذ بسیار مقاوم است، به این علت که ساختار منفذ بهینه سازی می شود و ناحیه انتقال سطحی بین خمیر سیمان و مصالح دانه ای افزایش می یابد. همچنین، ژانگ و همکاران، تاثیر نانو سیلیکا را بر مقاومت نفوذ کلرید در بتن نشان دادند و بیان کردند که ترکیب نانو لوله هیا کربن حتی موثرتر بود. در حال حاضر، پلیمرهای هوشمند که به شدت قابل کنترل، برگشت پذیر، و پاسخگو به محرک های خارجی هستند، مورد توجه زیادی قرار گرفتند. تنظیمات هوشمند انتقال مایعات را می توان با معرفی پلیمرهای هوشمند، با تکیه بر تحولات ساختاری آنها به علت تغییر در پارامترهای PH، دما، نور یا پتانسیل های ردوکس بدست آورد. ممکن است که برنامه های جامعی در زمینه علم مواد و علم زندگی بوجود آید. پلیمرهای حساس به دما بیشترین استفاده را دارند. پس از اصلاحات پلی (فنیل اتر) یا پلی (اتلین اکسید) در سطح نانوکانال ها، سوئیچ کانال ها توسط کنترل دما قابل تنظیم است. علاوه بر این، ژانگ و همکاران نتیجه گیری کردند که پس از افزودن مونومرهای هفت تایی که به غلظت یون های کلسیم حساس هستند، این نانو کانال ها دارای تخلیص یونی فوق العاده بالا و دریچه یونی منتخب بسیار کارآمد هستند. علاوه بر این، انتقال جریان نیز توسط تغییرات اصطکاک بین سطحی یا فشار خارجی تنظیم می شود.

کلمات کلیدی: پلیمر هوشمند، پویایی های مولکولی، نانو-کانال، انتقال یونی، دوام بتن

۱. مقدمه

انتقال آب و یون ها در سراسر کانال های نانو برای عملکرد کلی مواد متخلخل، بسیار حیاتی است. خوردگی فلزات تقویت شده ناشی از نفوذ کلرید ها در سراسر پوشش بتنی بعنوان مشکل اصلی در مباحث ماندگاری سازه های بتنی تقویت شده در نظر گرفته می شود. هیدراتهای سیلیکات کلسیم (C-S-H)، اصلی ترین محصول هیدراتاسیون سیمان پرتلند معمولی در نظر گرفته می شوند که شامل تعداد زیادی منفذ ژل با چندین نانومتر تا چند صد نانومتر هستند، که مسیر انتقال برای یون های کلرید را فراهم می کنند. برعکس، رفتارهای انتقال و جذب آب و یون ها در آن منافذ برای توسعه قدرت، پایداری حجم و دوام مواد سیمانی، ضروری هستند. بنابراین، کنترل موثر بر انتقال مایعات از طریق آن نانو کانال ها، امری ضروری است.

با این حال، مکانیسم های دقیق نانو-با اثر متقابل هنوز هم به علت مشکل در توصیف تجربی در چنین مقیاس کوچکی ناشناخته باقی می ماند. پویایی های مولکولی (MD)، یک ابزار محاسبه عددی مبتنی بر میدان های نیرو، می تواند دیدگاه های قابل توجهی را در مورد ویژگی های فیزیکی ماتریس جامد، برآمدگی های انتقال مایعات، رفتارهای سازنده مواد الی، و غیره ارائه کند. پویایی های مولکولی به صورت موفقیت آمیزی در مدل سازی و شبیه سازی انتقال مایعات در نانوکانال های مواد سیمانی با معرفی و توسعه میدان های مناسب نیرو بعنوان مثال میدان های نیروی ReaxFF، CSHFF، ClayFF استفاده شده است. یوسف و همکاران پیشنهاد کردند که سطح منافذ نانو به دلیل تاثیر جهت گیری اتم های اکسیژن غیر پیوندی در اتم های هیدروژن مولکول های بین سطحی آب، آب گریز بود. با استفاده از بیش از ۱۵۰ مورد شبیه سازی MD، قمی و همکاران نتیجه گیری کردند که ویژگی های فیزیکی-شیمیایی آب در منافذ ژلی C-S-H بر ترکیب ماتریس متکی است. علاوه بر این، ژائو و همکاران اظهار داشتند که یونهای کلرید زمانی می تواند در سطح C-S-H جذب شوند که در منافذ نانو C-S-H محدود شوند، در حالی که میزان جذب و پایداری جذب به نسبت کلسیم به سیلیکون سطح بستگی دارد. گروه هائو فرایند نفوذ مویرگی محلول های NaCl و Na_2SO_4 را از طریق نانو-کانال های C-S-H توسط شبیه سازی های MD، مورد بررسی قرار دادند، و ویژگی های انتقالی کلرید ها و سولفات ها را مشخص می کنند. علاوه بر این، برهم کنش های بین پلیمرها با گروه های عملکردی مجزا (بعنوان مثال، کربوکسیل، هیدروکسیل، آکیل) و سطح C-S-H نیز توسط پویایی های مولکولی مورد بحث قرار گرفته اند. گروه های کربوکسیل با قطبیت بالا در جذب قوی پلیمرها در C-S-H نقش دارند، در حالی که گروه های آکیل آب گریز توسط گروه های سطحی C-S-H جذب نمی شوند. همانطور که میندس بیان کرد، اندازه معمولی منافذ ژلی در C-S-H از ۰.۵ تا ۱۰ نانومتر است، که با انتقال آب و یون ها از طریق مواد مبتنی بر سیمان بسیار مرتبط است. بنابراین، در این مطالعه، ما در ابتدا یک ساختار پلیمری خاص را با استفاده از شبیه سازی های پویایی های مولکولی طراحی کردیم که می تواند به صورت موثر فرایند نفوذ مویرگی را در یک نانو-کانال با عرض ۶ نانومتر تنظیم کند. پس از آن، این پلیمر بعنوان یک مهارکننده انتقال یونی جدید ساخته می شود و به مخلوط های بتنی اضافه می شود. در نهایت، آزمایشات ماندگاری با مقیاس کلان برای آزمایش تاثیر کاری این مهارکننده انجام می شود.

۲. روش ها

۲/۱. روش های محاسباتی

۲/۱/۱. مدل محاسباتی

برای شبیه سازی فرایند انتقالی آب و یون ها از طریق منافذ ژلی بتن، مدل هیدرات سیلیکات کلسیم، محصول اصلی هیدراتاسیون سیمان معمولی پرتلند، بعنوان ماتریس سیمانی انتخاب می شود. یک منفذ مویرگی با عرض ۶ نانومتر و طول ۹ نانومتر بین دو صفحه سیلیکات کلسیم به دنبال روشها در مرجع همانند قسمت سمت راست شکل ۱ ساخته می شود. قسمت چپ، مایعات حجیم است که از مولکول های

آب، یون های سدیم، و یون های کلرید تشکیل می شود. غلظت Na^+ و Cl^- در شبیه سازی ۰.۵ مول در لیتر است که به حد بالایی در محلول منفذ بتن دریایی نزدیک می شود. تحت تاثیر تنش مویرگی، مایعات از طریق منافذ نانوی C-S-H بعنوان حالت معمول در بتن نفوذ خواهند کرد. همانطور که در بالا ذکر شد، پلیمر با یک گروه کربوکسیل آبدوست در پایان و ۱۲ واحد تکراری گروه های آلکیل آب گریز بعنوان مهار کننده انتقالی ساده سازی می شود. چهار قطعه زنجیره پلیمری در مسیر انتقال در منفذ نانوی C-S-H قرار می گیرند تا تاثیر مهار کننده را بر انتقال مایعات بررسی کنند. لازم به ذکر است که پلیمرها به صورت جداگانه در ناحیه میانی منافذ مویرگی قرار می گیرند، قبل از اینکه مایعات شروع به انتقال کنند، تا از جذب اولیه جلوگیری شود. در مجموع، مدل محاسباتی دارای بیش از ۲۰۰۰۰ اتم است تا اطمینان حاصل شود که نتایج شبیه سازی از نظر آماری قابل اعتماد هستند.

۲/۱/۲. میدان های نیرو و جزئیات شبیه سازی

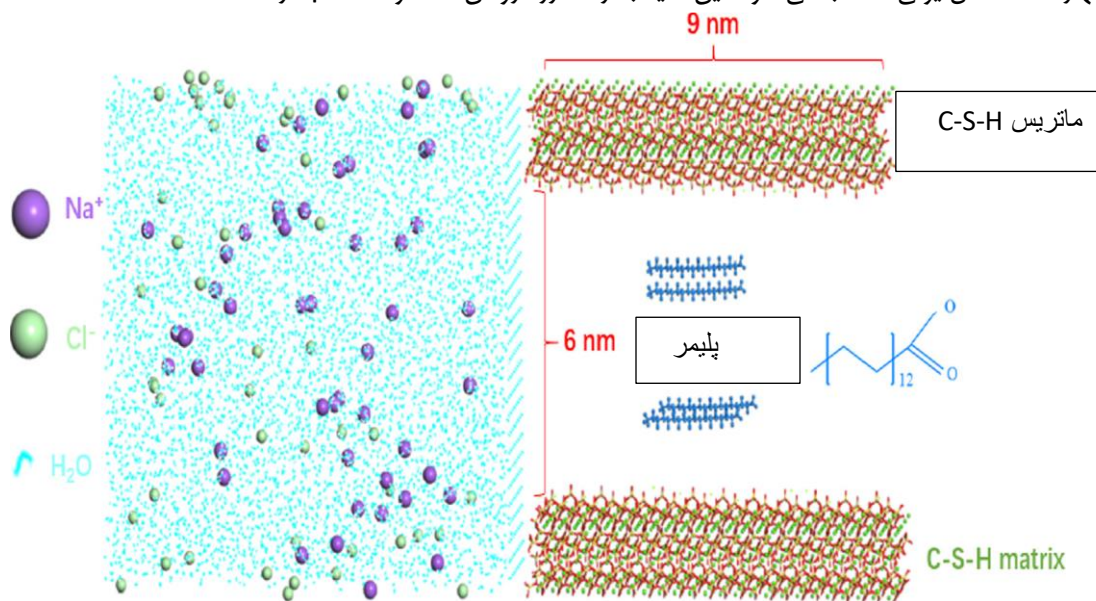
میدان های نیروی CVFF و ClayFF در این تحقیق ترکیب می شوند تا به ترتیب سیستم های معدنی و آلی را ترکیب کنند. میدان نیروی ClayFF استفاده می شود تا برهم کنش بین اتم های o ، si ، ca و H را در ژل C-S-H نشان دهد. برهم کنش های فلزی-اکسیژن توسط یک تابع لنارد-جونز و یک عبارت کولومبی محاسبه می شود. فعل و انفعالات آب، هیدروکسیل، و اکسیژن-اکسیژن در مایعات توسط مدل شارژ تک نقطه ای کلاسیک (SPC) بیان می شوند. میدان نیروی ClayFF در حال حاضر با موفقیت ساختارهای هیدراتهای سیمان، فعل و انفعالات بین گونه های آب و سطح هیدرات، و رفتار آب و گونه های یونی در لایه های درونی هیدرات سیلیکات کلسیم را به دلیل قابلیت اطمینان خوب مدل سازی می کند. از طرف دیگر، میدان نیروی پایدار (CVFF) به صورت گسترده ای در مدل سازی مولکول های آلی، مخصوصا متناسب با اسیدهای کربوکسیلیک کوچک مورد استفاده قرار گرفته است. ساختارها و انرژی های پیوندی، فرکانس های ارتعاشی و انرژی های تطبیقی را می توان به صورت دقیق با استفاده از میدان نیروی CVFF محاسبه کرد. علاوه بر تابع لنارد-جونز و عبارت کولومبی، می توان پتانسیل درون مولکولی بعنوان مثال انرژی تغییر شکل طول های پیوند، زاویه های پیوند، زاویه های چرخش، و فعل و انفعالات خارج از صفحه را تعریف کرد. پارامترهای تعاملی بین اتم های آلی و غیر آلی با توجه به قانون میانگین تعیین می شوند. پارامترهای فاصله با قانون میانگین حسابی محاسبه می شوند، در حالی که پارامترهای انرژی با قانون میانگین هندسی محاسبه می شوند.

این شبیه سازی ها با استفاده از نرم افزار LAMMPS انجام می شود، و شرایط مرزی دوره ای برای تمام جهت های X, Y, Z مدل استفاده می شود. این انرژی برای حذف مختصات اتمی نامناسب به حداقل می رسد و در نتیجه یک روش شبیه سازی MD خاص در مجموعه NVT اجرا می شود. اولاً، یک الگوریتم بدنه سخت برای ثابت کردن ماتریس C-S-H استفاده می شود، در حالی که به صورت همزمان یک دیوار نامرئی بین ورودی حفره ژلی CSH و مایعات قرار می گیرد تا از ترکیب دو سیستم جلوگیری کند. پس از آن، یک شبیه سازی آرام ۲۰۰۰ ps انجام می شود تا یک تعادل ترمودینامیک برای C-S-H/پلیمرها و سیستم فلوئیدها تضمین شود. در نهایت، دیوار رابط در ورودی منفذ ژلی C-S-H حذف می شود، و فرایند نفوذ مایعات در منفذ-نانو برای ۲۰۰۰ ps دیگر شبیه سازی می شود. الگوریتم MD مجموعه کانونی هور در این شبیه سازی استفاده می شود، مرحله زمانی ۰.۰۰۱ ps بود و دما ۲۹۸ کلوین بود. در طول کل فرایند، اطلاعات ترمودینامیکی مانند فشار، دما، و انرژی سیستم برای تایید ثبات سیستم و منطقی بودن مدل بررسی می شود. مسیرها، جابجایی ها و موقعیت های مختصات X, Y, Z تمام اتم ها هر ۰.۱ ps برای ساختار مولکولی، پویایی ها و تحلیل رابط جمع آوری می شوند.

۲/۲. روشهای تجربی

۲/۲/۱. مواد

ماده پیوندی اصلی برای نمونه های بتنی، P.O ۴۲,۵ سیمان پرتلند معمولی از شرکت سیمان کونچ بود، و شدت آن در ۳ روز و ۲۸ روز به ترتیب ۲۷.۲ MPa و ۴۶.۶ MPa بود. علاوه بر این، نرمه خاکستر کلاس II و پودر معدنی کلاس S95 بعنوان ترکیب معدنی استفاده می شوند. سنگدانه ها شامل سنگ ریزی می شود که شن و ماسه رودخانه با ضریب برازش ۲.۴۵ و یک نوع مسیر به صورت مداوم با خرده سنگ بازالت درجه بندی می شود. SBT® PCA-I از شرکت مواد اولیه سوپوت جدید، بعنوان ترکیبات کاهش دهنده آب با نرخ کاهش آب ۲۵٪ و محتوای جامد ۱۸٪ استفاده می شود. یک اسید کربوکسیلیک با ۱۲ واحد تکراری از گروه های متیل و یک گروه کربوکسیل بعنوان پیشروی مهارکننده انتقال یونی انتخاب می شود. این اسید به رنگ زرد روشن است و $pH \approx 9$ دارد.



شکل ۱. تصویر شماتیک مدل محاسباتی (قسمت چپ مایعات را برای انتقال نشان می دهد: خطوط آبی رسمت راست مولکول های آب را نشان می دهد، توپ های سبز سمت راست یون های کلرید را نشان می دهد، توپ های بنفش سدیم را نشان می دهد، قسمت راست منافذ نانوی ماتریس C-S-H را نشان می دهد: توپ های سبز یون های کلسیم را نشان می دهد، چوب های قرمز و زرد چهارضلعی سیلیکات را نشان می دهد، زنجیره های پلیمر به رنگ آبی هستند).

۲/۲/۲. ترکیب و آزمایش

مهارکننده انتقال یونی با توجه به مراحل زیر ترکیب می شود. اولاً، اسید کربوکسیل به حلال آلی متیل بنزن اضافه می شود و مخلوط هم زده می شود تا یکدست شود. پس از آن، محلول آلی از ۵۰-۱۵۰ درجه سانتی گراد گرما داده می شود. سرانجام، این محصول با ترکیب میزان مناسبی از پلی اتر و کاتالیزور با محلول و امکان واکنش برای ۱۰-۱۶ ساعت بدست می آید. چهار گروه از مخلوط های بتنی با استفاده از نسبت ها در جدول ۱ با دوز مهار کننده انتقال یونی با تغییر از ۰ تا ۰.۹٪ تهیه می شوند (نسبت جرم مهار کننده به مواد پیوندی). برای هر گروه، شش نمونه اصلی با اندازه $\Phi 75 \text{ mm} \times 75 \text{ mm}$ برای میزان جذب آب اندازه گیری می شوند، در حالی که سه نمونه اصلی با اندازه $\Phi 100 \text{ mm} \times 50 \text{ mm}$ برای ضرایب مهاجرت کلرید آزمایش می شوند. اندازه گیری های قبلی به BS1881 اشاره می کنند: بخش ۱۲۲:۱۹۸۳ برای بدست آوردن میزان جذب آب بتن در ۰.۵، ۱، ۲، ۴، ۶ و ۱۲ ساعت. ضرایب

مهاجرت کلرید پس از غوطه ور شدن مخلوط های بتنی در یک محلول نمک کلرید برای ۵۶ روز محاسبه می شود و سپس با غلظت کلرید در هر عمق، با توجه به AASHTO T۲۵۹ محاسبه می شود.

۳. نتایج و بحث ها

۳/۱. شبیه سازی پویایی های مولکولی

شبیه سازی های پویایی های مولکولی برای طراحی پلیمرهای هوشمند با یک ساختار شیمیایی مناسب استفاده می شوند تا نفوذ مویرگی در کانال های نانو را تنظیم کنند. در اینجا، به منظور ساده سازی سیستم، هیدرات سیلیکات کلسیم (C-S-H)، محصول اصلی هیدراتاسیون سیمان معمولی پرتلند بعنوان ماتریس بتنی انتخاب می شود، و یک منفذ مویرگی به طول ۶ نانومتر و ۹ نانومتر در C-S-H بعنوان مسیر انتقالی مایعات مدلسازی می شود. پلیمرهای هوشمند در ناحیه میانی کانال های نانو بعنوان مهار کننده های انتقالی قرار می گیرند.

جدول ویژگی های ترکیبی بتن (کیلوگرم بر مترمکعب)

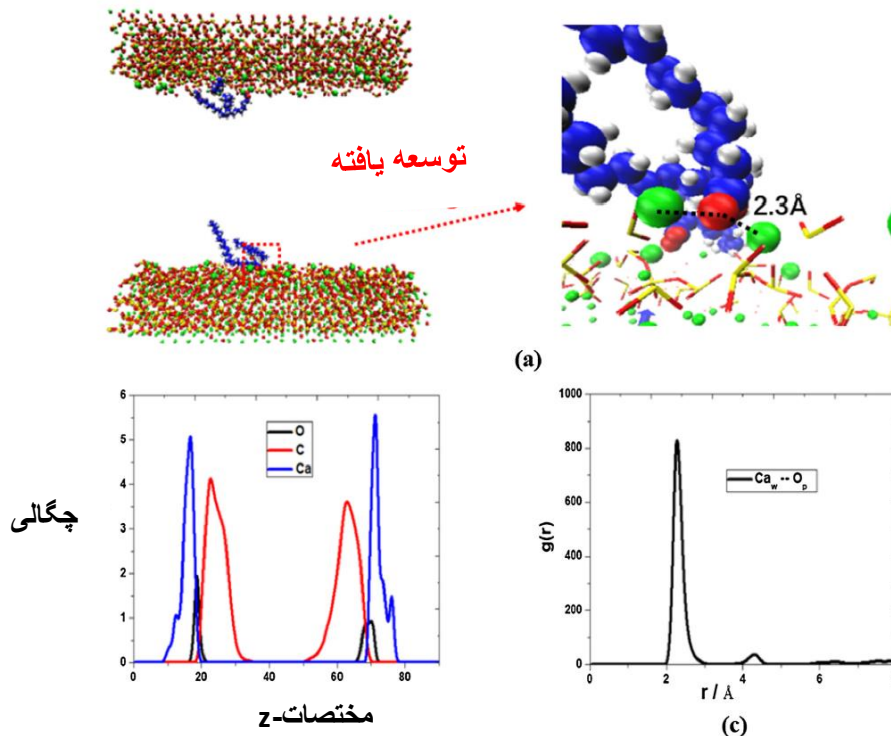
تعداد	سیمان	پودر معدنی	خاکستر سبک	سنگدانه		اب	ترکیبات کاهش دهنده آب	مهارکننده انتقال یونی
				سنگدانه ریز	درشت			
1	210	110	110	732	1098	150	4.8	0
2	210	110	110	732	1098	150	4.8	0.3%
3	210	110	110	732	1098	150	4.8	0.6%
4	210	110	110	732	1098	150	4.8	0.9%

۳/۱/۱. تنظیمات پلیمرها در یک منفذ نانو C-S-H بدون آب

قبل از نفوذ مایعات در منافذ نانو، پلیمرهای مهارکننده انتقالی که در حال حاضر در منفذ نانو C-S-H هستند، تنظیمات قوی جذب را در سطح C-S-H نشان می دهند. همانطور که در شکل ۲a نشان داده شد، زنجیره های پلیمری در مجاورت سطح C-S-H با اتم های اکسیژن از گروه های کارکردی $-\text{COO}^-$ هماهنگ با اتم های کلسیم از سطح C-S-H هستند. شدت توزیع اتم ها کلسیم از C-S-H، اکسیژن و اتم های کربن از پلیمرها در امتداد جهت Z در شکل ۲b نشان داده می شود. همانند ساختار معمولی C-S-H، تعداد زیادی از یون های کلسیم با ایجاد دو تکه قله اصلی کلسیم در سطح بالاتر و پایین تر C-S-H رخ می دهند. قله های اتم های اکسیژن که در نزدیکی قرار می گیرند تقریباً با قله های کلسیم همپوشانی دارند، در حالی که آن اتم های کربن دورتر از ناحیه منفذ نانو ظاهر می شوند. این موضوع نشان می دهد که اتم های اکسیژن نزدیک به سطح C-S-H هستند و به جذب پلیمرها کمک می کنند. تابع توزیع شعاعی نشان داده شده در شکل ۲c، این موضوع را بیشتر اثبات می کند. برای جفت یونهای کلسیم و اتم های اکسیژن، شدت قله زیاد در فاصله حدود 2.3 \AA قرار دارد که بدین معنی است که دو گونه با یکدیگر در آن فاصله هماهنگ می شوند، و جفت های متشکل از یونهای کلسیم و اتم های اکسیژن به طور ثابت در رابط ها وجود دارند. این مورد با عکس های لحظه ای در شکل ۲a مطابقت دارد. مطالعات قبلی نیز این موضوع را از لحاظ تجربی و نظری تایید کرده اند، در آن مطالعات، پلیمرها با گروه های عملکردی با قطبیت بالا $-\text{COO}^-$ می تواند به دلیل تاثیر جذب بین یونهای کلسیم از C-S-H و اتم های اکسیژن از $-\text{COO}^-$ به شدت جذب شود.

۳/۱/۲. فرایند انتقال مایعات

خروجی مایعات حجیم می تواند به علت تاثیر نفوذ مویرگی به صورت خودکار در منافذ ژل نفوذ کند. فرایندهای نفوذ مایعات در منفذ ژل با/بدون مهارکننده های انتقالی در شکل ۳ مقایسه می شود. مایعات متشکل از مولکول های آب، سدیم، و یون های کلرید به تدریج از محلول حجیم به منفذ نانو مهاجرت می کنند زیرا زمان شبیه سازی افزایش می یابد. بدیهی است که مرز پیشرفت مایعات کاملاً عمود بر ماتریس C-S-H نیست. جدای از مایعات حجیم، بخش کوچکی از مولکول های آب به عمق بیشتری نفوذ می کنند که با ایجاد یک مرز قوسی شکل در مجاورت سطح فوقانی و تحتانی قرار دارد. این موضوع نشان می دهد که سطح C-S-H، آبدوست است. شکل مرزی هنگام عملکرد نفوذ بعد از یک نظریه مولکولی-جنبشی واضح تر می شود.



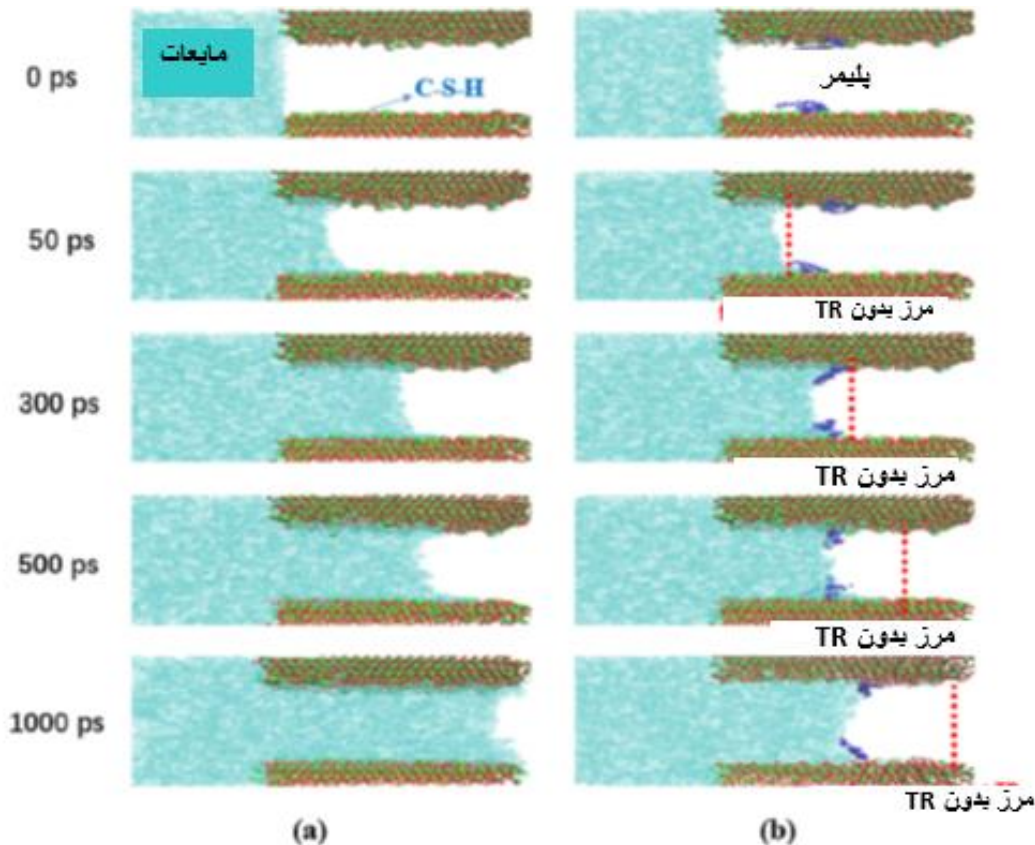
شکل ۲. فعل و انفعالات بین پلیمرها و C-S-H. (a) تصاویر لحظه ای جذب پلیمر در سطح C-S-H (توپ های آبی، قرمز و سفید، اتم های کربن، اکسیژن و هیدروژن پلیمرها، توپ های سبز یون های کلسیم C-S-H را نشان می دهند، چوب های قرمز و زرد تتراهدرا سیلیکات C-S-H را نشان می دهند). (b) توزیع چگالی اکسیژن، اتم های کربن از پلیمرها، و یون های کلسیم از C-S-H در جهت-Z. (c) تابع توزیع شعاعی کلسیم از C-S-H و اکسیژن از گروه های عملکردی پلیمرها.

به منظور مقایسه واضح بین دو فرایند نفوذ (منافذ ژلی بدون مهارکننده های انتقالی- REF، منافذ ژلی با مهارکننده انتقالی-TR)، عمق نفوذ مایعات در منافذ ژلی بعنوان تابعی از زمان شبیه سازی در شکل ۴a ثبت می شود. در طول PS ۵۰ اول هنگامی که پیشروی مایعات به موقعیت پلیمری نمی رسد، هیچ تفاوتی بین فرایندها در نظر گرفته نمی شود، و تقریباً با مشخصات عمق نفوذ همپوشانی دارد. با این حال، نرخ مهاجرت مایعات در تماس با مهارکننده های انتقالی به شدت کاهش می یابد. همانطور که در شکل ۳ مشاهده شد، در PS ۳۰۰، مرز پیشروی در منفذ نانو با TR به وضوح عقب می رود. شکل ۴a نشان می دهد که شیب TR پس از PS ۵۰ به صورت چشمگیری کاهش

می یابد که منجر به افزایش شکاف در عمق نفوذ بین TR و REF می شود. در ۳۰۰ ps، تفاوت در عمق نفوذ در حدود ۱۲ Å است. همانند عملکردهای شبیه سازی، پلیمرها مانع از نفوذ مایعات می شوند. در ۵۰۰ ps، مرز نفوذ در REF در حدود ۲۰ Å جلوتر از مرز نفوذ در TR است، در حالی که در ۱۰۰۰ ps، عمق نفوذ در REF تقریباً ۳۰ Å بزرگتر است. این اثر مهارکننده انتقال مایعات را می توان به گروه های عملکردی eCH₃ از پلیمرها نسبت داد. این مهارکننده انتقالی یک ساختار مولکولی خاص دارد و با یک گروه کربوکسیل آب دوست توسط سطح C-S-H جذب می شود، و گروه های آلکیل آب گریز مانع از مهاجرت مولکول های آب می شوند. همانطور که در شکل همانطور که در شکل ۳b نشان داده شد، انتهای آب دوست پلیمر به شدت در سطح C-S-H جذب می شود و امکان زنجیره های طولانی گروه های آلکیل آب گریز را در تماس با مایعات می دهد. از آنجا که هیچ کدام از مایعات قادر به عبور از طریق گروه های آلکیل نیستند، این پیکربندی پلیمری معادل با مسدود کردن منافذ نانو است و عرض کانال انتقالی را کاهش می دهد. علاوه بر این، براساس ویژگی ها و نظریه پویایی های انتقال مویرگی، مایعات واقع در بخش میانی کانال که گروه های آلکیل در آن وجود ندارند، هنوز نمی تواند نفوذ کند تا مایعات در مجاورت سطح C-S-H، پلیمرهای گذشته را حرکت دهند. میانگین جابجایی مربعات (MSD) می تواند اطلاعات پویایی های اتم ها و مولکول ها را منعکس کند تا از تحلیل فرایند نفوذ مایعات پشتیبانی کند. MSD را می توان با توجه به معادله زیر محاسبه کرد:

$$MSD = |r_i(t) - r_i(0)|^2 \quad (1)$$

که $r_i(t)$ و $r_i(0)$ ، به ترتیب موقعیت اتم i را در زمان t و موقعیت اصلی نشان می دهند. شکل ۴b تکامل MSD مولکول های آب را در REF و TR در امتداد مسیر پیشروی (محور y) نشان می دهد. به طور کلی، مقادیر MSD مولکول های آب در REF به صورت متناسب با زمان شبیه سازی افزایش می یابند که نشان دهنده یک فرایند مهاجرتی پایدار است. برای مولکول های آب در TR، مقادیر در شروع (۵۰۰ ps) تقریباً با مولکول های آب در REF همپوشانی دارند. پس از آن، نرخ افزایشی MSD در TR نسبت به نرخ افزایشی MSD در REF کمتر می شود که نشان دهنده مهار مهاجرت مولکول های آب می باشد. تفاوت در مقادیر MSD بین REF و TR افزایش می یابد و مقدار نهایی در TR تنها در یک سوم آن در REF، در حدود ۲۰۰۰ Å^۲ است. این موضوع به معنی انتقال مولکول های آب در منافذ نانوی C-S-H است که به شدت توسط پلیمرها تحت تاثیر قرار می گیرد.



شکل ۳. تصاویر لحظه ای از فرایند انتقال مایعات در منافذ ژلی (a) بدون (b) با مهارکننده های انتقالی (نقاط آبی روشن مایعات را نشان می دهند، توپ های سبز و قرمز سطح فوقانی و تحتانی ماتریس C-S-H را نشان می دهد، زنجیره های آبی تیره پلیمرها را نشان می دهد).

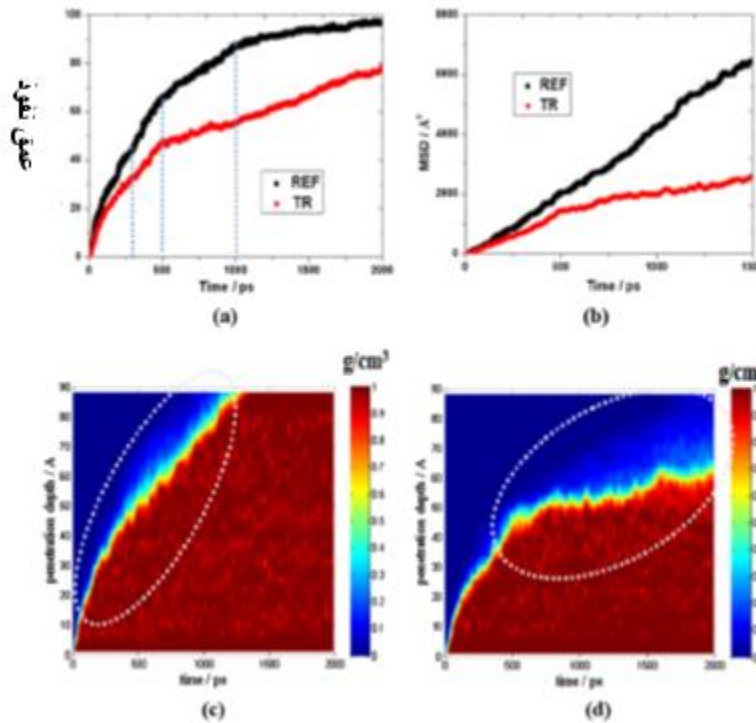
نقشه های چگالی وابسته به زمان مولکول های آب در امتداد جهت مهاجرت در طول فرایندهای نفوذ REF و TR به ترتیب در شکل های ۴c و ۴d ترسیم می شوند. برای REF، می توان نشان داد که میزان اشباع منافذ ژل هنگام پیشروی نفوذ آب افزایش می یابد. پس از زمان شبیه سازی ۱۲۵۰ ps، کل منافذ ژلی با مولکول های آب با چگالی یکنواخت ۱ گرم/سانتی متر مکعب پر می شود. قبل از شرایط اشباع کامل، یک ناحیه انتقالی واضحی با مقادیر چگالی از محدوده ۰ تا ۱ g/cm^3 وجود دارد که توسط خطوط تیره سفید مشخص شده است. این امر ناشی از مرز پیشروی قوسی شکل است که مولکول های آب تنها در نزدیکی سطح فوقانی و تحتانی C-S-H وجود دارند. عرض ناحیه انتقالی به دلیل زاویه تماس کمتر و شکل قوسی تیزتر با عمق نفوذ افزایش می یابد. برای TR، نرخ نفوذ مولکول های آب به صورت واضح کمتر می شود و منافذ ژلی هنوز در زمان شبیه سازی ۲۰۰۰ ps اشباع نشده است. لازم به ذکر است که عمق نفوذ مایعات حجیم (چگالی ≈ 1 گرم بر سانتی متر مکعب) هیچ افزایش قابل توجهی از حدود ۵۰۰ ps تا ۲۰۰۰ ps را تجربه نمی کند. در مقابل، همانطور که در شکل ۴d نشان داده شد، به صورت همزمان افزایش زیادی در عرض ناحیه انتقالی وجود دارد. این موضوع بدین معنی است که به علت اثر مهارکننده پلیمرها، تنها مولکول های آب در مجاورت سطح C-S-H قادر به نفوذ عمیق تر در طول زمان شبیه سازی هستند، در حالی

که مولکول های حجیم آب نمی توانند به دورتر حرکت کنند. این موضوع به شکل واضح تر به مرز پیشروی و یک ناحیه انتقالی گسترده تر در نقشه چگالی کمک می کند.

همچنین یون های کلرید، اجزای کلیدی مایعات در بالای مولکول های آب هستند، و فرایند نفوذ کلریدها در شکل ۵ نشان داده می شود. همانند شکل ۵a، تکامل عمق نفوذ کلریدها در REF مشابه با تکامل عمق نفوذ مولکول های آب به استثنای نوسانات جزئی است. در آغاز زمان شبیه سازی، تقریباً مشخصات REF و TR با هم همپوشانی دارند که نشان دهنده یک مهاجرت همزمان است. پس از آن، یک پلنفرمی در منحنی TR رخ می دهد که نشان دهنده این است که انتقال یونی به شدت توسط پلیمرها مهار می شود. مشخصات MSD در شکل ۵b نیز این موضوع را ثابت می کند. رشد مقادیر MSD یون های کلرید در TR، به تدریج نسبت به رشد مقادیر REF پس از افزایش نسبی در طول اولین ۵۰-۱۰۰ ps کمتر می شود و شکاف بین این مقادیر افزایش می یابد. مقدار MSD کلرید در TR در ۱۵۰۰ ps در حدود ۲۰۰۰ Å^۲ است که تنها یک سوم مقدار MSD کلریدها در REF است که به معنی اثر مهارکننده پلیمرها در انتقال یون ها است. شکل ۵c و شکل ۵d، به ترتیب نقشه های چگالی کلریدها را در طول فرایند نفوذ در REF و TR نشان می دهد. به طور کلی، کلریدها به صورت یکنواخت در امتداد جهت حرکت در طول کل فرایند نفوذ توزیع می شوند، و در حدود ۱۳۰۰ ps از مرز پیشروی یون های کلرید به انتهای منافذ نانو با طول ۹ نانومتر بدون پلیمرها رسیده اند. با این حال، پلیمرها با جذب در سطح C-S-H به شدت انتقال کلریدها را نشان می دهند. در شکل ۵d، عمق نفوذ کلریدها در ۵۰-۶۰ Å از زمان شبیه سازی از ۸۰۰ ps تا ۲۰۰۰ ps تثبیت می شود که مربوط به حالت مولکول های حجیم آب در شکل ۴ می شود. این موضوع بدان معنی است که بیشتر کلریدها در مرز پیشروی در مایعات حجیم قرار می گیرند بجای اینکه مایعات جزئی در سطح فوقانی و تحتانی C-S-H قرار بگیرند، و مهاجرت این کلریدها همراه با مولکول های آب توسط مهارکننده های انتقالی مسدود می شود. علاوه بر این، توزیع کلریدها در امتداد جهت نفوذ در TR هنوز هم علیرغم انتقال مهار شده نسبتاً یکنواخت است.

۳/۱/۳. تنظیمات پلیمرها در طول فرایند انتقال مایعات

پلیمرها با جذب یک انتهای آب گریز در سطح C-SH بر دیگر گروه های آب گریز متکی هستند تا به شدت انتقال مایعات را در منافذ ژلی کاهش دهند. تنظیمات پلیمرها در طول فرایند نفوذ مایعات در شکل ۶ نشان داده می شود. یک پارامتر شعاع چرخش برای ارزیابی ترکیب و جهت گیری پلیمرها استفاده می شود و برای روشن سازی بیشتر مکانیسم مهار انتقالی استفاده می شود. در اینجا، ما مولفه های R_x ، R_y ، R_z شعاع چرخشی را در نظر می گیریم که میانگین فضای اشغال شده توسط پلیمرها در امتداد Y (جهت انتقال مایعات)، محور X و Z (عمود بر جهت انتقالی مایعات) را به ترتیب باتوجه به معادلات زیر نشان می دهد:



شکل ۴. فرایند انتقال مولکول های آب. (a) عمق نفوذ بعنوان یک تابع از زمان شبیه سازی. (b) میانگین مربع جایگذاری ها بعنوان تابعی از زمان شبیه سازی. نقشه های چگالی همراه با عمق نفوذ در منافذ نانو (c) بدون مهارکننده های انتقالی (d) با مهارکننده های انتقالی

$$R_x^2 = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - x_{com})^2 \right\rangle \quad (2)$$

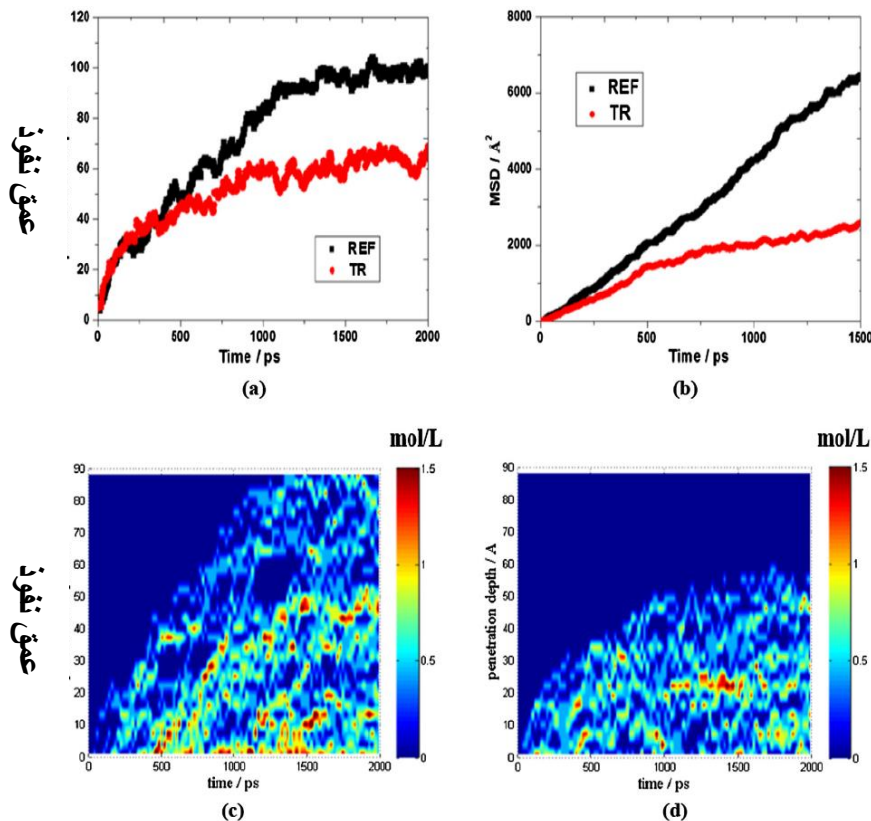
$$R_y^2 = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - y_{com})^2 \right\rangle \quad (3)$$

$$R_z^2 = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (z_i - z_{com})^2 \right\rangle \quad (4)$$

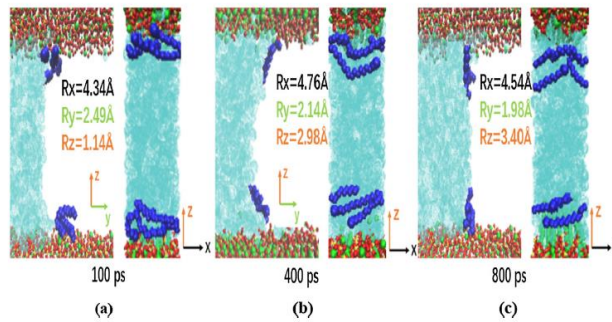
که در آن N تعداد اتم های پلیمر است، و $(z_{com}, y_{com}, x_{com})$ مختصات مرکز هندسی پلیمرها است، (z_i, y_i, x_i) مختصات اتم i ام پلیمرها است، $\langle \cdot \rangle$ میانگین تمام مسیرها را در طول ۲۰۰۰ ps نشان می دهد. مقدار بیشتر شعاع چرخشی نشان می دهد که پلیمرها فضاهای بیشتری را در این راستا اشغال می کنند.

تصاویر لحظه ای گرفته شده در صفحه $Y-Z$ و صفحه $X-Z$ در طول فرایند انتقال مایعات در شکل ۶ ثبت می شوند، و شعاع چرخشی مربوطه در هر لحظه محاسبه می شود. می توان مشاهده کرد که در سطح مقطع انتقال مایعات (صفحه $X-Z$)، زنجیره های پلیمری همیشه ترکیبات ساده و واضح را نشان می دهند و از طریق کل کانال نانو در امتداد محور X اشغال می شوند. این موضوع امکان می دهد که گروه های

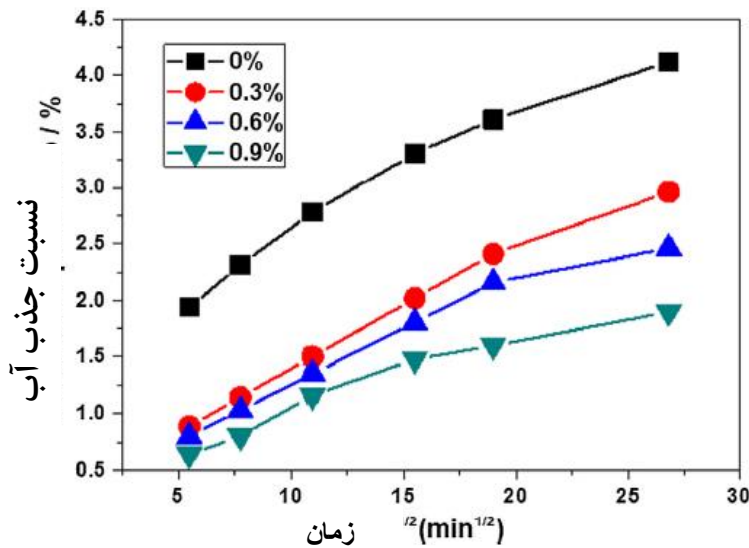
آلکیل آب گریز در تماس کامل با مایعات قرار بگیرند و از پیشروی آنها جلوگیری می کنند. پلیمرها بعنوان دیوارهایی در مسیر مهاجرت مایعات عمل می کنند، کانال منافذ ژلی C-S-H را مسدود می کنند و انتقال مایعات را مهار می کنند. علاوه بر این، تغییر ترکیبات پلیمری در مسیره های صفحه Y-Z مطرح می کند که در تماس فوقانی با مایعات، پلیمرها تمایل دارند تا فضای بیشتری را در امتداد Z در نظر بگیرند. شعاع چرخشی در امتداد راستای Z از ۱.۱۴ Å به ۳.۴۰ Å منتقل می شود و زنجیره های پلیمری در صفحه Y-Z به تدریج به صورت عمودی بر صفحه سطحی C-S-H می ایستند. در مقابل، یک روند نزولی برای شعاع چرخشی همراه با جهت پیشرفت مایعات وجود دارد که بدین معنی است که پلیمرها فضای طولی کمتری را در امتداد محور Y دارند. این موضوع نشان می دهد که ارتفاع دیوارهای مسدود کننده بزرگتر می شود، و بازده مهار انتقالی قوی تر می شود. در زمان شبیه سازی ۸۰۰ ps (شکل ۶C را مشاهده کنید)، پلیمرها تنظیمات کاملا درستی را نشان می دهند. این موضوع بدان معنی است که زنجیره های پلیمری بزرگترین ناحیه را در سطح مقطع پیشروی مایعات اشغال می کنند و مرتفع ترین دیوار مسدود کننده را تشکیل می دهند و بنابراین انتقال به بزرگترین میزان را مهار می کنند. از نظر تئوری با توجه به معادله کلاسیک لوکاس-واشبرن
$$h^2 = \frac{c \cdot r \cdot \sigma \cos \theta \cdot t}{2\eta}$$
 (C) عامل فرم منفذ مویرگی را نشان می دهد، r شعاع مویرگی را نشان می دهد، σ تنش سطحی مایعات را نشان می دهد، η ویسکوزیته مایعات را نشان می دهد، θ زاویه تماس را نشان می دهد، t زمان تماس را نشان می دهد، و h عمق نفوذ مایعات را نشان می دهد)، زمانی که شعاع مویرگی کاهش می یابد، عمق نفوذ نیز در یک بازه زمانی معین کم خواهد شد. این مورد می تواند نفوذ انتقال مایعات حجیم را از ۵۰۰ ps تا ۲۰۰۰ ps بیان کند، همانطور که قبلا ذکر شد.



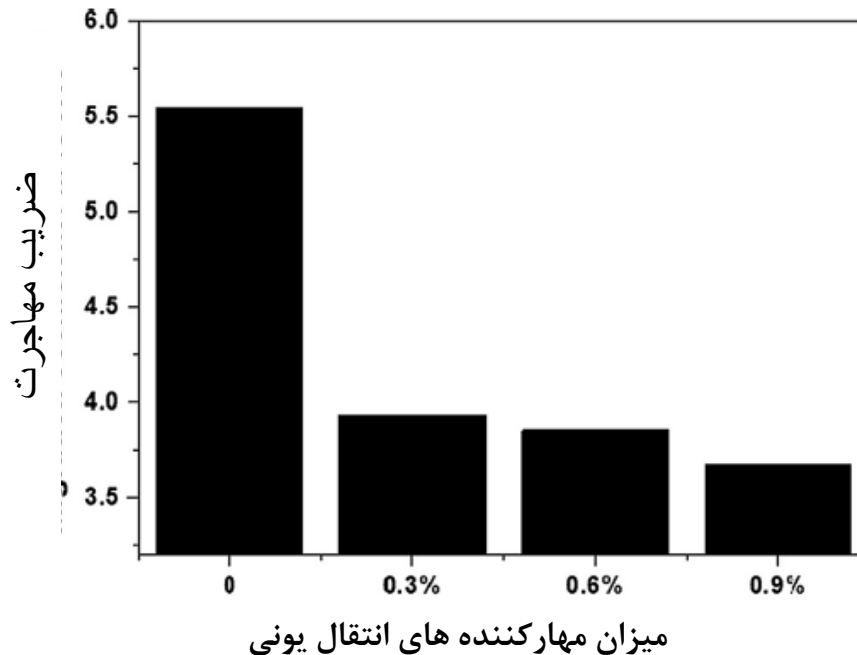
شکل ۵. فرایند انتقال یون های کلرید. (a) عمق نفوذ بعنوان تابعی از زمان شبیه سازی. (b) میانگین مربع جایگذاری ها بعنوان تابعی از زمان شبیه سازی. نقشه های چگالی همراه با عمق نفوذ در منافذ نانو (c) بدون مهارکننده های انتقالی (d) با مهارکننده های انتقالی



شکل ۶. تصاویر لحظه ای از سیستم ترسیم شده در صفحه Z-X و Z-Y، به ترتیب، و ارزیابی تنظیمات زنجیره های پلیمری در طول فرایند انتقال مایعات در (a) ۱۰۰ ps، (b) ۴۰۰ ps، (c) ۸۰۰ ps.



شکل ۷. ارزیابی های نسبت جذب آب از ترکیبات بتنی با میزان متفاوت مهارکننده های انتقالی یونی.



شکل ۸. ضرایب انهنس سرریدر ار مسنوس موی بسی بعوسن سبعی ار میرس مههر سسده های انتقال یونی.

لازم به ذکر است که از اثر تجمیع پلیمرها نمی توان غفلت کرد. نوشته های قبلی ثابت کرده اند که در نانو ذرات محدود زنجیره های پلیمری C-S-H که به میزان متفاوتی بسته به قطبی بودن گروه های عملکردی، غلظت، و ساختار شیمایی پلیمرها در هم تنیده شده اند. پیش بینی می شود که در این تحقیق، غلظت بیشتر پلیمرها ممکن است یک تجمیع پلیمری را در مجاورت سطح C-S-H به علت فعل و انفعالات بین گروه های کربوکسیل از زنجیره های مختلف پلیمری القا کند. زنجیره های پلیمری هوشمند در هم تنیده می شوند، که باعث کاهش سطح تماس موثر با مایعات می شود، بنابراین باعث بازده مهار کمتر در انتقال مایعات می شود.

۳/۲. آزمایشات

براساس ساختار پلیمری پیشنهاد شده توسط شبیه سازی های MD، یک مهار کننده جدید انتقال یونی ساخته می شود و به ترکیب های بتنی اضافه می شود. آزمایشات دوام با مقیاس کلان برای آزمایش تاثیر واقعی مهارکننده ها انجام می شوند. تحولات نسبت های جذب این مخلوط های بتنی با افزایش زمان غوطه وری در شکل ۷ نشان داده می شود. مقدار نقطه اصلی اندازه گیری ($5.5 \text{ min}^{1/2}$) برای ۱۹٪ برای بتن بدون مهارکننده های انتقالی یون است، در حالی که ترکیب TR به صورت چشمگیری آن را تا ۰.۶٪~۰.۸٪ کاهش می دهد. برای هر گروه از مخلوط های بتنی، مقادیر نسبت های جذب آب با ادامه روند غوطه وری همچنان ادامه دارد. با این حال، حضور TR به صورت قابل توجهی نرخ افزایشی را کند می کند و میزان بالاتر منجر به نرخ های کمتر جذب آب می شود. در آخرین نقطه اندازه گیری ($26.8 \text{ min}^{1/2}$)، نسبت جذب آب نمونه بدون TR بیش از ۴٪ است، در حالی که مخلوطی با میزان TR ۰.۹٪ تنها به حدود ۱.۷٪ می رسد. می توان ثابت کرد که افزودن TR به صورت موثری انتقال آب را از طریق منافذ بتن مهار می کند و بنابراین میزان جذب آب را کاهش می دهد.

ضریب مهاجرت کلرید، یک پارامتر اصلی است که ارتباط مستقیم تری با دوام سازه های بتنی محکم دارد و داده های اندازه گیری مخلوط بتنی پس از غوطه وری برای ۵۶ روز در شکل ۸ مشخص می شود. می توان مشاهده کرد که این نمونه بودن TR یک ضریب مهاجرت بالایی از $5.5 * 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$ دارد. با این حال، ترکیب TR این مقدار را به کمتر از $4 * 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$ کاهش می دهد. به همین ترتیب، میزان بالاتر دارای عملکرد بهتری است، که نشان می دهد حضور TR به صورت موثری باعث کندی نفوذ یون های کلرید در سراسر منافذ بتن می شود و ممکن است به عمر طولانی تر خدمات کمک کند.

۴. نتیجه گیری

یک ماده مهار کننده جدید انتقال یون در این تحقیق طراحی، ساخته و آزمایش می شود. شبیه سازی های پویایی های مولکولی برای تعیین یک ساختار شیمیایی مناسب از پلیمرهای هوشمند استفاده می شوند تا نفوذ مویرگی مایعات را تنظیم کنند، در حالی که آزمایشات انجام می شوند تا اثر مهار پلیمرها را بر انتقال آب و یونهای کلرید در ماتریس سیمانی متخلخل آزمایش کنند.

پلیمر هوشمند طراحی شده باید دارای یک انتهای آبدوست (COO^-) و تعداد زیادی گروه های آب گریز (آلکیل) باشند. از یک سو، گروه کربوکسیل جذب پایدار بر روی سطح C-SH را به علت جذب الکترواستاتیک قوی بین اتم های اکسیژن با قطبیت بالا (از COO^- و یون های کلسیم (از سطح C-S-H) تضمین می کند. از سوی دیگر، زنجیره های آب گریز به ممانعت از انتقال مایعات کمک می کنند. در چنین سناریویی، وقتی مایعات در یک منفذ ژل C-SH پیشروی می کنند، زنجیره های پلیمری هوشمند با یک انتهای جذب در سطح ماتریس، به تدریج عمود بر ماتریس قرار می گیرند، که کانال را مسدود کرده و ناحیه سطح مقطع یک مسیر انتقالی را کاهش می دهد. بنابراین، عمق نفوذ و میانگین مربع جابجایی های مولکول های حجیم آب و یون های کلرید به صورت چشمگیری هنگام مقایسه با فرایند نفوذ مویرگی آزاد کاهش می یابد.

بر اساس مکانیسم های تعاملی در میان ماتریس C-S-H، مایعات و مواد آلی که در بالا توضیح داده شد، پلیمرهای هوشمند در مهارکننده های انتقال یون ها ساخته می شوند و به مخلوط های بتنی اضافه می شوند. نتایج تجربی ثابت می کنند که میزان جذب آب و نرخ مهاجرت یون کلرید نمونه های بتنی، کاهش چشمگیری را نشان می دهد، که نشان دهنده بهره وری بالای مهار کننده انتقال یونی و افزایش قابل توجه در دوام سازه های بتنی مسلح است.

منابع:

- H. Chang, P. Feng, K. Lyu, J. Liu, A novel method for assessing C-S-H chloride adsorption in cement pastes, Constr. Build. Mater. ۲۲۵ (۲۰۱۹) ۳۲۴-۳۳۱, <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2019.07.212>.
- J. Liu, S. Mu, J. Cai, Q. Jiang, Preparation and performance evaluation of cement hydration responsive nanomaterial, J. Build. Struct. ۱ (۲۰۱۹) ۱۸۱-۱۸۷.
- M. Oltulu, R.Şahin, Single and combined effects of nano-SiO₂, nano-Al₂O₃ and nano-Fe₂O₃ powders on compressive strength and capillary permeability of cement mortar containing silica fume, Mater. Sci. Eng., A (۲۰۱۱), <https://doi.org/10.1016/j.msea.2011.05.054>.
- M.H. Zhang, H. Li, Pore structure and chloride permeability of concrete containing nano-particles for pavement, Constr. Build. Mater. (۲۰۱۱), <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2010.07.032>.
- A.A.A.A. Alrashed, O.A. Akbari, A. Heydari, D. Toghraie, M. Zarringhalam, G.A.S. Shabani, A.R. Seifi, M. Goodarzi, The numerical modeling of water/ FMWCNT nanofluidflow and heat transfer in a backward-facing contracting channel, Phys. B Condens. Matter. ۱۸, <https://doi.org/10.1016/j.physb.2018.02.022>.

- F. Pourfattah, M. Motamedian, G. Sheikhzadeh, D. Toghraie, O. Ali Akbari, The numerical investigation of angle of attack of inclined rectangular rib on the tur-bulent heat transfer of water- Al_2O_3 nanofluid in a tube, *Int. J. Mech. Sci.* (۲۰۱۷), <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2017.07.049>.
- E. Khodabandeh, M. Bahiraei, R. Mashayekhi, B. Talebjedi, D. Toghraie, Thermal performance of Ag–water nanofluid in tube equipped with novel conical strip in-serts using two-phase method: Geometry effects and particle migration considera-tions, *Powder Technol.* (۲۰۱۸),<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.06.038>.
- M. Hemmat Esfe, H. Hajmohammad, D. Toghraie, H. Rostamian, O. Mahian, S. Wongwises, Multi-objective optimization of nanofluidflow in double tube heat exchangers for applications in energy systems, *Energy.* (۲۰۱۷),<https://doi.org/10.1016/j.energy.2017.06.104>.
- Q. Zhang, Z. Zhang, H. Zhou, Z. Xie, L. Wen, Z. Liu, J. Zhai, X. Diao, Redox switch of ionic transport in conductive polypyrrole-engineered unipolar nanofluidic diodes, *Nano Res.* ۱۰ (۲۰۱۷) ۳۷۱۵,<https://doi.org/10.1007/s12274-017-1080-4>.
- Y. Sun, J. Ma, F. Zhang, F. Zhu, Y. Mei, L. Liu, D. Tian, H. Li, A light-regulated host-guest-based nanochannel system inspired by channelrhodopsins protein, *Nat. Commun.* ۸ (۲۰۱۷) ۲۶۰,<https://doi.org/10.1038/s41467-017-0330-z>.
- X. Hou, H. Zhang, L. Jiang, Building bio-inspired artificial functional nanochannels: from symmetric to asymmetric modification, *Angew. Chem. Int. Ed.* ۵۱ (۲۰۱۲) ۲۱۹۶,<https://doi.org/10.1002/anie.201104904>.
- C. Secker, S.M. Brosnan, R. Luxenhofer, H. Schlaad, Poly(α -peptoid)s revisited: synthesis, properties, and use as biomaterial, *Macromol. Biosci.* ۱۵ (۲۰۱۵) ۸۸۱, <https://doi.org/10.1002/mabi.201500022>.
- V.D. Ta, A. Dunn, T.J. Wasley, J. Li, R.W. Kay, J. Stringer, P.J. Smith, E. Esenturk, C. Connaughton, J.D. Shephard, Laser textured superhydrophobic surfaces and their applications for homogeneous spot deposition, *Appl. Surf. Sci.* (۲۰۱۶),<https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.10.119>.
- Z. Dong, Y. Li, Q. Zou, Degradation and biocompatibility of porous nano-hydro-xyapatite/polyurethane composite scaffold for bone tissue engineering, *Appl. Surf. Sci.* (۲۰۰۹),<https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2009.01.083>.
- A.H. Saeedi, M. Akbari, D. Toghraie, An experimental study on rheological behavior of a nanofluid containing oxide nanoparticle and proposing a new correlation, *Phys. E Low-Dimens. Syst. Nanostruct.* (۲۰۱۸),<https://doi.org/10.1016/j.physe.2018.02.018>.
- M.A. Esfahani, D. Toghraie, Experimental investigation for developing a new model for the thermal conductivity of silica/water-ethylene glycol (۴۰٪–۶۰٪) nanofluid at different temperatures and solid volume fractions, *J. Mol. Liq.* (۲۰۱۷),<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2017.02.037>.
- S.K. Hwang, I. Bae, R.H. Kim, C. Park, Flexible non-volatile ferroelectric polymer memory with gate-controlled multilevel operation, *Adv. Mater.* ۲۴ (۲۰۱۲) ۵۹۱۰, <https://doi.org/10.1002/adma.201201831>.
- Z. Zhang, X.Y. Kong, K. Xiao, G. Xie, Q. Liu, Y. Tian, H. Zhang, J. Ma, L. Wen, L. Jiang, A bioinspired multifunctional heterogeneous membrane with ultrahigh ionic rectification and highly efficient selective ionic gating, *Adv. Mater.* ۲۸ (۲۰۱۶) ۱۳۴,<https://doi.org/10.1002/adma.201503668>.
- Z. Zhang, G. Xie, K. Xiao, X.-Y. Kong, P. Li, Y. Tian, L. Wen, L. Jiang, Asymmetric multifunctional heterogeneous membranes for pH- and temperature-cooperative smart ion transport modulation, *Adv. Mater.* ۲۸ (۲۰۱۶) ۹۶۱۴,<https://doi.org/10.1002/adma.201602708>.
- Z.Q. Zhang, H.F. Ye, Z. Liu, J.N. Ding, G.G. Cheng, Z.Y. Ling, Y.G. Zheng, L. Wang, J.B. Wang, Carbon nanotube-based charge-controlled speed-regulating nanoclutch, *J. Appl. Phys.* ۱۱۱ (۲۰۱۲) ۱۱۴۳۰۴, <https://doi.org/10.1063/1.3674344>.
- Z.Q. Zhang, H.W. Zhang, L. Wang, Y.G. Zheng, J.B. Wang, Pressure control model for transport of liquid mercury in carbon nanotubes, *Appl. Phys. Lett.* ۹۰ (۲۰۰۷) ۱۴۴۱۰۵, <https://doi.org/10.1063/1.2720744>.
- P. Alipour, D. Toghraie, A. Karimpour, M. Hajian, Modeling different structures in perturbed Poiseuilleflow in a nanochannel by using of molecular dynamics simu-lation: Study the equilibrium, *Phys. A Stat. Mech. Its Appl.* (۲۰۱۹),<https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.09.177>.
- P. Alipour, D. Toghraie, A. Karimpour, M. Hajian, Molecular dynamics simulation offluidflow passing through a nanochannel: effects of geometric shape of rough-nesses, *J. Mol. Liq.* (۲۰۱۹),<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2018.11.057>.
- M. Tohidi, D. Toghraie, The effect of geometrical parameters, roughness and the number of nanoparticles on the self-diffusion coefficient in couetteflow in a na-nochannel by using of molecular dynamics simulation, *Phys. B Condens. Matter.* (۲۰۱۷),<https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.05.014>.

- P. Alipour, D. Toghraie, A. Karimipour, Investigation the atomic arrangement and stability of the fluid inside a rough nanochannel in both presence and absence of different roughness by using of accurate nano scale simulation, *Phys. A Stat. Mech. Its Appl.* (۲۰۱۹), <https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.04.243>.
- Y. Zhou, D. Hou, J. Jiang, P. Wang, Chloride ions transport and adsorption in the nano-pores of silicate calcium hydrate: Experimental and molecular dynamics studies, *Constr. Build. Mater.* ۱۲۶ (۲۰۱۶), <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2016.09.110>.