



مروری بر قابلیت‌های روش شبیه سازی دینامیک ملکولی در رفتارشناسی قیر و مخلوط‌های آسفالتی

هادی گلی^۱، ساسان افلاکی^۲، کامبیز بهنیا^۳

۱- دانشجوی دکترای راه و ترابری دانشکده مهندسی عمران، دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران

۲- استادیار دانشکده مهندسی عمران، دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران

۳- دانشیار دانشکده مهندسی عمران، دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران

Hgoli66@gmail.com

خلاصه

خواص فیزیکی و شیمیایی مواد در طبیعت، که مرتبط با تفاوت در ویژگی‌های مولکولی مولکول‌های سازنده آن‌هاست موجب تمایز در رفتار آنها نسبت به یکدیگر می‌شود. لذا شناخت ساختار مولکولی مواد مختلف می‌تواند ما را در شناخت و پیش‌بینی رفتار مصالح مختلف یاری نماید. این مقاله به معرفی قابلیت‌های روش شبیه سازی دینامیک ملکولی در شناخت و پیش‌بینی رفتار قیر و مخلوط‌های آسفالتی می‌پردازد. همچنین پس از معرفی ساختار روش شبیه سازی دینامیک ملکولی به بیان چند نمونه از پژوهش‌های انجام شده در این زمینه پرداخته شده است. بررسی‌های صورت گرفته در این مقاله نشان می‌دهد که این روش علیرغم محدودیت‌های موجود در استفاده از آن، موجب شناخت روشن‌تر و پیش‌بینی درست‌تر رفتار مصالح (از جمله قیر و مخلوط آسفالتی) و همچنین رفع بعضی نقیصه‌های ذاتی مواد با هزینه‌های بسیار پائین و استفاده از روش‌های بسیار پایه‌ای می‌شود.

کلمات کلیدی: شبیه سازی ملکولی، میدان نیرو، مخلوط آسفالتی، قیر

۱. مقدمه

خواص فیزیکی و شیمیایی مواد در طبیعت، رفتار آنها را از یکدیگر متمایز می‌نماید. رفتارشناسی مواد به عنوان یک علم کاربردی از دیرباز مورد توجه محققان بوده است.

تفاوت در خواص مواد را می‌توان به تفاوت در ویژگی‌های مولکولی مولکول‌های سازنده آن‌ها مرتبط دانست. مولکول‌های مختلف که از اتم‌های متفاوتی با آرایش خاصی ساخته شده‌اند موجب می‌شوند که ترکیب ساخته شده خصوصیات مکانیکی خاصی را از خود نشان دهد. لذا شناخت ساختار مولکولی مواد مختلف می‌تواند ما را در نیل به هدف شناخت و پیش‌بینی رفتار مصالح مختلف یاری نماید.

عکس العمل‌هایی که ماده در برابر عوامل خارجی از جمله نیرو و یا آسیب‌های محیطی از خود نشان می‌دهد نیز از نحوه آرایش و نوع مولکول‌های آن سرچشمه می‌گیرد. لذا این امر محققین را بر آن داشته تا با شناخت ساختار مولکولی مواد مختلف به مدلسازی ساختار مولکولی آن‌ها بپردازند. این موضوع سبب می‌شود که بتوان با دقت بالایی رفتار مولکول‌ها و در نتیجه آن رفتار ماده را در اثر عوامل خارجی و بارهای وارد شده مشاهده نمود.

رفتار مخلوط آسفالتی که از قیر و سنگدانه تشکیل می‌شود به رفتار اجزاء تشکیل دهنده آن وابسته است. بسیاری از آسیب‌های وارد به مخلوط آسفالتی دارای منشأی در مقیاس مولکولی بوده که در صورت شناخت صحیح از رفتارهای قیر و سنگدانه‌ها می‌توان روش‌های مناسبی را برای پیشگیری از آن‌ها بدست آورد. البته باید توجه داشت که علاوه بر رفتار تک تک مواد تشکیل دهنده مخلوط آسفالتی رفتار مخلوط در برابر نیروهای وارد و

^۱ دانشجوی دکترای راه و ترابری دانشکده مهندسی عمران، دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران

^۲ استادیار دانشکده مهندسی عمران، دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران

^۳ دانشیار دانشکده مهندسی عمران، دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران