مجله مهندسی مکانیک مدرس، دی 1394، دوره 15، شماره 10، ص‌ص 225-232

ماهنامه علمی پژوهشی

مهندسی مکانیک مدرس

mme.modares.ac.ir

بررسی مکانیزم جریان خزش گرمایی در نانولوله‌ها به وسیله روش دینامیک مولکولی

مهدی صاحبی بهنمیری[1]، احمد رضا عظیمیان[2*]

1- دانشجوی دکترا، مهندسی مکانیک تبدیل انرژی، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان
2- استاد، مهندسی مکانیک تبدیل انرژی، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان
* اصفهان، صندوق پستی 8415683111، azimian@cc.iut.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 09 تیر 1394
پذیرش: 09 شهریور 1394
ارائه در سایت: 23شهریور 1394

کلید واژگان:
خزش گرمایی
نانولوله
گرادیان دما
جریان مایع

چکیده

در مقاله حاضر امکان ایجاد و علت پدیده خزش گرمایی، که عبارت است از به حرکت در آوردن سیال بر اثر اعمال گرادیان دما در غیاب نیروهای ثقلی، برای مایعات به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفته است. این پدیده تاکنون بیشتر در مورد گازهای رقیق اثبات و بررسی شده بود. اخیرا تلاش‌هایی برای اثبات وجود این پدیده برای سیالاتِ چگال محدود در نانومجراها نیز صورت گرفته است. علت و مکانیزم حاکم بر پدیده خزش گرمایی در سیالات چگالِ محدود شده در هندسه‌های نانومقیاس هنوز به درستی درک نشده است. مقاله حاضر به بررسی علت و مکانیزم حاکم بر این پدیده برای مایعِ محدود شده در نانولوله‌ای که به دو سر آن یک گرادیان دمایی اعمال شده است می‌پردازد. نتایج نشان می‌دهد که جریان خزش گرمایی در مورد مایعات درون نانولوله‌ها امکان پذیر است. همچنین هر چه قطر نانولوله کوچک‌تر باشد اثرهای مربوط به خزش گرمایی قوی‌تر است. جزئیات مولکولی شبیه‌سازی نشان می‌دهد که توزیع چگالی سیال، تحت تاثیر دیواره مجرا و در نزدیکی آن، به صورت لایه لایه در می‌آید. این لایه لایه شدن به همراه گرادیان دمایی اعمال شده در طول نانولوله، سبب ایجاد عدم تعادل فشار در نزدیکی دیواره و در راستای محور نانولوله می‌شود. این عدم تعادل فشار به صورت یک نیروی سطحی عمل کرده و موجب رانش سیال از سمت سرد به گرم (در محدوده مورد بررسی در این مقاله) و ایجاد جریان خزش گرمایی می‌شود. برای اثبات این موضوع شکل‌های مربوط به توزیع دما، چگالی و فشار ترسیم شده‌اند.

Molecular dynamics investigation of the mechanisms of thermal creep flow in nanotubes

Mahdi Sahebi, Ahmadreza Azimian*

Department of Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran.
* P.O.B. 8415683111, Isfahan, Iran, azimian@cc.iut.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 30 June 2015
Accepted 31 August 2015
Available Online 14 September 2015

Keywords:
Thermal Creep
Nanotubes
Temperature gradient
Liquid Flow

ABSTRACT

Thermal creep is often associated with the flowing of a rarefied gas via the effect of temperature difference in solid boundaries. Recently the feasibility of such flow in dense fluids has become a challenge. This paper deals with simulating the thermal creep flow in liquids confined in nanotubes. The investigations are carried out by molecular dynamics simulation method. The goal of this work is to provide a clean picture of the thermal creep phenomenon mechanism in liquids. Simulation results show the existence of such flow in liquids in nanotubes. The thermal creep effect is stronger in nanotubes with narrower cross sections. Molecular data provided by the simulations shows there is a fluid layering phenomenon near the solid wall. The fluid layering together with the wall temperature gradient develops a pressure gradient near the wall. This pressure gradient acts as a planar force and is assumed to be responsible for the thermal creep effect. This force causes the fluid to flow toward the hot side of the tube. The mechanism of thermal creep phenomena is justified by the use of molecular principles and molecular data which are obtained from the molecular dynamics simulations.

1- مقدمه

جریان سیال درون نانولوله‌ها دارای کاربردهای مختلفی در زمینه‌هایی مانند کنترل دمایی، انتقال یون‌ها و ذره‌ها، مرتب کردن مولکول‌ها[1] و انتقال دارو[2] است و در انواع سیستم‌هایی که تحت عنوان سیستم‌های میکرو نانوالکترومکانیکی[3] و سیستم‌های آزمایشگاه بر روی تراشه‌های الکترونیکی[4] شناخته می‌شوند، استفاده می‌شود [1-3]. این پدیده موضوع نسبتا جدیدی است که اخیرا توجه محققان زیادی را به خود جلب کرده است [4]. در حالت کلی نیاز شدیدی برای فهم پایه‌های مکانیزمی که به وسیله آن مولکول‌ها می‌توانند از میان هندسه‌هایی که با ابعاد نانو محدود شده‌اند عبور کنند، وجود دارد. هندسه‌هایی که ریز مقیاس بودن و نسبت بالای سطح به حجم در آن‌ها، باعث افزایش مقاومت در برابر حرکت سیال درون آن‌ها می‌شود [5]. جریان از میان نانوکانال‌ها به‌وسیله عوامل مختلفی به رانش در آمده و نسبت به همین

1- Sequencing
2- Drug delivery
3- Micro/nano electromechanical systems (Mems/Nems)
4- Lab on a chip

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

Please cite this article using:
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)

Archive of SID
www.SID.ir

عوامل طبقه‌بندی و نام‌گذاری می‌شود. جریان‌های با محرک فشاری[1] و با محرک میدان الکتریکی[2] [6] دو نمونه شناخته شده از این جریان‌ها هستند. یکی دیگر از عوامل رانشِ سیال، گرادیان دما است. جریانی که به‌وسیله گرادیان دما به حرکت در می‌آید به نام جریان خزش گرمایی[3] شناخته می‌شود. در چارچوب دینامیک سیالات کلاسیک، وجود یک میدان نیرویی ثقلی (برای ایجاد نیروی شناوری)، برای به حرکت در آوردن سیال به‌وسیله گرادیان دما، شرطی لازم است. اما برای سیستم‌هایی که عدد نودسن (که عبارت است از نسبت متوسط طول پویش آزاد مولکولی به بعد مشخصه مجرا یا ظرفی که سیال درآن قرار دارد) آن‌ها نسبتا بزرگ است می‌توان سیال را حتی بدون حضور میدان نیروی ثقلی، به وسیله گرادیان دمایی در مرزهای جامد به حرکت واداشت.

جریان خزش گرمایی اولین بار به وسیله ازبورن رینولدز انگلیسی در سال 1879 شناخته شد. رینولدز مشاهده کرد که اختلاف دمای ایجاد شده در دو سوی یک صفحه متخلخل می‌تواند سبب جریان یافتنِ جریان گاز رقیق از میان صفحه شود، بدون این‌که هیچ اختلاف فشار اولیه یا تفاوت ساختار شیمیایی‌ای در میان باشد [7]. پس از او محققان بسیاری در مورد ماهیت و کاربرد خزش گرمایی در گازهای رقیق به تحقیق پرداختند به طور مثال ماکسول به لحاظ تئوریک این پدیده را مورد بررسی قرار داد و توانست روابطی را برای آن به‌دست آورد [8]. همچنین نودسن [9] طرح ساخت وسیله‌ای برای انتقال گاز رقیق با استفاده از پدیده خزش گرمایی را پیشنهاد داد. بسکوک و همکاران [10] و نیز وارگو و همکاران [11] ایده ارائه شده توسط نودسن را مبنای طراحی میکرو کمپرسوری برای گازها بر پایه استفاده از پدیده‌ی خزش گرمایی، قرار دادند. اخیرا از این‌گونه کمپرسورها در سیستم‌های میکروکروماتوگرافی گاز[4] [12] و جداسازی گازها[5] [13] استفاده شده است. سون [14] در یک مقاله مفصل به معرفی انواع جریان‌هایی از گازهای رقیق که به وسیله اثرهای دمایی می‌تواند به حرکت درآید پرداخته و سعی کرده است که تئوری و مکانیزم فیزیکی آن‌ها را مورد بحث قرار دهد. مرور منابع علمی نشان می‌دهد که اکثر پژوهش‌هایی که برای بررسی جریان خزش گرمایی انجام شده است در مورد گازهای رقیق بوده است. اما اخیرا پژوهش‌های معدود و محدودی در زمینه امکان ایجاد جریان خزش گرمایی در سیالات چگال‌تر نیز صورت گرفته است. ماهیت جریان خزش گرمایی در سیالات چگال، پیچیده‌تر از ماهیت آن نسبت به گازهای رقیق است. به طور مثال در حالی که براساس کار ماکسول سرعت جریان گاز بر اثر اختلاف دما، با ضریبی که عمدتا تابعی از متوسط پویش آزاد مولکولی است به اختلاف دما مربوط می‌شود، در مایعات این ضریب را باید تابعی از شرایط پیچیده‌تر در نظر گرفت [15]. یکی از معدود پژوهش‌هایی که در زمینه جریان خزش گرمایی در مایعات صورت پذیرفته است به وسیله هان انجام شده است [15]. او امکان ساخت یک پمپ نانومقیاس برای مایعات که به وسیله نیروهای ناشی از اختلاف دما، سیال را به حرکت در می‌آورد، را مورد بررسی قرار داد. او چهار طرح را برای ایجاد چنین جریانی پیشنهاد داد. تفاوت طرح‌های پیشنهادی او با یکدیگر عمدتا در چینش هندسی و نحوه ایجاد گرادیان دما بود. از دیگر پژوهش‌های انجام شده در زمینه جریان خزش گرمایی در مایعات کار لیو و لی است [16]. آن‌ها یک سیستم نانوکانال کامپوزیتی را پیشنهاد دادند که بتواند آرگون مایع را تحت اثر اعمال گرادیان دمای متقارن به طور پیوسته به رانش وادار کند (جریان خزش گرمایی). در این سیستم، کانال کامپوزیتی که از دو دیواره مسطح موازی با یکدیگر تشکیل شده بود، شامل دو بخش بود. بخش اول از دیواره‌هایی با انرژی سطحی کم و بخش دوم از دیواره‌هایی با انرژی سطحی نسبتا بالا ساخته شده بود. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی نشان داد که طرح پیشنهادی ایشان توانایی برقراری جریان خزش گرمایی را داراست.

به دلیل این‌که ماهیت جریان خزش گرمایی در مورد مایعات، می‌تواند متفاوت و پیچیده‌تر از ماهیت این جریان در مورد گازهای رقیق باشد و پژوهش‌های معدود و غیر جامعی در زمینه جریان خزش گرمایی در سیالات چگال صورت پذیرفته است، ماهیت و مکانیزم جریان خزش گرمایی در مایعات هنوز به درستی درک نشده است. در کار حاضر سعی شده است که با استفاده از شبیه‌سازی به روش دینامیک مولکولی، که روشی است که با در اختیار گذاشتن جزئیات مولکولی مساله، قابلیت‌های بالای خود را در بررسی پدیده‌های غیر پیوستاری و پیچیده‌ی حوزه نانو به اثبات رسانده است [17]، به بررسی پدیده خزش گرمایی در مایعات پرداخته شود. هدف اصلی در این پژوهش، روشن کردن علت و ماهیت این جریان است. بدین منظور رفتار آرگون مایع محصور شده در یک نانولوله دارای گرادیان دمایی مورد شبیه‌سازی قرار گرفته و سعی می‌شود که امکان و علت ایجاد جریان خزش گرمایی با استفاده از جزئیات مولکولی مورد بررسی قرار گیرد.

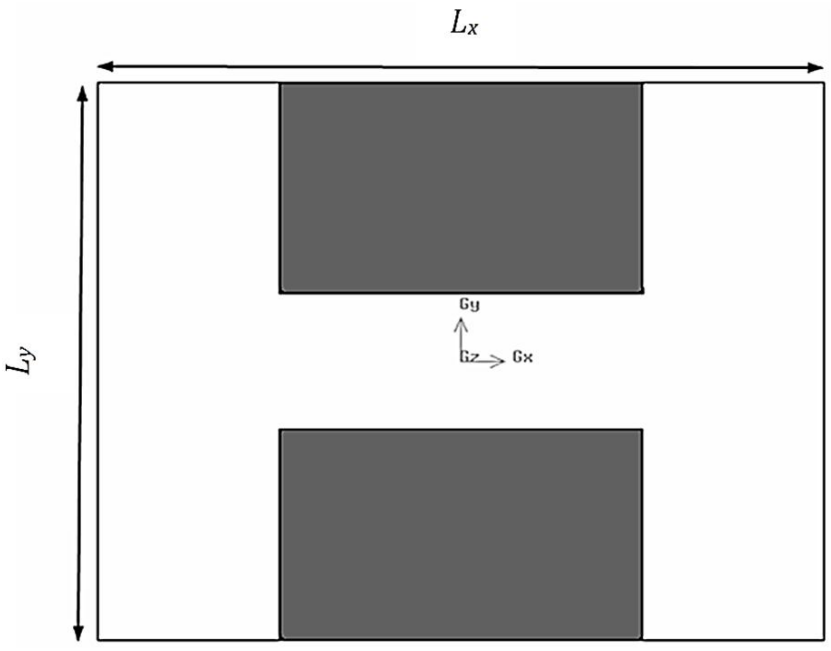
2- روش شبیه‌سازی و جزئیات مدل‌سازی

در بررسی جریان در نانولوله‌ها معمولا استفاده از معادلات مبتنی بر فرض پیوستگی دارای دقت قابل قبولی نیست [6]. از این رو در کار حاضر، روش مورد استفاده برای شبیه‌سازی، دینامیک مولکولی انتخاب شده است. این روش برای شبیه‌سازی رفتار مایعات، در مواردی که معادلاتِ مبتنی بر فرض پیوستگی از دقت کافی برای توصیف رفتار ماده برخوردار نیستند گزینه مناسبی است. استفاده از این روش امکان فهم عمیق‌تر مکانیزم‌های حاکم بر مساله مورد بررسی را به خوبی فراهم می‌کند. در این روش خواص وابسته به زمان و دینامیک سیستم مانند موقعیت، سرعت و نیروهای بین مولکولی با انتگرال‌گیری زمانی از معادلات حرکت نیوتن برای ذرات، محاسبه و اندازه گیری می‌شود. بعد از آن خواص فیزیکی ماکروسکپیک مانند فشار، سرعت متوسط، عدد چگالی ذرات و غیره به وسیله روابط ارائه شده از مکانیک آماری محاسبه می‌شوند. برای انتگرال‌گیری زمانی، روش‌های متنوعی وجود دارد. در روش‌های مبتنی بر تفاضل محدود، زمان مورد نظر برای انتگرال‌گیری به تعداد زیادی بازه زمانی کوچک، تفکیک می‌شود و تلاش می‌شود که با ترکیب کردن موقعیت، سرعت و شتاب در زمان فعلی و احتمالا زمان گذشته (بسته به الگوریتم انتگرال‌گیری)، مقدار آن‌ها در زمان بعدی به‌دست آید. فرآیند شبیه‌سازی بعد از انتخاب مدل برهمکنش ذرات با یکدیگر، آغاز می‌شود که متشکل از چند مرحله است. در مرحله اول باید یک پیکربندی اولیه برای سیستم انتخاب شود. سپس یک مرحله به تعادل رسانی انجام می‌شود که طی آن، سیستم از حالت اولیه شروع شده و در زمان جلو می‌رود. هنگام به تعادل رسانی، خواص ترمودینامیکی و ساختاری تا پایدار شدن، کنترل می‌شوند. سپس مرحله تولید آغاز می‌شود که شامل محاسبه نیروها و انتگرال‌گیری از معادله‌های حرکت است. در این مرحله خواص سیستم به کمک داده‌های شبیه‌سازی و با استفاده از روابط آماری محاسبه می‌شود [18،19].

نمای دو بعدی مدل هندسی مجرای مورد بررسی در شکل 1 آورده شده

1- Pressure driven flow
2- Electric field driven flow
3- Thermal creep
4- Micro- gas chromatography
5- Gas separation

Archive of SID
www.SID.ir



شکل 1 شماتیکی دو بعدی از هندسه و دامنه ناحیه شبیه‌سازی

است. در این شکل دو ناحیه‌ای که به رنگ خاکستری هستند دیواره جامد را مشخص می‌کنند. در میان این دیواره جامد مجرای استوانه‌ای شکلی وجود دارد که نماینده یک نانو لوله است. در دو سمتِ این نانو لوله، دو ناحیه به عنوان مخازنِ حاوی ذرات سیال در نظر گرفته شده‌اند. کل هندسه، درون یک جعبه محاسباتی سه بعدی مکعب مستطیلی قرار گرفته است. بُعد سوم این جعبه با توجه به شکل 1 در راستای محور z در نظر گرفته شده است. اندازه ابعاد هندسی به صورت زیر است: L_x=80 Å ، L_y=L_z=62 Å. ابعاد جعبه محاسباتی به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که پروفیل سرعت جریان عبوری از نانو لوله تا رسیدن به مرز سمت راست یا چپ تقریبا از بین برود. مجرای استوانه-ای شکل در امتداد محور x بوده و طول آن برابر با 40 آنگستروم است. شبیه-سازی‌ها برای مجراهایی با چهار شعاع 7/5، 11/5، 16/5 و 22/5 آنگستروم انجام شده است. سیال مورد استفاده در شبیه‌سازی، الگوریتم انتگرال‌گیری و روش خروجی‌گیری در مساله مورد بررسی منطبق با پژوهش قبلی‌ای است که از نویسندگان همین نوشتار منتشر شده است [20]. سیال مورد استفاده در شبیه‌سازی‌ها آرگون است. قدرت تقابل پیوندی بسیاری از سیالات معمول در حد آرگون است [21]. این امر زمینه تعمیم نتایجی که از شبیه‌سازی حاصل خواهد شد را برای بسیاری از سیالات، لااقل به صورت کیفی فراهم می‌کند. در ابتدای شبیه‌سازی، ذرات آرگون مایع با چگالی 0/0209 اتم بر آنگستروم مکعب و به صورت شبکه سلولی FCC چیده شده است. دمای اولیه آرگون مایع برابر با 87/8 کلوین در نظر گرفته شده است [5]. اندرکنش اتم-های سیال - سیال و جامد - سیال با یکدیگر به صورت تابع پتانسل 12-6 لنارد - جونز در نظر گرفته شده است. این تابع به صورت رابطه (1) است:

$$\emptyset(r_{ij}) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right], \quad r_{ij} \le r_c \qquad (1)$$

در رابطه بالا r_{ij} فاصله میان مراکز ذرات کروی i ام و j ام است. پارامتر ε عمق چاه پتانسیل است، σ مقدار r در پتانسیل صفر است. مقدار σ برای آرگون برابر با 3/405 آنگستروم و پارامتر ε/k_B برابر با 119/8 کلوین است. k_B ثابت بولتزمن[1] بوده و برابر است با: k_B=1.381E-23 (J/K). r_c شعاع قطع است که در فواصل بزرگ‌تر از آن تقابل میان ذرات ناچیز بوده و از آن صرف نظر می شود[22]. در شبیه سازی‌های حاضر مقدار شعاع قطع 12/5 Å در نظر گرفته شده است. ماده تشکیل دهنده دیواره لوله، نقره است. برای محاسبه نیروهای بین مولکولی دیواره و ارتعاش دمایی ذرات دیواره، از پتانسیل لنارد-جونز استفاده شده است. مقدار σ برای نقره برابر با 2/574 Å و پارامتر ε/k_B برابر با 4073/2 K در نظر گرفته شده است [23]. برای ثابت ماندن مکان دیواره با وجود ارتعاشات آزاد دمایی، بیرونی‌ترین لایه دیواره در جای خود ثابت نگه داشته شده است. به اتم های این لایه در هر گام زمانی سرعت صفر به صورت اجباری اعمال شده است. سایر اتم‌های دیواره می‌توانند به صورت آزاد ارتعاش داشته باشند. چگالی مولکول‌های دیواره برابر با n_w=0.05856 atoms/Å^3 در نظر گرفته شده است. بدین ترتیب ثابت شبکه برای دیواره لوله (که به‌صورت شبکه بلوری FCC است) برابر با 4/0876 Å به‌دست می‌آید. برای مدل‌سازی برهمکنش میان ملکول‌های جامد و سیال از از قاعده اختلاط لورنتز- برتولت[2] استفاده شده است. در این قاعده به جای ε و σ از ε_{sf} و σ_{sf} در معادله (1) استفاده می‌شود و این دو کمیت به ترتیب از میانگین هندسی و حسابی مقادیر متناظرخود برای جامد و سیال به دست می‌آیند [24].

از آن‌جا که مساله برای لوله‌هایی با قطرهای متفاوت مورد بررسی قرار گرفته است، تعداد کل ذراتِ شبیه‌سازی شده (جامد و سیال) بسته به هندسه‌ی مورد بررسی متفاوت است و از 9885 ذره برای لوله به قطر 45 آنگستروم تا 11921 ذره برای لوله به قطر 15 آنگستروم تغییر می‌کند.

برای انتگرال‌گیری از معادلات دینامیک مولکولی در زمان، از الگوریتم ورله سرعتی استفاده شده است. گام زمانی شبیه‌سازی برابر با 2 فمتوثانیه است. محاسبات مربوط به دما از طریق ارتباط میان انرژی ناشی از سرعت جنبشی ذرات و دما انجام می‌شود. متوسط زمانی مجموع انرژی جنبشی ذرات یک ناحیه از فضا با دمای آن ناحیه متناسب است (ضریب تناسب عبارت است از 1/5 ضرب در ثابت بولتزمن) [25]. برای ایجاد گرادیان دمایی در دیواره جامد، دو انتهای دیواره در دماهای ثابتی نگه داشته می‌شوند. دمای انتهای راست دیواره، T_R، بزرگ‌تر از دمای دیواره در انتهای چپ، T_L، است. برای ثابت نگه داشتن دمای دیواره، سرعت دمایی ذرات جامد در دو باریکه انتهایی دیواره که دارای ضخامتی معادل 5 Å هستند به روش مقیاس‌بندی مجدد سرعت[3]، کنترل شده است [25]. عملیات نمونه‌برداری بعد از سپری شدن 1/2 نانوثانیه (زمان آسایش) از شروع حل آغاز شده است.

دبی لحظه‌ای عبوری ذرات از یک لوله، که راستای حرکت ذرات در آن در جهت x است را می‌توان به وسیله رابطه (2) محاسبه کرد [19،5].

$$\varphi(t) = \frac{1}{d}\sum_{i} v_{xi}(t) \qquad (2)$$

در رابطه (2)، v_{xi} سرعت ذره i ام در جهت x، t زمان و d طول لوله در جهت x است. این حاصل جمع بر روی تمام اتم‌هایی است که در لحظه t درون لوله واقع شده‌اند. دیمانسیون این دبی به صورت تعداد اتم بر واحد زمان است.

در تحلیل‌های آتی از توزیع فشار برای فهم مکانیزم جریان خزشی استفاده می‌شود. ارتباط میان مفاهیم آماری و مولفه‌های تانسور تنش محلی در کار ایروینگ و کرکوود شرح داده شده است [26]. فشار محلی با استفاده از یک مکعب بسیار کوچک و نیرویی که هر یک از وجوه این مکعب در جهات مختلف مختصاتی احساس می‌کند، تعریف می‌شود. این تعریف از فشار برای یک نقطه در فضا در محاسبات کامپیوتری تا حدودی تقریبی است زیرا برای محاسبه این کمیت نیاز است که متوسط‌گیری روی یک حجم کوچک و روی یک زمان شبیه‌سازی خاص (که در حد بی‌نهایت میل می‌کند) انجام شود.

1- Boltzmann Constant

2- Lorentz–Berthelot mixing rule
3- Rescaling

Archive of SID
www.SID.ir

هنگامی که طول اضلاع سطوح این حجم بزرگ‌تر یا برابر با محدوده برهمکنشی ذرات باشند، برهمکنش‌ها به خوبی مورد محاسبه قرار می‌گیرند و متوسط‌گیری زمانی روی بازه‌های زمانی کوچک‌تر کافی خواهد بود. اما اگر طول اضلاع سطوح کوچک‌تر از محدوده برهمکنشی ذرات باشد، ممکن است که طبیعت این برهمکنش‌ها به خوبی مورد محاسبه قرار نگیرد و برای حصول نتیجه دقیق‌تر و پرهیز از نوسانات بزرگ، استفاده از بازه‌های زمانی بزرگ در متوسط‌گیری آماری توصیه شود. در شبیه‌سازی حاضر سعی شده است که بازه متوسط‌گیری در محاسبه فشار، به مقدار قابل قبولی افزایش داده شود (3 میلیون گام زمانی) به طوری که اگر بازه متوسط گیری را از این مقدار بیشتر کنیم تغییری در محاسبات مربوط به فشار به وجود نمی‌آید. نیروی دخیل در محاسبه مربوط به تانسور فشار و در نتیجه مولفه‌های تانسور فشار به طور معمول از دو بخش تشکیل می‌شود. بخش اول مربوط به سهم جنبشی (سینتیک) است که از سرعت اتم‌ها ناشی می‌شود و بخش دوم مربوط به سهم نیروهای بین ذره‌ای است. جزئیات مربوط به نحوه به دست آوردن هر یک از این سهم‌ها را می‌توان در مرجع [26] یافت. هر یک از مولفه‌های تانسور تنش برای هر اتم به صورت رابطه (3) محاسبه می‌شود.

$$S_{\alpha\beta} = -\left[m v_\alpha v_\beta + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N_p}\left(r_{1\alpha}F_{1\alpha} + r_{2\beta}F_{2\beta}\right)\right] \qquad (3)$$

در رابطه (3)، α و β نشان دهنده مولفه‌ها در راستای α و β هستند و جمله اول مربوط به سهم انرژی جنبشی یک ذره با جرم m است. جمله دوم در عبارت بالا مشارکت انرژی اندرکنش دوگانه ذرات در محاسبه فشار را نشان می‌دهد. این جمله جمع جبری‌ای است که روی همه N_p ذرات واقع شده در همسایگی ذره مد نظر انجام می‌شود. F_1 و F_2 نیروهایی هستند که از برهمکنش دوگانه (جفتی) حاصل می‌شوند. با توجه به تعریف بالا روشن می‌شود که $S_{\alpha\beta}$ واحدی به صورت تنش (فشار) ضرب در حجم دارد که این حجم حجم ذره است. البته حجم ذره را نمی‌توان به سادگی محاسبه کرد اما اگر عمل متوسط‌گیری برای تانسور تنش برای تعدادی از ذرات که به‌صورت متوسط در طول زمان ناحیه مشخصی از فضا را اشغال می‌کنند انجام شود، می‌توان با تقسیم $S_{\alpha\beta}$ بر حجم این ناحیه مجموع مولفه‌های تانسور تنش برای این تعداد ذره مشخص را به‌دست آورد.

3- نتایج و تحلیل‌ها

در این بخش به ارائه نتایج حاصل از شبیه‌سازی پدیده خزش گرمایی در نانو مجرایی استوانه‌ای شکل پرداخته می‌شود. این شبیه‌سازی‌ها چکیده تعداد زیادی آزمایش عددی هستند که برای فهم مکانیزم جریان خزش گرمایی مایعات در مقیاس نانو انجام شده‌اند. شناخته شدن مکانیزم رفتاری جریان خزش گرمایی برای ارائه طرح‌هایی در زمینه ساخت یا بهینه سازی عملکرد نانو پمپ‌های گرمایی می‌تواند موثر باشد.

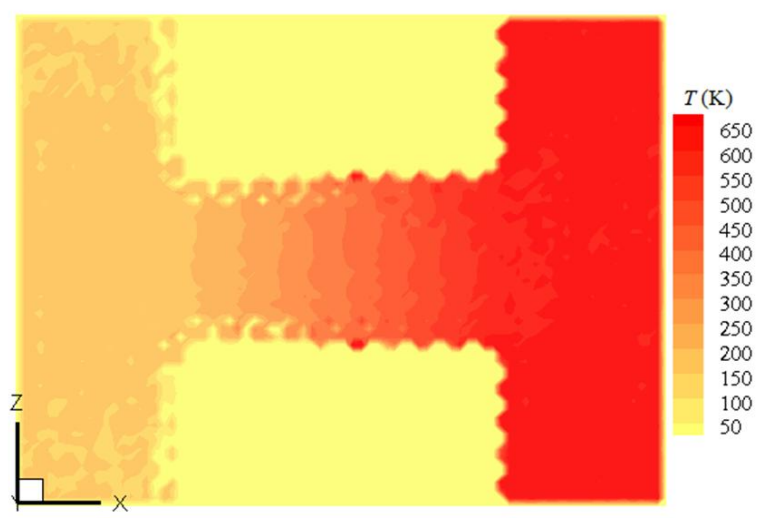
نتایج شبیه‌سازی‌ها در دو بخش ارائه می‌شود. در ابتدا به منظور کسب تصویر بهتری از این پدیده، مخازن دو طرف نانولوله به کمک دیواره‌های بدون اصطکاک بسته شده‌اند. پارامترهای برهمکنشی این دیواره‌ها مشابه جنس دیواره نانولوله است. در این حالت ارتباط میان مخازن با یکدیگر فقط از طریق نانولوله‌ی رابط برقرار است. پس از آن در قسمت بعد، دیواره‌های اطراف مخازن برداشته شده و ارتباط بین این مخازن از طریق مرزهای پریودیک برقرار شده و شرایط ایجاد یک جریان دائمی با استفاده از گردایان دما مورد بررسی قرار می‌گیرد.

3-1- اثرات خزش گرمایی بین دو مخزن بسته

در این قسمت نتایج مربوط به شبیه‌سازی رفتار آرگون مایعی که در دو مخزن بسته قرار دارد مورد بحث قرار می‌گیرد. این دو مخزن به وسیله یک مجرای رابط استوانه‌ای شکل که دارای گرادیان دمایی است، به یکدیگر متصل هستند. دو سر مجرای رابط در دماهای متفاوتی قرار دارد، به صورتی که با توجه به شکل 1، در سمت چپ در دمای 100 کلوین و در سمت راست در دمای 500 کلوین نگه داشته می‌شود.

شکل 2 توزیع دمای سیال را در مقطع y=0 ،پس از به تعادل رسیدن روند حل، به طور نمونه برای وقتی که شعاع مجرای رابط 11/5 آنگستروم است، نشان می‌دهد. توزیع دما برای سایر شعاع‌های رابط مشابه شکل 2 بوده و برای رعایت اختصار نشان داده نمی‌شوند. توزیع دمای جامد در این شکل نشان داده نشده است. از این شکل دیده می شود که مخزن سمت راستی در دمایی در حدود 500 کلوین و مخزن سمت چپ در دمایی در حدود 100 کلوین قرار دارد. نکته ای که در این شکل دیده می‌شود، این است که متوسط دمای مخازن مقداری بیش از دمای دیواره جامد مجاور با آن است. این موضوع را می‌توان به ساکن بودن سیال در مخازن نسبت داد. با این توضیح که ذراتی از سیال که در مجاورت دیواره جامد قرار می‌گیرند، به واسطه برخوردهای مکرر با این دیواره‌ها که دمای آن‌ها به وسیله ترموستات گذاری ثابت نگه داشته می‌شود دمایی نزدیک به دمای دیواره خواهند داشت اما ذراتی از سیال که درون مخزن و در ناحیه دورتری نسبت به دیواره واقع هستند، به دلیل عدم امکان حرکت توده‌ای و ارتباط ضعیف با نواحی ترموستات گذاری شده، در دمای بالاتری قرار می‌گیرند.

به دلیل بسته بودن مخازن، دبی عبوری از مجرای رابط در همه حالات صفر است. اما بررسی فشارِ متوسط مخازن پس از به تعادل رسیدن مساله، نشان می‌دهد که فشار مخازن با یکدیگر برابر نیست. اگر فشار مخزن سرد را P_1 و فشار مخزن گرم را P_2 بنامیم اختلاف فشار بی بعد بین دو مخزن یعنی $(P_2-P_1)/P_1$) برای مخازن متصل شده به وسیله مجراهایی با شعاع 7/5، 11/5، 16/5 و 22/5 آنگستروم به ترتیب 0/33، 0/16، 0/13 و 0/08 به دست می‌آید. یعنی در همه حالات فشار مخزن گرم بیش از مخزن سرد است و با افزایش شعاع مجرا اختلاف فشار بین دو مخزن کم می‌شود. وجود اختلاف فشار بدون وجود جریان، نشان دهنده این است که نیروی دیگری در تعادل با این اختلاف فشار قرار گرفته است. این نیرو همان چیزی است می‌تواند سبب ایجاد جریان خزش گرمایی شود. در واقع می‌توان گفت که وجود گرادیان



شکل 2 توزیع دمای سیال برای مخازن بسته در صفحه y=0 وقتی که شعاع مجرای رابط 11/5 آنگستروم است.

Archive of SID
www.SID.ir

دمایی در داخل لوله و اختلاف دمای سیال میان دو مخزن سبب تمایل سیال به حرکت آن به سمت مجرای گرم می‌شود. بنابراین در ابتدا که فشار دو مخزن به یک اندازه است مقداری از سیال تحت تاثیر تمایل مذکور به سمت مخزن گرم حرکت می‌کند. این موضوع سبب افزایش فشار منبع گرم می‌شود. این افزایش فشار تا وقتی که اثرهای خزش گرمایی و اختلاف فشار بین دو مخزن به تعادل برسند ادامه می‌یابد. همچنین همان‌گونه که از روند اختلاف فشار بین مخازن مشخص است، با افزایش قطر مجرا اثرهای مربوط به خزش گرمایی کمتر می‌شود. یعنی انتظار می‌رود که با ادامه یافتن این روند اثرهای مربوط به خزش گرمایی در مسائل ماکرو ناچیز باشد. این مساله با تجربه روزمره ما همخوانی دارد. یعنی اگر دو مخزن حاوی مایع که در دماهای متفاوتی نسبت به یکدیگر هستند به وسیله یک ماکرو مجرا به یکدیگر متصل شوند، بین آن‌ها هیچ اختلاف فشاری به وجود نمی‌آید.

همان‌گونه که در قسمت مقدمه عنوان شد، وجود اثر خزش گرمایی و ایجاد اختلاف فشار بین دو مخزن که حاوی گازهای رقیق دماهای متفاوتی هستند، قبلا به وسیله محققان اثبات شده بود. شبیه‌سازی‌های بالا نشان داد که اثر خزش گرمایی می‌تواند برای مایعاتی که در نانو مجراها محدود شده‌اند نیز امکان‌پذیر باشد. در بخش آتی با باز کردن مخازن و ارتباط برقرار کردن بین آن‌ها از طریق مرزهای پریودیک، امکان وجود جریان خزش گرمایی و علت ایجاد چنین جریانی مورد بررسی قرار می‌گیرد.

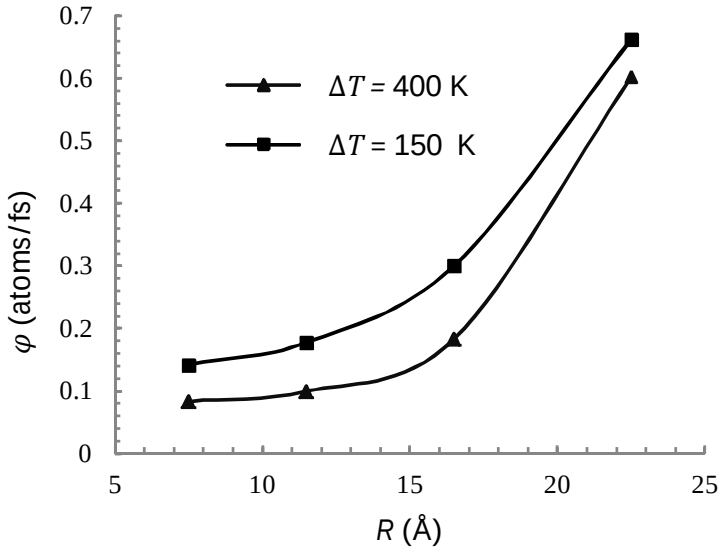
3-2- جریان خزش گرمایی از میان نانولوله

در این بخش به ارائه نتایج شبیه‌سازی‌هایی که در آن‌ها دیواره‌های اطراف مخازن برداشته شده و امکان ارتباط بین دو مخزن از طریق مرزهای پریودیک فراهم می‌شود پرداخته خواهد شد. وجود مرزهای پریودیک در اطراف مخازن به این معنی است که هر ذره‌ای که از یکی از وجوه جعبه محاسباتی خارج می‌شود درست با سرعت مساوی از وجه مقابل وارد محدوده محاسباتی خواهد شد. یکی از نتایج این شرط مرزی این است که فشار دو مخزن با یکدیگر مساوی شده و نیز دمای دو مخزن نسبت به حالت قبل به یکدیگر نزدیک‌تر می‌شود. یعنی دمای مخزن گرم مقداری پایین آمده و دمای مخزن سرد مقداری بالا می‌رود. البته سیالی که در محدوده نانولوله واقع می‌شود به واسطه گرادیان دمایی اعمال شده به نانولوله دارای گرادیان دما خواهد بود. این واقعیت‌ها را می‌توان در شکل توزیع دما مشاهده کرد. بررسی توزیع دما نشان می‌دهد که شکل توزیع دما برای هر چهار مجرای مورد بررسی از یک الگو پیروی می‌کند. شکل 3 به صورت نمونه توزیع دما را برای وقتی که شعاع مجرای رابط 11/5 آنگستروم است نشان می‌دهد.

از آن‌جا که ارتباط دو مخزن با برداشتن دیواره‌های اطراف آن‌ها و از طریق مرزهای پریودیک برقرار شده است، مخازن با یکدیگر هم‌فشار شده‌اند. بنابراین انتظار می‌رود که نیروهای ناشی از خزش گرمایی، که وجود آن‌ها در نانولوله در قسمت پیشین (قسمت 3-1) اثبات شد، سبب ایجاد جریانی در مجرای رابط بین دو مخزن شوند. مقدار این جریان طبق نتایج شبیه‌سازی‌های انجام شده، برای چهار مساله مورد بررسی یعنی برای وقتی که شعاع مجراهای رابط 7/5، 11/5، 16/5 و 22/5 آنگستروم باشد در نمودار شکل 4 آمده است.

از نمودار شکل 4 به خوبی مشخص است که در نانولوله‌ای که در دوسر آن اختلاف دما وجود دارد، در اثر پدیده خزش گرمایی، جریانی ایجاد می‌شود. مقدار این جریان مثبت است و این بدان معنی است که جریان در جهت مثبت محور مختصاتی x به حرکت در آمده است. این یعنی جهت شارش

شکل 3 توزیع دمای سیال در صفحه y=0 وقتی که شعاع مجرای رابط 11/5 آنگستروم است و ارتباط مخازن از طریق مرزهای پریودیک برقرار شده است.



شکل 4 دبی ایجاد شده در لوله دارای گرادیان دما، برحسب اتم بر فمتو ثانیه به ازاء شعاع‌های مختلفی از مجرا و به ازاء اختلاف دماهای متفاوتی از دوسر لوله

جریان از سمت سرد به سمت گرم است. این نتیجه (در محدوده قدرت تقابل سیال – جامد مورد بررسی) در تطابق کیفی با نتیجه‌ای است که برای جریان خزش گرمایی از میان کانال متشکل از دو صفحه موازی، توسط لیو و همکاران [27] به دست آمده است. همان‌طور که از شکل 4 دیده می‌شود مقدار این جریان، برای وقتی که گرادیان دمای بیشتری در امتداد لوله وجود دارد بیشتر می‌شود. همچنین هنگامی که شعاع لوله بیشتر می‌شود، دبی ایجاد شده نیز افزایش می‌یابد.

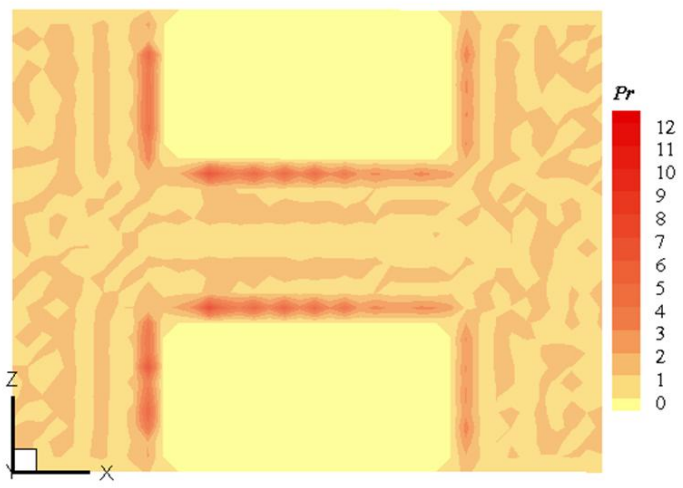
در قسمت قبل (خزش گرمایی بین دو مخزن بسته)، مشخص شد که هنگامی که قطر لوله افزایش می‌یابد، اختلاف فشار بین دو مخزنِ بسته کم شده و در نتیجه اثرهای خزش گرمایی کم می‌شود. بنابراین افزایش یافتن دبی در قطرهای بیشتر در شکل 4، نه به علت افزایش اثرهای مربوط به خزش گرمایی، بلکه تنها به خاطر افزایش اندازه سطح مقطع جریان است.

برای بررسی علت پدیده خزش گرمایی، توجه خود را به وضعیت توزیع فشار در داخل نانولوله معطوف می‌کنیم. همان‌طور که می‌دانیم در جریان‌هایی که در هندسه‌هایی با ابعاد نانو محدود شده‌اند، دیواره‌ها نقش مهمی در رفتار سیال ایفا می‌کنند. این دیواره‌ها ممکن است سبب ایجاد ناهمگونی در توزیع فشارِ داخل مجرا شوند. اگر فشار هر نقطه با P و فشار متوسط مخزن سرد با P_1 نشان داده شود، توزیع فشار بی بعد، P_r، به صورت $((P-P_1)/P_1)$ تعریف می‌شود. شکل 5 توزیع فشار بی‌بعد، P_r، را درون نانولوله‌ای با شعاع 11/5 آنگستروم نشان می‌دهد. نمودار توزیع فشار بی بعد درون نانولوله‌هایی با شعاع‌های دیگر نیز به صورت کیفی مشابه شکل 5 است. از توزیع فشار شکل

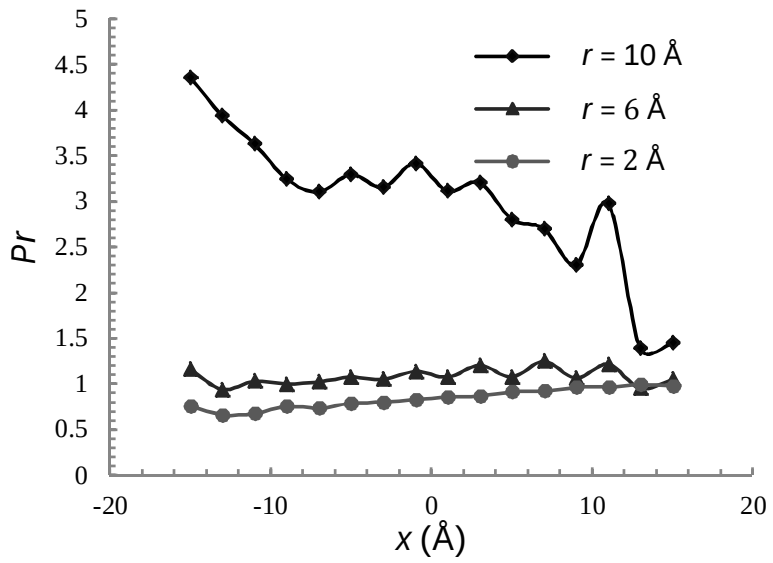
Archive of SID
www.SID.ir

5 دیده می‌شود که وضعیتِ فشار سیال در لایه نازکی از ناحیه کناره دیواره با سایر نقاط سیال متفاوت است. به جهت وضوح بیشتر، نمودار تغییر فشار بی‌بعد در راستای طول مجرا، برای مجرای 11/5 آنگسترمی در شکل 6 رسم شده است. در این شکل توزیع فشار در راستای طول برای سه ناحیه نواری شکل رسم شده است. این نواحی نواری شکل به صورت استوانه‌هایی با ضخامت 2 آنگسترم هستند. محور این استوانه‌ها هم‌راستا با محور مجرا است. نمودار مذکور برای سه ناحیه نواری استوانه‌ای شکل که فاصله شعاعی مراکز هر یک از آن‌ها نسبت به محور مرکزی 2، 6 و 10 آنگسترم است رسم شده است. همان‌گونه که از نمودار شکل 6 نیز دیده می‌شود، فشار سیال در ناحیه نزدیک به دیواره (با شعاع 10 آنگسترم) متفاوت با بقیه نواحی است. در این ناحیه اولا فشار سیال، تحت تاثیر دیواره مجرا، بالاتر از سایر مکان‌هاست. ثانیا فشار این ناحیه حالت تقریبا نوسانی دارد. ثالثا در خود این ناحیه نیز فشار سیال، به صورت متوسط در راستای طول مجرا تغییر می‌کند. تغییر فشار این ناحیه به گونه‌ای است که متوسط فشار در سمت سرد بیش از متوسط آن در سمت گرم است. به نظر می‌رسد که همین تفاوت فشار در راستای گرادیان دما در نزدیکی دیواره، عامل اصلی رانش سیال در جریان خزش گرمایی است. یعنی بیشتر بودن فشارِ سمت سرد در مقایسه با سمت گرم در نزدیکی دیواره سبب ایجاد یک نیروی رانش در سیال شده و سیال را از سمت سرد به سمت گرم هل می‌دهد. از آن‌جا که عامل رانش سیال در جریان خزش گرمایی مربوط به ناحیه نازک کنار دیواره می‌شود، نیروی رانش سیال ماهیتی سطحی و نه حجمی دارد [28]. از آن‌جا که نسبت سطح به حجم در مقیاس نانو در قیاس با این نسبت در مقیاس ماکرو بیشتر است، این نیروهای سطحی در مقیاس نانو اهمیت بیشتری دارند. به همین دلیل پدیده خزش گرمایی در سیالات چگال، فقط در مقیاس‌های نانو مشاهده می‌شود.

از آن‌جا که در مقیاس مولکولی، فشار، علاوه بر دما (انرژی جنبشی) با چگالی و پتانسیل بین مولکولی (که فاصله بین مولکولی در میزان آن نقش تعیین کننده‌ای دارد) ارتباط دارد [16]، بررسی توزیع چگالی (که نماینده توزیع فاصله بین مولکولی است) اطلاعات ارزشمندی را در اختیار ما خواهد گذاشت. شکل‌های 7 و 8 توزیع چگالی عددی سیال، n_{Ar}، را برای دو شعاع یعنی شعاع‌های 11/5 و 22/5 آنگسترم از نانولوله‌های بررسی شده نشان می‌دهد. در هر دو شکل اختلاف دمای دو سر مجرای رابط 400 کلوین است. از دقت در این دو شکل چند نکته حاصل می‌شود. اول این‌که ذرات سیالِ درون مجرای رابط ساختاری لایه لایه به خود گرفته‌اند. این ساختار لایه‌ای شکل در نزدیکی دیواره از وضوح و شدت بیشتری برخوردار است. وجود ساختار لایه‌ای در جریان‌های نانومقیاس امری ثابت شده است و به علت تقابل سیال– دیواره ایجاد می‌شود [20].

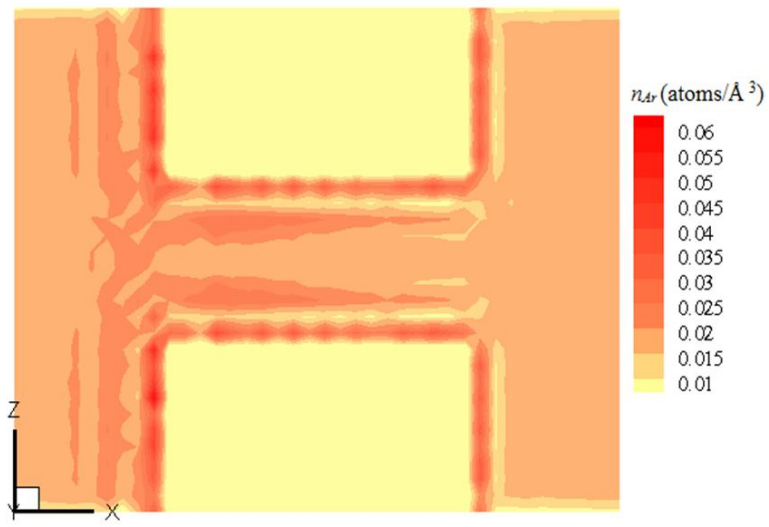


شکل 5 توزیع فشار بی‌بعد سیال در صفحه y=0 وقتی که شعاع مجرای رابط 11/5 آنگسترم است و ارتباط مخازن از طریق مرزهای پریودیک برقرار شده است.

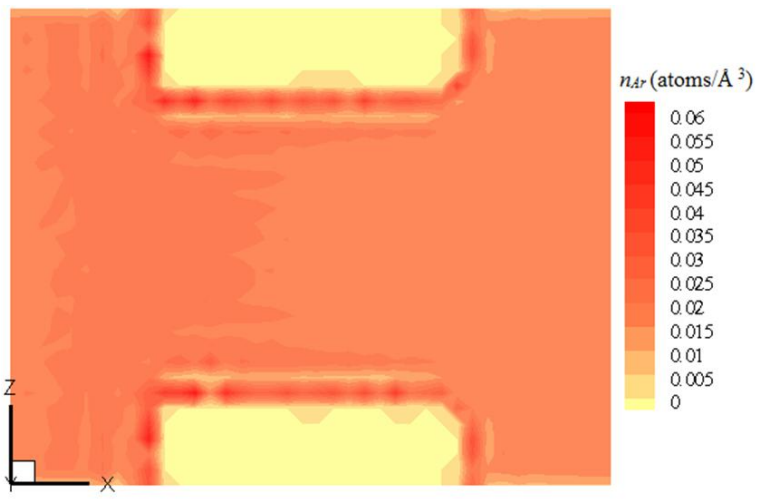


شکل 6 توزیع فشار بی بعد سیال در راستای x در فواصل شعاعی مختلف نسبت به محور مجرا، برای مجرای رابط با شعاع 11/5 آنگسترم.

در حقیقت ذرات سیالِ کنار دیواره تحت اثر پتانسیل ذرات جامد تمایل دارند که آرایشی شبیه به ذرات جامد به خود بگیرند. به همین دلیل است که اگر توزیع پتانسیل مولکولی رسم شود، دیده می‌شود که قله‌ها و چاه‌های پتانسیلی در نواحی جریان و مخصوصا کناره‌های دیواره به وجود می‌آید [27]. این قله‌ها و چاه‌ها به صورت منظم و در لایه‌های مجزایی کنار یکدیگر قرار می‌گیرند. تمایل ذرات سیال به این است که در نواحی با پتانسیل کمتر یعنی چاه‌های پتانسیلی قرار گیرند. به همین علت است که در توزیع‌های چگالی‌ای که در شکل‌های 7 و 8 دیده می‌شوند، لایه‌های دارای چگالی کم و لایه‌های دارای چگالی زیاد به وجود می‌آیند. هر چه از دیواره فاصله بیشتری گرفته شود، تاثیر دیواره‌ها کم شده و این لایه‌ها وضوح کمتری پیدا کرده و نهایتا از بین می‌رود. همچنین از شکل‌های توزیع چگالی دیده می‌شود که در کناره‌ی دیواره‌ی جامد، هرچه به سمت گرم پیش می‌رویم از شدت نوسانات چگالی کاسته شده و در کل نیز چگالی یکنواخت‌تری خواهیم داشت. در حقیقت می‌توان گفت که ساختار لایه لایه‌ای سیال در سمت سرد برجسته‌تر است.



شکل 7 توزیع چگالی سیال برای حالتی که مجرای رابط شعاع 11/5 آنگسترم دارد.



شکل 8 توزیع چگالی سیال برای حالتی که مجرای رابط شعاع 22/5 آنگسترم دارد.

Archive of SID
www.SID.ir

علت این موضوع را می‌توان به ازدیاد سرعت جنبشی دمایی ذرات سیال در دماهای بالاتر نسبت داد. وقتی ذرات دارای سرعت جنبشی زیادتری هستند می‌توانند از تاثیر پتانسیل دیواره فرار کرده و در لایه‌های پتانسیلی‌ای که توسط دیواره به سیال تحمیل می‌شود قرار نگیرند. از آن‌جا که فشار در مقیاس مولکولی به پتانسیل بین مولکولی [16] و پتانسیل بین مولکولی به فاصله بین اتمی و فاصله بین اتمی به توزیع چگالی مرتبط است، رفتارهای مشاهده شده در توزیع چگالی می‌تواند مهمترین عامل برای تغییر فشار و ایجاد نیروی خزش گرمایی باشد [29]. در واقع سیال در نزدیکی دیواره تحت تاثیر نیروهای ناشی از دیواره قرار دارد و می‌توان گفت که دیواره باعث نظم ذرات سیال در این ناحیه و افزایش چگالی سیال در این ناحیه شده است. افزایش چگالی سیال در این ناحیه به معنای کاهش فاصله بین مولکولی است. کاهش فاصله بین مولکولی به معنای افزایش نیروهای بین ذره ای و در نتیجه افزایش انرژی پتانسیل بین ذره‌ای است. از رابطه (3) که مربوط به محاسبه فشار است، دیده می‌شود که افزایش انرژی پتانسیل بین ذره‌ای سبب افزایش جمله‌ی دوم سمت راست تساوی و در نتیجه افزایش فشار می‌شود. در حقیقت همین موضوع است که سبب افزایش فشار در نواحی نزدیک به دیواره شده است. از اینجا می‌توان فهمید که در نواحی نزدیک به دیواره سهم انرژی پتانسیل بین ذره‌ای (یعنی جمله دوم سمت راست تساوی در رابطه 3) غالب است. حال اگر همین ناحیه نازک کنار دیواره را مورد توجه قرار داده و تغییرات فشار در جهت طول نانولوله (یعنی جهت x) را در آن مورد بررسی قرار دهیم خواهیم دید که در جهت طول نانولوله با تغییر دما مواجه هستیم. از آن‌جا که در دماهای بالاتر ذرات سیال انرژی جنبشی بیشتری دارند، می‌توانند از چاه‌های پتانسیلی که از طرف دیواره بر سیال تحمیل شده بگریزند. به بیان دیگر، چون انرژی جنبشی ذرات سیال در سمت گرم مجرا بیشتر است، این ذرات کمتر تحت تاثیر نظم تحمیل شده از طرف دیواره قرار می‌گیرند. به همین دلیل است که پدیده لایه لایه شدن سیال، در سمت گرم تضعیف می‌شود. تضعیف شدن نظم لایه‌ای سیال در سمت گرم و در کناره دیواره به معنای افزایش فاصله بین مولکولی در ذرات سیال و کاهش انرژی پتانسیل بین مولکولی است. این مساله، طبق رابطه (3)، سبب کاهش فشار سیال در ناحیه گرم خواهد شد. به طور خلاصه طبق رابطه (3)، در نواحی نزدیک دیواره، پدیده لایه‌ای شدن سبب افزایش فشار می‌شود اما این افزایش فشار در سمت سرد مجرا بیش از سمت گرم آن است. بنابراین در مجموع، در کناره دیواره فشارِ سمت سرد بیش از فشار سمت گرم است. درنتیجه در کناره دیواره نیرویی از سمت سرد به گرم تولید می‌شود که سیال را به رانش وا می‌دارد.

توجه شود که به دلیل این‌که ذرات سیال در ناحیه حول محور مرکزی لوله، تحت تاثیر دیواره نیستند، سهم انرژی پتانسیل بین مولکولی در تعیین فشارِ این نواحی کم‌تر از نواحی نزدیک به دیواره است. یعنی انرژی جنبشی ذرات نیز سهم غیرقابل اغماضی در تعیین فشار دارد. بنابراین با افزایش دمای سیال، انرژی جنبشی ذرات سیال بیشتر شده و طبق رابطه (3)، به دلیل افزایش جمله اول در سمت راست تساوی، فشار سیال تمایل به افزایش پیدا می‌کند. افزایش ملایم فشار در نواحی مرکزی لوله، همزمان با پیشروی به سمت منطقه گرم، که در نمودار شکل 6 دیده می‌شود به همین دلیل است. این افزایش ملایم فشار نشان می‌دهد که افزایش دمای سیال بیش از آن‌که سبب کاهش سهم انرژی پتانسیل بین مولکولی شده باشد، سبب افزایش سهم انرژی جنبشی ذرات در تعیین فشار شده است.

نکته دیگری که از مقایسه میان شکل‌های 7 و 8 روشن می‌شود این است که ساختار لایه لایه‌ای در شکل 7 که مجرای رابط قطر کمتری دارد شدیدتر است. این امر به این دلیل است که در مجرای با قطرِ کمتر، سیال محدودتر است و بیشتر تحت تاثیر دیواره قرار دارد. به همین دلیل است که خزش گرمایی در مجراهای کوچک‌تر قوی‌تر است.

4- جمع‌بندی

در این پژوهش مساله‌ی ایجاد جریان به وسیله اعمال گرادیان دما (جریان خزش گرمایی) برای مایعات در مقیاس نانو مورد بررسی قرار گرفت. در پژوهش‌هایی که توسط سایر محققان انجام شده بود، وجود جریان خزش گرمایی در گازهای رقیق به اثبات رسیده بود. در پژوهش حاضر با استفاده از روش دینامیک مولکولی نشان داده شد که این جریان می‌تواند برای مایعات محدود شده در نانومجراها نیز وجود داشته باشد. در این پژوهش، با استفاده از جزئیاتی که روش دینامیک مولکولی در مورد توزیع فشار، دما و چگالی سیال در اختیار ما قرار داد مکانیزم پدیده خزش گرمایی در مایعاتِ محدود در نانومقیاس‌ها مورد کنکاش واقع شد. نشان داده شد که در اثر پدیده لایه لایه شدن سیال در کنار مجرای جامد و وجود گرادیان دما در دیواره جامد، یک عدم تعادل فشاری در کناره دیواره جامد پدید می‌آید. این عدم تعادل در فشارِ کنار دیواره، همانند یک نیروی سطحی عمل کرده و موجب رانش سیال از سمت سرد به سمت گرم و ایجاد جریان خزش گرمایی می‌شود. همچنین دیده شد که اثر خزش گرمایی با بیشتر شدن قطر نانولوله کم می‌شود.

5- فهرست علائم

d	طول نانولوله (Å)
F	نیروی بین ذره‌ای
k_B	ثابت بولتزمن (J/K)
m	جرم یک ذره
n	چگالی عددی (atoms/Å 3)
N_p	تعداد ذرات واقع در همسایگی یک ذره
P_r	فشار بی بعد
R	شعاع نانولوله (Å)
r_c	شعاع قطع (Å)
r_{ij}	فاصله بین ذره‌ای
S	مولفه تانسور تنش
t	زمان (fs)
T	دما (K)
ΔT	اختلاف دمای دو سر نانولوله (K)
v	سرعت ذره (Å/fs)
x, y, z	جهت‌های مختصاتی

علائم یونانی

$\emptyset$	پتانسیل بین ذره‌ای (J)
ε	عمق چاه پتانسیل (J)
σ	فاصله شعاعی از مرکز ذره در پتانسیل صفر (Å)
φ	دبی عبوری ذرات از نانولوله (atoms/fs)

زیرنویس‌ها

Ar	آرگون
L	سمت چپ

Archive of SID
www.SID.ir

R سمت راست

sf جامد - سیال

w دیواره

α هر یک از راستاهای مختصاتی

β هر یک از راستاهای مختصاتی

6- تقدیر و تشکر

در این‌جا نویسنده اول بر خود لازم می‌داند مراتب تقدیر و تشکر خود را از راهنمایی‌های آقای دکتر احمد رضا پیشه‌ور استاد دانشکده مهندسی مکانیک از دانشگاه صنعتی اصفهان اعلام دارد.

7- مراجع

[1] J. L. Perry, S. G. Kandlikar, Review of fabrication of nanochannels for single phase liquid flow, *Microfluidics and Nanofluidics,* Vol. 2, No. 3, pp. 185-193, 2006.

[2] H. G. Craighead, Nanoelectromechanical systems, *Science,* Vol. 290, No. 5496, pp. 1532-1535, 2000.

[3] J. Sun, Y. L. He, W. Q. Tao, Scale effect on flow and thermal boundaries in micro-/nano-channel flow using molecular dynamics–continuum hybrid simulation method, *International journal for numerical methods in engineering,* Vol. 81, No. 2, 207-228, 2010.

[4] W. Sparreboom, A. Van Den Berg, J. C. T. Eijkel, Transport in nanofluidic systems: a review of theory and applications, *New Journal of Physics,* Vol. 12, No. 1, 015004, 2010.

[5] M. Chinappi, E. De Angelis, S. Melchionna, C. M. Casciola, S. Succi, R. Piva, Molecular dynamics simulation of ratchet motion in an asymmetric nanochannel, *Physical review letters,* Vol. 97, No. 14, 144509, 2006.

[6] Y. Li, J. Xu D. Li, Molecular dynamics simulation of nanoscale liquid flows, *Microfluid nanofluid,* Vol. 9, pp. 1011–1031, 2010.

[7] O. Reynolds, On certain dimensional properties of matter in the gaseous state. Part I. Experimental researches on thermal transpiration of gases through porous plates and on the laws of transpiration and impulsion, including an experimental proof that gas is not a continuous plenum. Part II. On an extension of the dynamical theory of gas, which includes the stresses, tangential and normal, caused by a varying condition of gas, and affords an explanation of the phenomena of transpiration and impulsion, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London,* Vol. 170, pp. 727-845. 1879.

[8] J. C. Maxwell, On stresses in rarified gases arising from inequalities of temperature, *Philosophical Transactions of the royal society of London,* Vol. 170, pp. 231-256, 1879.

[9] M. Knudsen, Eine revision der gleichgewichtsbedingung der gase. Thermische molekularströmung, *Annalen der Physik,* Vol. 336, No. 1, pp. 205-229, 1909.

[10] A. Beskok, W. Trimmer, G.E. Karniadakis, Rarefaction, Compressibility and Thermal Creep Effects in Micro-Flows, *Proceedings of the ASME IMECE Meeting Dynamic Systems and Control Division DSC,* Vol. 57, No. 2, pp. 877-892, 1995.

[11] S. E. Vargo, E. P. Muntz, G. R. Shiflett, W. C. Tang, Knudsen compressor as a micro-and macroscale vacuum pump without moving parts or fluids, *Journal of Vacuum Science & Technology A,* Vol. 17, No. 4, pp. 2308-2313, 1999.

[12] J. Liu, N. K. Gupta, K. D. Wise, Y. B. Gianchandani, X. Fan, Demonstration of motionless Knudsen pump based micro-gas chromatography featuring micro-fabricated columns and on-column detectors, *Lab on a Chip*,Vol. 11, No. 20, pp. 3487-3492, 2011.

[13] S. Takata, H. Sugimoto, S. Kosuge, Gas separation by means of the Knudsen compressor, *European Journal of Mechanics-B/Fluids,* Vol. 26, No.2, pp. 155-181, 2007.

[14] Y. Sone, Flows induced by temperature fields in a rarefied gas and their ghost effect on the behavior of a gas in the continuum limit, *Annual review of fluid mechanics,* Vol. 32, No. 1, pp. 779-811, 2000.

[15] M. Han, Thermally-driven nanoscale pump by molecular dynamics simulation, *Journal of Mechanical Science and Technology,* Vol. 22, No. 1 pp. 157-165, 2008.

[16] C. Liu, Z. Li, Molecular dynamics simulation of composite nanochannels as nanopumps driven by symmetric temperature gradients, *Physical review letters,* Vol. 105, No. 17, 174501, 2010.

[17] X. Song, J. K. Chen, A comparative study on Poiseuille flow of simple fluids through cylindrical and slit-like nanochannels, *International Journal of Heat and Mass Transfer,* Vol. 51, pp. 1770-1779, 2008.

[18] Y. Li, J. Xu, D. Li, Molecular dynamics simulation of nanoscale liquid flows, *Microfluid Nanofluid,* Vol. 9, No, 6, pp. 1011–1031, 2010.

[19] M. Sahebi, A. R. Azimian, Molecular dynamics investigation of the flow rate from an asymmetric nanochannel, in *The 22th Annual International Conference on Mechanical Engineering,* Ahwaz, Iran, 2014. (In Persian)

[20] M. Sahebi, A. R. Azimian, Effect of some geometrical characteristics of asymmetric nanochannels on acceleration-driven flow, *Microfluidics and Nanofluidics,* Vol. 18, No. 5-6, pp. 1155-1163, 2015.

[21] C. Liu, Z. Li, Flow regimes and parameter dependence in nanochannel flows, *Physical Review,* Vol. 80, pp. 1-5, 2009.

[22] F. Sofos, T. Karakasidis, A. Liakopoulos, Transport properties of liquid argon in krypton nanochannels: anisotropy and non-homogeneity introduced by the solid walls, *International Journal of Heat and Mass Transfer*,Vol. *52, No.*3, pp. 735-743, 2009.

[23] P. M. Agrawal, B. M. Rice, D. L. Thompson, Predicting trends in rate parameters for self-diffusion on FCC metal surfaces, *Surface Science,* Vol. 515, No. 1, pp. 21-35, 2002.

[24] P. Balbuena, J. M. Seminario, (Eds.). *Molecular dynamics: from classical to quantum methods* ,Vol. 7, Amsterdam: Elsevier, 1999.

[25] S. Jalili, *Computer Simulations (Molecular Dynamics and Monte Carlo),* Tehran: Khaje Nasir Toosi University, 2007. (In Persian)

[26] J. H. Irving, , J. G. Kirkwood, The statistical mechanical theory of transport processes. IV. The equations of hydrodynamics, *The Journal of chemical physics,* Vol. 18, No. 6, pp. 817-829, 1950.

[27] C. Liu, Y. Lv, Z. Li, Fluid transport in nanochannels induced by temperature gradients, *The Journal of chemical physics,* Vol. 136, No. 11, 114506, 2012.

[28] M. S. Han, Thermal Transpiration of Liquid in Nanoscale Channel: A Molecular Dynamics Simulation Study, *Key Engineering Materials,* Vol. 364, pp. 879-884, 2008.

[29] J. F. Thekkethala, S. P. Sathian, Thermal transpiration through single walled carbon nanotubes and graphene channels, *The Journal of chemical physics,* Vol. 139, No. 17, 174712, 2013.

Archive of SID

www.SID.ir