

تأثیر هندسه زبری دیواره نانوکانال در رفتار جریان پوازیه نانوسیال آب-مس

محمد میثم امراللهی پورشیرازی^{۱*}، داود طغرای^۲، احمدرضا عظیمیان^۳

* نویسنده مسئول: mohammad.amrolahi@iaukhsh.ac.ir

چکیده

رفتار جریان داخل نانوکانالها با توجه به گسترده شدن کاربردهای آنها در سیستم‌های نوین از اهمیت زیادی برخوردار است. با توجه به نتایج بدست آمده در این تحقیق شرط عدم لغزش روی دیواره نانوکانال، شرط قابل قبولی نیست زیرا لغزش در این ابعاد به پارامترهای متفاوتی از جمله زبری سطح دارد. در این تحقیق با ثابت نگه داشتن مساحت جانبی زبری، اثر تغییر شکل آن بر روی رفتار جریان سیال بررسی شده است. مدل‌سازی به کمک نرم‌افزار متن باز لِمَس با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تعادلی انجام شده است. برخلاف تحقیقات گذشته، از نانوسیال موجود در شرایط آزمایشگاهی مانند آب-مس استفاده شده است. نتایج بدست آمده نشان از بیشترین تأثیر گذاری زبری مستطیلی و کمترین تأثیر گذاری زبری مثلثی بر رفتار جریان دارد و در نتیجه لغزش در نانوکانال با زبری مثلثی با شدت بیشتری رخ می‌دهد. وجود زبری روی سطح باعث افزایش تعداد نوسانات در لایه های سیال می‌شود ولی دامنه نوسان در نزدیکی دیواره صاف نسبت به زبر افزایش یافته است. حضور نانوذرات نیز باعث افزایش این اثر گذاری بر خواص جریان می‌شود.

واژه‌های کلیدی

شبیه سازی دینامیک مولکولی، نانوسیال، آب-مس، رفتار دینامیکی جریان

۱- کارشناس ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد خمینی شهر

۲- استادیار، دانشکده مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد خمینی شهر

۳- استاد، دانشکده مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد خمینی شهر

۱- مقدمه

مبحث نانوجریان و میکروجریان در طی دهه اخیر توسعه سریع تری داشته است. پدیده‌های گوناگونی در عمق ساختار نانوجریان وجود دارد که محققین به بسیاری از آنها دست یافته‌اند که بعضی از آنها به طور کامل با تئوری‌های مکانیک سیالات کلاسیک متفاوت است. نانوجریان‌ها کاربردهای گوناگونی خصوصاً در شیمی درمانی و شاخه بیومکانیک دارند. همچنین از آنها برای اهداف مختلفی مانند انتقال حرارت، جابجایی مواد و سوخت‌رسانی استفاده می‌کنند. به طور کلی نانوجریان به عنوان مطالعه حرکت سیال در گذار از ساختارهای یک یا چند بعدی با اندازه ۰ تا ۱۰۰ نانومتر تعریف می‌شود. برخی تحقیقات با استفاده از محرک‌های گوناگان جریان، به دنبال یافتن پدیده‌های جدید به هنگام رفتن به سوی ابعاد پایین‌تر از ابعاد ماکرو بودند که تعیین کننده خواص مکانیکی (مانند سرعت لغزش جریان) و یا رفتار الکتروشیمیایی بودند. عکس‌العمل سیال با دیوار به دلیل نسبت بالای سطح به حجم در سیستم‌های نانوجریان از جمله برجسته‌ترین عوامل است و به پدیده‌های منحصر به فرد در این ابعاد منجر می‌شود. همچنین به کمک نانوجریان‌ها ابزارهای جدیدی به منظور بررسی رفتار سیال در مقیاس نانو می‌توان تهیه کرد. در ضمن صحت روش‌های محاسباتی را که برای تحلیل پیوسته در ابعاد ماکروسکوپی به کار می‌رود را به کمک تشریح دینامیک ملکولی می‌توانیم تأیید کنیم. روش شبیه سازی دینامیک ملکولی، یک روش دقیق شبیه سازی سیستم‌های ملکولی بر مبنای قانون دوم نیوتن است و برای پیش‌بینی رفتار بین ذره‌ای به کمک مکانیک آماری به کار می‌رود.

در دهه گذشته تعداد موارد منتشر شده در مورد نانوجریان‌ها در هر دو سال تقریباً دو برابر شده است که این نشان از افزایش اهمیت و علاقه محققین به این موضوع است. در سال‌های اخیر چندین بازبینی^۱ در زمینه نانوجریان به چاپ رسیده است. [۱-۵]

شبیه سازی انتقال در نانوکanalها با جریان در میکروکانالها متفاوت است زیرا تغییرات در انتقال به سبب دیوار از اهمیت بیشتری برخوردار می‌شود و سیال نیز از تعداد ذرات کمتری تشکیل می‌شود. از آنجا که یک نانومتر مکعب از یک سیال مانند آب شامل کمتر از ۵۰ ذره آب است، گسسته بودن ذرات به هنگام تحلیل جریان نانوکanal مهم تر می‌شود. این بدان معنی است که شبیه سازی چنین سیستم‌هایی با استفاده از معادلات پیوستگی ممکن است ایجاد خطا کند و لازم است که هر ذره و عکس‌العمل‌های آن جداگانه مورد بررسی قرار گیرد. این کار با استفاده از شبیه سازی دینامیک ملکولی در جایی که تنها نیروی عکس‌العمل و اندروالسی و الکترواستاتیکی مورد توجه قرار می‌گیرد، می‌تواند انجام شود. بعد از کار آلدرد و وین‌رایت [۶] که جزء پیشگامان در این زمینه شناخته می‌شوند، تعداد انتشارات با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک ملکولی که تأثیرات قابل توجهی در تحلیل انتقال در نانوکanal داشت، افزایش عظیمی یافت. این افزایش دو علت داشت: اولاً تکنولوژی ساخت نانوکanalها در دهه اخیر کامل شد و ثانیاً، ظرفیت محاسباتی به صورت نمایی افزایش یافت، به گونه‌ای که توانایی شبیه سازی رفتار میلیون‌ها ذره به جای تحلیل رفتار چند صد ذره آلدرد و وین‌رایت را دارا بودند. به هر حال همانطور که سوئی و همکاران [۷] اشاره کردند، به هنگام تحلیل و بررسی انتقال سیال تفاوت بین مدل پیوسته و مدل گسسته کم است و معمولاً محدود به رفتار بی قاعده اولین لایه کم ذره مایع است. البته با اعمال شرایط مرزی لغزشی در دیواره نتایج بدست آمده از حل‌های تحلیلی به مقادیر عددی نزدیکتر شدند، اما همچنان اختلاف قابل توجهی در نتایج بدست آمده وجود داشت. با بررسی‌ها و مطالعات انجام شده روی جریان سیال در میکرو و نانو کانال‌ها با جنس و زبری نسبی متفاوت، دانشمندان متوجه تاثیر متفاوت و قابل توجه زبری سطح بر جریان در ابعاد میکرو و نانو شدند [۸].

¹ Review

این پژوهش شامل هندسه‌های شطرنجی مستطیلی و کروی است و تأثیر پارامترهای نیروی خارجی، نسبت چگالی سطح به سیال، ارتفاع زبری و فاصله بین المان‌های زبری مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج بدست آمده نشان داد که ارتفاع زبری و فاصله بین المان‌های زبری تأثیر قابل توجهی بر روی مشخصات جریان دارند. در واقع با افزایش ارتفاع زبری، سرعت لغزشی و حداکثر سرعت کاهش و میزان نوسانات چگالی افزایش می‌یابد. به علاوه کاهش فاصله بین المان‌های زبری کاهش سرعت جریان را به دنبال دارد. همچنین نتایج آنها نشان دادند که میزان نوسانات چگالی از هندسه زبری مستقل است.

لی جینگ و ون [۱۲] به تحقیق درباره نانوجریان آب پرداخته‌اند. آنها در این تحقیق موفق به ساخت یک سری نانوکانال الهام گرفته از طبیعت شدند. این محققان معتقدند که سطح داخلی این نانوکانال‌ها نقش اصلی را در انتقال محدود شده سیال در نانوکانال دارد.

طبیعت همیشه بهترین الهام بخش محققان برای ارائه فناوری‌های جدید است. ماحصل چهارمیلیارد سال تکامل، طبیعتی خلاق است که قادر به طراحی هوشمند است. برای مثال نانوکانال‌های موجود در بدن که می‌توانند نقش نقل و انتقال سیالات و مواد غذایی را به عهده بگیرند. آنها با استفاده از سطوح آب‌دوست، آب‌گریز اقدام به ساخت ساختارهای دو بعدی مختلفی کردند. آن‌ها در این مسیر از نانوکانال‌های موجود در سیستم‌های زیستی الهام گرفتند. البته این گروه تحقیقاتی روی ساخت سیستم‌های غیرآبی نیز انجام دادند و در نتیجه به دنبال ایجاد نانوکانال‌های روغن‌دوست و روغن‌گریز نیز بودند. آنها با هدف جمع‌آوری آب موجود در فضا، به دنبال جریان آب در نانومواد یک بعدی بودند. این کار در طبیعت توسط ساختارهایی نظیر تار عنکبوت و گیاه کاکتوس روی می‌دهد. این گروه تحقیقاتی روی ذرات آب محدود شده در نانوکانال‌های ساخته شده در آزمایشگاه انجام دادند. آنها علاوه بر این که به دنبال روش‌های ساخت این نانوکانال‌ها بودند، روی کاربردهای مختلف آن‌ها نیز تحقیق کردند.

در آزمایشگاه هیدرو مکانیک و مهندسی محیط زیست دانشگاه دسیلی^۱ یونان، ضریب پخش گرما و لزجت برشی آرگون مایع در نانوکانال به روش شبیه سازی دینامیک ملکولی غیرتعادلی مورد بررسی قرار گرفت. ضریب پخش گرمای موضعی به صورت قابل توجهی در لایه‌های نزدیک زبری سطح به سبب به دام افتادن ذرات سیال در فاصله بین زبری‌ها کاهش می‌یابد. تغییرات معنی دار در نزدیک دیواره زبر در این تحقیقات تأکید به انتخاب روش شبیه سازی به منظور طراحی دستگاه‌های استفاده کننده از نانوجریان‌ها دارد [۹].

تأثیر زبری و تخلخل در سطوح آب‌گریز و آب‌دوست نانوکانال بر توزیع سرعت جریان پوازیه در عرض کانال در تحقیقات کمالی و خوارزمی [۱۰] بررسی شده است. سرعت میانگین جریان و پروفیل چگالی تعادلی، برای تعیین تشخیص رفتار دینامیکی جریان و ساختار سیال مورد استفاده قرار گرفت تا نقش زبری‌ها و تخلخل‌ها در تغییر این دو مؤلفه بررسی شود. تمایل سرعت حداکثر به سمت دیواره صاف بالایی و وجود نوسانات بزرگ در نواحی نزدیک دیواره و زبری‌ها و تخلخل‌های سطح نشان از نقش آنها بر تغییر مؤلفه‌های یاد شده داشت. آنها اثبات کردند وجود نیروی جاذبه قوی‌تر در نواحی مجاورت سطح باعث افزایش دامنه نوسانات و در نتیجه ایجاد پروفیل چگالی با غیریکنواختی بیشتر می‌شود و نیروی جاذبه کمتر سطح باعث کاهش نیروی تقابل بین سطح و سیال و در نتیجه کاهش چگالی لایه‌ای (لایه بندی چگالی) در نواحی نزدیک سطح می‌شود. به طور کلی نتایج این شبیه سازی نشان داد که هم نیروی تقابل بین دیوار و سیال و هم زبری سطح مهم هستند و باید به صورت همزمان در تحلیل جریان سیال در نانوکانال در نظر گرفته شوند.

نوریان و همکاران [۱۱] با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک ملکولی اثر انواع هندسه زبری سطح بر روی مشخصه‌های جریان آرگون مایع در نانوکانال را مورد بررسی قرار دادند. انواع هندسه زبری به کار برده شده در

¹ University of Thessaly

که v_i سرعت ذره i است. برای سیستم منزوی^۴، انرژی کل (E)، که انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل ذرات یا ملکولها را در بر دارد، ثابت است. انرژی کل (E) به شکل همیلتون می تواند بیان شود. برای N ذره کروی، معادله همیلتون از رابطه زیر تبعیت می کند،

$$H(r, p) = \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 + U(r_1 + r_2 + \dots + r_n) = E \quad (3)$$

همچنین، نیروهای هر ذره با تابع پتانسیل به صورت زیر رابطه دارد،

$$\frac{dU}{dr_i} = -p_i = -m_i a_i = -F_i \quad (4)$$

در شبیه سازی دینامیک ملکولی، معادله حرکت نیوتن بوسیله الگوریتم ورلت می تواند حل شود. شبیه سازی با موقعیت و سرعت اولیه ذرات با در نظر گرفتن دمای میانگین آغاز می شود. انرژی جنبشی میانگین برای هر درجه آزادی [۲۰] به صورت زیر است،

$$\frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} k_b T \quad (5)$$

بر اساس قضیه تعادل، انرژی جنبشی حرکت ذرات در میان تمام درجات فعال از آزادی موجود برای ذرات توزیع شده است. دمای لحظه ای همانند انرژی جنبشی کل در حال نوسان است و از رابطه زیر بدست می آید،

$$T(t) = \frac{\sum_i m_i v_i^2(t)}{k_B N_{sf}} \quad (6)$$

که N_{sf} تعداد درجات آزادی سیستم است. نوسان دما در مرتبه $1/\sqrt{N_{sf}}$ یعنی در مرتبه 10^{-2} - 10^{-3} است. آمار نوسانات در دما در حدود ۱۰-۵ درصد است. برای گرفتن تخمین صحیح از دما، باید میانگین کل نوسانات را محاسبه کنیم [۲۰]. فشار با استفاده از معادله حالت ویریال به صورت زیر محاسبه می شود [۱۹]:

$$P = \rho k T - \frac{\rho}{3N} \left(\sum_{i < j} r_{ij} \cdot \frac{dU(r_{ij})}{dr_{ij}} \right) \quad (7)$$

در شبیه سازی دینامیک ملکولی، چندین مدل برای مدلسازی ملکول آب مورد استفاده قرار گرفته اند که شامل مدل بار نقطه ای ساده^۱ (SPC)، مدل توسعه یافته بار نقطه ای ساده^۲ (SPC/E)، مدل چند نقطه ای انتقال پذیر پتانسیل بین ملکولی^۳ (TIPnP) می شوند [۱۳]. ثابت شده است که مدل SPC/E در بسیاری از شبیه سازی های دینامیک ملکولی به خوبی به عنوان مدلی برای ملکول آب عمل کرده است [۱۳-۱۵]. در واقع آب یکی از سخت ترین سیالات برای مدل سازی و مطالعه است [۱۶]. در مدل SPC/E ذرات می توانند به صورت صلب یا انعطاف پذیر در نظر گرفته شوند [۱۷، ۱۸]. مدل ملکول انعطاف پذیر که برای پیوندهای اتمی ارتجاعی و زاویه خم بین ارتباط ذرات به حساب می آید، به رفتار مکانیک کوانتمی و متغیر انتگرال گیر گام زمانی احتیاج دارد [۱۷، ۱۸]، بنابراین این پیچیدگی در کار حاضر مورد توجه قرار نگرفته است و در عوض مدل ذره صلب مورد استفاده قرار گرفت.

۲- شبیه سازی دینامیک مولکولی جریان

سیستم های چند جزئی از N اتم یا ملکول دارای ۶ درجه آزادی یا فضای شش بعدی هستند که به مؤلفه های برداری مکان $r_i(t)$ و مؤلفه های برداری ممنتوم $p_i(t)$ برای مشخص کردن خط مسیر فضایی، نیاز دارند [۱۹]. بنابراین شش بعد فضایی شامل دو قسمت است: سه بعد موقعیت فضا و سه بعد ممنتوم فضا. مکان $r_i(t)$ و ممنتوم $p_i(t)$ که با حل معادله حرکت نیوتن (۱) با مکان و ممنتوم اولیه بدست می آید،

$$F_i = m_i a_i = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad (1)$$

که r_i مکان ذره i و m_i جرم ذره i و a_i شتاب ذره i است. ممنتوم p_i را به صورت زیر می توان تعریف کرد،

$$P_i = m_i v_i \quad (2)$$

² Simple point charge

³ Extended simple point charge

⁴ n-point transferable intermolecular potential

⁴ Isolated system

بین ذره‌ای آب-آب، تابع پتانسیل لنارد جونز با مدل SPC/E استفاده شده است [۱۳]. آب (H₂O) دارای دو اتم هیدروژن است که با یک اتم اکسیژن از طریق یک پیوند کووالانسی متصل هستند.

جدول ۱- خواص مدل SPC/E ملکول [۱۳]

q _O	q _H	∠HOH	r _{OH}
0.۸۴۷۶ e	0.۴۲۳۸ e	۱۰۹/۴۷	۱ Å

ذرات هیدروژن دارای بار مثبت هستند و ذره اکسیژن دارای بار منفی است. جمله کولمب به منظور در بر داشتن نیروهای واکنش بلند برد^۱ که به دلیل تقابل بار است، به پتانسیل لنارد جونز اضافه شد [۲۲]. پتانسیل لنارد جونز استفاده شده برای تقابل بین ذره‌های مشابه اکسیژن و یا هیدروژن مشابه هم می‌باشد که به عنوان مثال برای ذرات مشابه اکسیژن در زیر آورده شده است [۲۲، ۱۶].

$$U(r) = 4\epsilon_{oo} \left[\left(\frac{\sigma_{oo}}{r_{oo}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{oo}}{r_{oo}} \right)^6 \right] + k_e \sum_{a=1}^3 \sum_{b=1}^3 \frac{q_a q_b}{r_{ab}} \quad (11)$$

که q_a بار ذره a و q_b بار ذره b است، k_e ثابت کولمب و r_{ab} فاصله بین دو ذره است. ثابت کولمب، پارامترهای کولمب و لنارد جونز به صورت زیر هستند [۱۳]،

$$k_e = 8.99 \times 10^9 \text{ N} \cdot \text{m}^2 / \text{C}^2$$

$$\sigma_{oo} = 3.166 \text{ \AA} , \epsilon_{oo} = 0.15535 \text{ kcal/mol}$$

$$\sigma_{HH} = 0.0460 \text{ \AA} , \epsilon_{HH} = 0.4000 \text{ kcal/mol}$$

در معادله (۱۱)، جمله اول، با افزایش فاصله r سریعتر کاهش می‌یابد در حالی که کولمب یعنی جمله دوم چون تابعی از $1/r$ است، با افزایش فاصله r آهسته‌تر کاهش می‌یابد. بنابراین، محاسبه نیروی تقابل بلند برد خطای بزرگی ایجاد می‌کند و برای رهایی از چنین خطاهایی باید از روش‌های جمع استفاده کرد. بدین منظور از روش جمع

بخش اول در رابطه با گاز ایده‌آل است و ρ تعداد ذرات بر حجم است. قسمت دوم مربوط به سهم نیروهای بین ذره-ای است. برای کره‌های نرم مایعات، فشار نوسانات بزرگتری از انرژی ورودی نشان می‌دهد. نیروی پتانسیل بین ذره‌ای $U(r^N)$ برای هر جفت ذره فرض می‌شود. بنابراین، برای تعداد N ذره انرژی تقابل مجموع سهم هر جفت از ذرات است،

$$U(r^N) = \sum_{i < j} u(r_{ij}) \quad (8)$$

مهم‌ترین قسمت شبیه‌سازی یک سیستم با اندازه نانو انتخاب درست تابع پتانسیل برای کمینه کردن تقابل بین ترکیبات نانوسیستم است. در این پروژه، سیستمی که مدل شده نانو سیال آب-مس است به کمک شبیه‌سازی دینامیک ملکولی مدل شده است.

در سال ۱۹۲۴، جان لنارد جونز [۲۱] اولین تابع پتانسیل را برای کره‌های نرم پیشنهاد کرد که به نام تابع پتانسیل لنارد جونز شناخته می‌شود و به صورت زیر بیان می‌شود،

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (9)$$

که \square انرژی در حداقل $u(r)$ است و σ فاصله‌ای است که نیروی پتانسیل ذرات صفر می‌شود. این ساده‌ترین تابع پتانسیل است و به عنوان تقریب خوبی برای گازهای نجیب شناخته شده است. همچنین برای خیلی از ذرات و ملکول-های خنثی، مناسب است. تابع پتانسیل لنارد-جونز شامل دو جمله است، جمله r^{-12} که نماینده نظریه دافعه پاول در فاصله‌های کوتاه به دلیل تقابل مسیر دوران الکترون‌ها است و جمله r^{-6} نقش توصیف کننده نیروهای تقابل واندروالسی را بر عهده دارد، نیرویی که از پتانسیل لنارد جونز بوجود می‌آید به صورت زیر است،

$$F(r) = -\frac{du(r)}{dr} = 24 \frac{\epsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^7 \right] \quad (10)$$

محاسبه پتانسیل یک زوج ذره در محدوده وسیعی از فاصله بین آنها محاسبه گرانبهایی است. به طور معمول $r_c = 2/5\sigma$ در نظر گرفته می‌شود. برای مدل کردن پتانسیل

¹ long-range interaction

$$U_A = -\frac{A_c}{6} \left[\frac{2a_1a_2}{r^2 - (a_1 + a_2)^2} + \frac{2a_1a_2}{r^2 - (a_1 - a_2)^2} + \ln \left(\frac{r^2 - (a_1 + a_2)^2}{r^2 - (a_1 - a_2)^2} \right) \right] \quad (14)$$

$$U_R = \left(-\frac{A_{cc}\sigma^6}{37800} \right)$$

$$\times \left[\frac{r^2 - 7r(a_1 + a_2) + 6(a_1^2 + 7a_1a_2 + a_2^2)}{(r - a_1 - a_2)^7} + \frac{r^2 + 7r(a_1 + a_2) + 6(a_1^2 + 7a_1a_2 + a_2^2)}{(r + a_1 + a_2)^7} - \frac{r^2 + 7r(a_1 - a_2) + 6(a_1^2 - 7a_1a_2 + a_2^2)}{(r + a_1 - a_2)^7} - \frac{r^2 - 7r(a_1 - a_2) + 6(a_1^2 - 7a_1a_2 + a_2^2)}{(r - a_1 + a_2)^7} \right] \quad (15)$$

$$U = U_A + U_R \quad (16)$$

که A_{cc} ثابت همیگر، $A_{cs} = 10.7/83 \text{ kcal/mol}$ [۲۶] و a_1 و a_2 به ترتیب شعاع‌های هر یک از نانوذرات هستند. در سیستم‌های چند اتمی، زاویه‌ها و پیوندهای بین اتم‌ها باعث ایجاد تا حدی انعطاف پذیری در کشش و حرکات خمشی در ملکول‌ها می‌شود. هرچند که در نظر گرفتن ملکول‌های انعطاف پذیر نتایج صحیح‌تر و با دقت بالاتری به همراه دارد ولی شبیه سازی ملکولی کلاسیک خطاهای جدی در محاسبه نیروهای پیوندی و زاویه‌ای درون ذره‌ای نشان می‌دهد [۱۷، ۲۷]. به هر حال نیروهای پیوندی و زاویه‌ای درون ذره‌ای بر طبق مکانیک کوانتومی رفتار می‌کنند. در این پروژه ملکول‌ها صلب در نظر گرفته شده‌اند تا از پیچیدگی‌های محاسبات درون ذره‌ای صرف نظر شود. برای آب، از نسخه سرعت الگوریتم شاک^۳ برای ایجاد مدل صلب SPC/E استفاده شده است. علاوه بر این، نانوذرات مس هم بوسیله تعریف یک گروه از اتم‌های مس ایجاد می‌شود [۲۷].

ایوالد^۱ یا ذره-ذره-ذره مش^۲ (PPPM) که یکی از بهترین روش‌ها در حل مشکل نیروی تقابل بلند برد هستند، استفاده می‌کنیم [۲۰]. اگرچه، روش جمع ایوالد یک روش برتر در شبیه سازی ملکولی است اما هزینه محاسبات بالایی دارد. در این پروژه از الگوریتم PPPM که از لحاظ هزینه محاسباتی نسبت به روش ایوالد مناسب‌تر است، برای محاسبه جمله پتانسیل الکتریکی استفاده شده است. نیروی تقابل بین ذرات متفاوت نیز با استفاده از رابطه (۱۱) و به کمک رابطه عمومی لرنتر- برثلوت تعریف می‌شود،

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_{ii} + \sigma_{jj}) \quad (12)$$

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_{ii}\varepsilon_{jj}}$$

بعد از محاسبه تقابل بین تک تک ذرات، تقابل بین مجموعه ذرات یعنی نانوذرات مس که به صورت کلوئید هستند، نیز در نظر گرفته شده است. آب-کلوئید مس دومین نوع نیروی بین اتمی موجود در نانوسیال است. ایورز و اجتهادی [۲۳]، بر مبنای نظریه همیگر، یک تابع تقابل بین اتمی کلوئید-کلوئید و کلوئید-حلال برای کاربرد در شبیه سازی ملکولی مخلوطها پیشنهاد کردند. نیروی بین ذرات کلوئید (ذرات بزرگ) و حلال به صورت زیر است،

$$U = \frac{2A_{cs}a^3\sigma^3}{9(a^2 - r^2)^3} \times \left[1 - \frac{(5a^6 + 45a^4r^2 + 63a^2r^4 + 15r^6)\sigma^6}{15(a-r)^6(a+r)^6} \right] \quad (13)$$

که A_{cs} ثابت همیگر است که برای آب برابر با $43/2 \text{ kcal/mol}$ [۲۴، ۲۵] و a شعاع کلوئید مس است. سیگما نیز (σ) از میانگین حسابی سیگمای نانوذرات مس و آب بدست می‌آید.

فرمول همیگر کلوئید کلوئید برای مدل کردن پتانسیل تقابل بین نانوذرات مس نیز به کار می‌رود،

¹ Ewald summations

² Particle-particle-particle mesh summations

³ SHAKE

$$H_{Nose-Hoover} = \sum_{i=1}^N \frac{P_i}{2m_i s^2} + U(r^N) + \frac{p^2 s}{2Q} + gk_b \ln s \quad (17)$$

در ضمن برای محاسبه چگالی نانو سیالات با درصدهای مختلف کسر حجمی نانوذرات از رابطه زیر استفاده می کنیم [۲۹]

$$\rho_{nf} = \rho_p \phi + (1-\phi)\rho_{bf} \quad (18)$$

که در این رابطه ρ_{bf} و ρ_p به ترتیب چگالی نانوذرات و سیال پایه هستند. چگالی نانوذرات مس $\rho_p = 8960 \text{ g/cm}^3$ و چگالی آب مقدار $\rho_{bf} = 998 \text{ g/cm}^3$ و در نظر گرفته شده است. با توجه به در نظر گرفتن مدل صلب SPC/E، الگوریتم شاک با گام زمانی 0.05 فمتو ثانیه و تعداد 5×10^5 گام زمانی مورد استفاده قرار گرفته است. گام زمانی با دقت تمام به منظور حذف هر نوع خطای قطع، انتخاب شده است. با توجه به مقالات ارائه شده در این زمینه مقادیر مختلف برای گام زمانی انتخاب شده است و دقیق ترین و پایدارترین حالت گام زمانی 0.05 فمتو ثانیه به دست آمده است.

جدول (۲) رابطه های لازم برای بی بعد سازی

فرمول	نام کمیت
$r^* = \frac{r}{\sigma}$	فاصله
$T^* = \frac{k_B T}{\varepsilon}$	دما
$\rho^* = \frac{\rho \sigma^3}{m}$	چگالی
$P^* = \frac{P \sigma^3}{\varepsilon}$	فشار
$t^* = \frac{t}{\sigma \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}}$	زمان
$V^* = \frac{V}{\sigma^3}$	حجم
$F^* = \frac{F \sigma}{\varepsilon}$	نیرو
$v^* = v \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}$	سرعت
$a^* = \frac{a \sigma m}{\varepsilon}$	شتاب

با توجه به دوره تناوب حجم محدود شده، سلول اولیه که در ارتباط با سلول های مجازی است، ایجاد می شود. هر ملکول یا ذره که از یک سطح خاص خارج می شود از سطح مقابل آن در سلول اول وارد می شود. همچنین نیروهای تقابل با ذرات غایب در محدوده شعاع قطع با ذرات وارد شده از مرز مقابل محاسبه می شود.

هر ملکول باید در جعبه شبیه سازی مکعبی قرار داده شود در حالی که باید از روی هم افتادن^۱ ذرات در هنگام چیدمان آنها اجتناب کرد. در حین شبیه سازی، چیدمان جدید ملکولی ایجاد و چیدمان اولیه فراموش می شود.

برای مدل سازی ملکول های آب محدود در نانوکanal و چینش نانوذرات مس در آن از نرم افزار منبع باز پک مول^۲ [۲۸] استفاده شده است. سرعت اولیه ذرات باید با انتخاب دمای اولیه که در دمای اتاق (300 K) قرار داده شده است، مشخص شود. سرعت اولیه ذرات به صورت تصادفی از توزیع گوسی انتخاب می شوند. همانند ساختارهای اولیه، سرعت های جدید ذرات هنگامی به نمایش در می آیند که در زمان اجرای شبیه سازی سرعت های اولیه فراموش شوند.

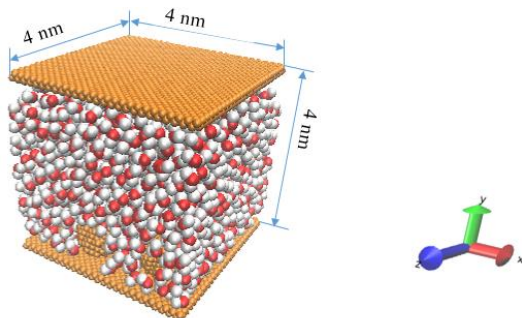
اتحاد کانونی (NVT) برای ثابت نگه داشتن تعداد ذرات، حجم و دما در سیستم شبیه سازی شده به کار می رود. در کل دمای سیستم به کمک یکی از روش های ترموستاتی می تواند تنظیم شود. انرژی سیستم شبیه سازی شده ذخیره می شود. انرژی و دما با هم رابطه دارند، بنابراین دما باید در طول شبیه سازی ثابت نگه داشته شود. استفاده از ترموستات از پرش مقدار دما به دلیل انباشتگی خطاها در طول شبیه سازی دینامیک ملکولی جلوگیری می کند.

الگوریتم ترموستات نوز-هوور برای کنترل دما در 300 K با حفظ حجم ثابت استفاده شده است. این الگوریتم در اصل جمله اصطکاک را به معادله نیوتن اضافه می کند. در یک محدوده زمانی تغییرات ضریب اصطکاک، به عنوان خروجی انحرافی نسبت به مقدار دمای تنظیم شده بوسیله مربع نرخ تعادل، استخراج می شود،

¹ Overlapping

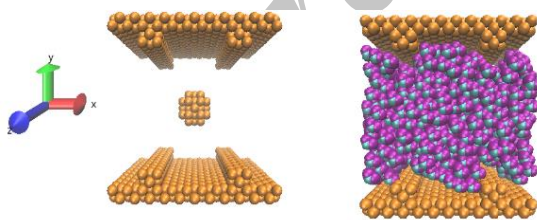
² Packmol

وارد بر نانوسیال که در اثر افت هد دو طرف کانال ایجاد می‌شود، $0/05$ در نظر گرفته شده است.



شکل (۲) مدل سازی نانوسیال آب-مس در نانوکانال صاف

زبری کانال همانطور که در شکل (۳) مشخص است با سطح مقطع مستطیلی در راستای عمود بر جریان کشیده شده است. با اضافه شدن دو المان زبری بر هر دیواره از نانوکانال تعداد اتم‌های دیواره 667 می‌شود. با اضافه شدن این المان‌ها فضای محدود بین دو دیواره کاهش می‌یابد. در نتیجه قطر نانوذره نیز کاهش می‌یابد که این موجب می‌شود تا تعداد اتم‌های هر نانو ذره 43 شود. در ضمن تعداد 1813 ملکول آب برای کد ورودی نرم‌افزار پک مول انتخاب می‌شود. باید توجه داشت که تعداد ملکول‌های در نظر گرفته شده برای آب، تنها مختص حالت مرجع زبری مستطیلی است و برای حالات مختلف شبیه سازی با توجه به حجم محدود در بین دیواره‌ها و نانوذرات انتخاب می‌شود.



شکل (۳) مدل سازی نانوسیال آب-مس در کانال با زبری مستطیلی

قاعده و ارتفاع سطح مقطع حالت مرجع برای شبیه سازی با هندسه مثلثی برابر با هندسه مستطیلی انتخاب شده است. بدین ترتیب که قاعده این زبری‌ها 5 آنگستروم و ارتفاع آنها $3/6$ آنگستروم انتخاب شده است. بنابراین هر یک از دیواره‌ها از تعداد 619 اتم مس تشکیل شده‌اند. به دلیل نوع ساختار مکعبی اتم‌های مس با تغییر اندک قطر

شبیه سازی‌های انجام شده در این پروژه با مقادیر بی بعد است و بی بعد سازی پارامترها از جدول (۲) استفاده شده‌اند.

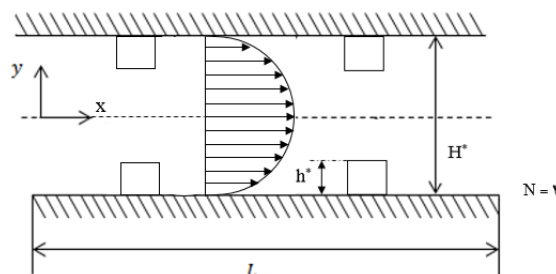
برای بی بعد کردن به منظور ارائه به نرم‌افزار لمس و مهم‌تر از آن تحلیل نتایج خروجی نیاز به مقادیر مبنا هستیم که در جدول (۳) آورده شده‌اند و با کمک روابط بالا می‌توان این کار را انجام داد.

جدول (۳) مقادیر در نظر گرفته شده برای بی‌بعدسازی

$t(s)$	$0/05 \times 10^{-15}$
$m(kg)$	$1/66053892 \times 10^{-27}$
$\rho(m^3kg/s^3)$	$6/18935923 \times 10^{-21}$
$\sigma(\text{\AA})$	۱
$T(K)$	۳۰۰

۳- نتایج

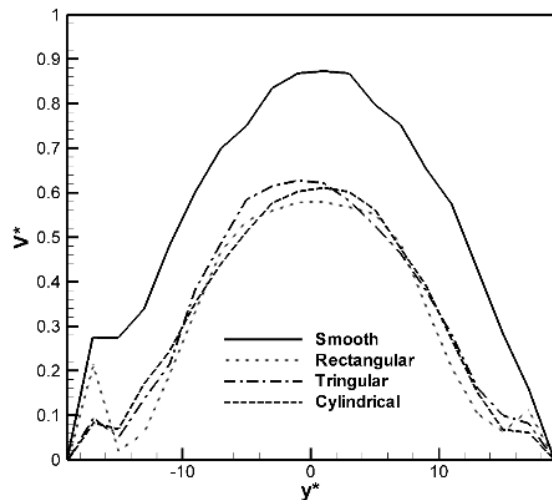
شبیه سازی دینامیک ملکولی بر روی یک سیستم سه بعدی از جریان پوزیه نانوسیال آب-مس در داخل یک نانوکانال، به کار گرفته شده است که در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل (۱) سیستم با جریان پوزیه

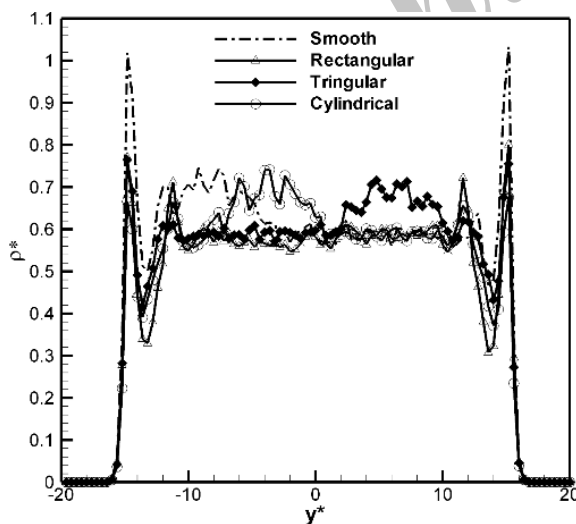
در شبیه سازی کانال صاف تعداد 529 اتم مس برای هر یک از دیواره‌های بالا و پایین با توجه نوع ساختار شبکه، ثابت شبکه، چگالی و جرم مولی مس در نظر گرفته شده است. ضخامت دیواره بالا و پایین 2 آنگستروم است. یک درصد حجم محدود در بین دیواره‌ها برای نانوذره مس در نظر گرفته شده است که تعداد 55 اتم مس در این ناحیه قرار داده شده است. با استفاده از ابزار سایت پک مول تعداد ملکول‌های آب برای جاسازی در فضای محدود بین نانوذره و دیواره‌ها 1907 عدد بدست آمده است. در ضمن نیروی

دیگر دارد. با توجه به نمودار سرعت، زبری مثلثی به عنوان کمترین اثر بر خواص جریان انتخاب می شود.



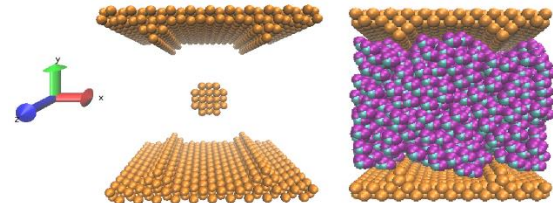
شکل (۶) مقایسه نمودار توزیع سرعت جریان پوزیه نانو کانال با انواع مختلف زبری

کاهش دامنه نوسان نزدیک سطح دیواره صاف نسبت به دیواره زبر به روشنی در نمودار مقایسه شکل (۷) دیده می شود. با قرار دادن زبری ها روی سطح، نفوذ این نوسانات در لایه ها بیشتر می شود. البته بازم حضور بیشتر ذرات سیال در نزدیکی دیواره در شبیه سازی دیواره صاف باعث شده تا دامنه نوسانات نزدیک دیواره پایین نسبت به دامنه نوسانات در حالات دیگر زبری افزایش یابد.



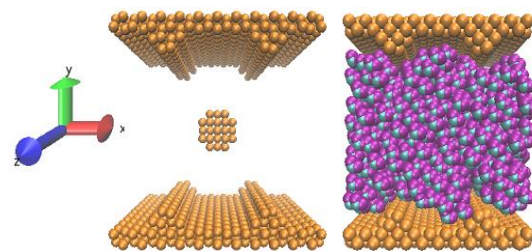
شکل (۷) مقایسه نمودار توزیع چگالی جریان پوزیه نانو کانال با انواع مختلف زبری

نانوذره در این حالت، تعداد اتم های نانوذره مس بدون تغییر باقی می ماند. ۱۸۴۵ عدد ملکول آب در نانو کانال مدل سازی شده قرار گرفته است. هندسه شبیه سازی شده در شکل (۴) قابل مشاهده است.



شکل (۴) مدل سازی هندسه زبری مثلثی

در شبیه سازی زبری استوانه ای تلاش بر این بوده است که قطر نیم دایره سطح مقطع با قاعده و شعاع آن با ارتفاع دو هندسه قبل برابر باشد تا پس از استخراج نتایج بتوان براحتی تأثیر تغییر شکل هندسه زبری را بر مشخصات جریان تشخیص داد. تعداد ذره ۶۶۷ ذره برای شبیه سازی هر کدام از دیواره ها انتخاب شده است. تعداد ذرات نانوذره کماکان ۴۳ ذره است و با توجه به تغییر نکردن تعداد اتم های مس و حجم اشغالی آنها، تعداد ملکول های آب هم مانند زبری مستطیلی ۱۸۱۳ عدد است.



شکل (۵) مدل سازی هندسه استوانه ای

با مقایسه نتایج نانو کانال صاف با نانو کانال زبر با استفاده از جریان پوزیه به تأثیر بسیار زیاد زبری بر جریان پی می بریم. همانطور که از شکل (۶) مشاهده می شود با حضور زبری در سطح دیواره، افت سرعت شدیدی هم در متوسط سرعت و هم در سرعت بیشینه رخ می دهد. متوسط سرعت نانوسیال در نانو کانال با زبری مستطیلی از افت بیشتری برخوردار است.

همچنین شکستگی ابتدای نمودار که نشان از میزان آزادی عمل ذرات سیال پایه در ناحیه مابین زبری هاست، در زبری مستطیلی شیب بسیار زیادتری نسبت به دو هندسه

پارامتر انرژی ε	ε	۴- نتیجه گیری
تابع پتانسیل U	U	همانطور که از نتایج بدست آمده مشهود است با قرار دادن
گام زمانی δt	δt	انواع هندسه‌های زبری بر روی سطح تغییرات زیادی در
در راستای محور X x	x	نمودار توزیع سرعت و چگالی به عنوان مشخصه‌های جریان
در راستای محور Y y	y	بوجود آمد، البته با توجه به تحقیقات گذشته انتظار برخی از
در راستای محور Z z	z	این تغییرات را داشتیم، اما استثنایی هم در نتایج بدست

آمده برای مشخصات نانوجریان نسبت به مشخصات جریان سیالات معمولی از جمله آرگون مایع مشاهده شد، که ناشی از حضور نانوذرات بود. با مقایسه‌ای که در حالت مرجع با در نظر گرفتن نانوکanal صاف و زبری مستطیلی و استوانه‌ای و مثلثی داشتیم، به این نتیجه رسیدیم که میزان افزایش تغییرات غیرعادی در اثر حضور نانوذرات در حالت زبر نسبت به حالت صاف و زبری مستطیلی نسبت به زبری استوانه‌ای و مثلثی به ترتیب، افزایش داشت. با قرار دادن زبری مستطیلی علاوه بر افزایش سرعت لغزشی، افزایش شیب شکست نمودار در نزدیکی زبری سطح را به همراه داشت. وجود زبری‌ها باعث افزایش تأثیرپذیری از حضور نانوذرات به دلیل بالا رفتن نسبت سطح به حجم، می‌شود. در گیری بیشتر ذرات سیال با سطوح زبر باعث افزایش نوسانات در حالت زبر می‌شود، اما میزان چگالی نانوسیال در نزدیکی دیواره زبر به دلیل وجود تعداد کمتر ذرات نانوسیال، کمتر از میزان چگالی در نانوکanal صاف است.

مراجع:

- [1] Schoch, R., J. Han, and P. Renaud, Transport phenomena in nanofluidics. *Reviews of Modern Physics*, vol. 80, No. 3, 2008, pp. 839-883.
- [2] Perry, J. and S. Kandlikar, Review of fabrication of nanochannels for single phase liquid flow. *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 2, No. 3, 2006, pp. 185-193.
- [3] Mijatovic, D., J.C.T. Eijkel, and A. van den Berg, Technologies for nanofluidic systems: top-down vs. bottom-up-a review. *Lab on a Chip*, vol. 5, No. 5, 2005 pp. 492-500.
- [4] Eijkel, J.T. and A. Berg, Nanofluidics: what is it and what can we expect from it? *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 1, No. 3, 2005, pp. 249-267.
- [5] Abgrall, P. and N.T. Nguyen, Nanofluidic Devices and Their Applications. *Analytical Chemistry*, vol. 80, No. 7, 2008, pp. 2326-2341.
- [6] Alder, B.J. and T.E. Wainwright, Studies in Molecular Dynamics. I. General Method. *The Journal of Chemical Physics*, vol. 31, No. 2, 1959, pp. 459-466.
- [7] Succi, S., A.A. Mohammad, and J. Horbach, Lattice-Boltzmann simulation of dense nanoflows: a comparison with molecular dynamics and navier-stokes solutions. *International Journal of Modern Physics C*, vol. 18, No. 4, 2007, pp. 667-675.
- [8] Noorian, H., D. Toghraie, and A.R. Azimian, The effects of surface roughness geometry of flow undergoing Poiseuille flow by molecular dynamics simulation. *Heat and Mass Transfer*, vol. 50, No. 1, 2014, pp. 95-104.
- [9] Sofos, F., T.E. Karakasidis, and A. Liakopoulos, Effect of wall roughness on shear viscosity and diffusion in nanochannels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 53, No. 20, 2010, pp. 3839-3846.
- [10] Kamali, R. and A. Kharazmi, Molecular dynamics simulation of surface roughness effects on nanoscale flows. *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 50, N. 3, 2011, pp. 226-232.

۷- فهرست علائم

سرعت سیال، m/s	V
میدان نیروی خارجی، N	\vec{F}_{ext}
چگالی، kg/m ³	ρ
ثابت بولتزمن J/K	k_B
جرم هر ذره kg	m
تعداد هر ذره	$N(z)$
شعاع قطع m	r_c
فاصله بین ذرات m	r_{ij}
درجه حرارت K	T

- [26] BOTT, T.R., Fouling of Heat Exchangers. 1995, Amsterdam: *Elsevier Science B.V.*
- [27] Habershon, S., T.E. Markland, and D.E. Manolopoulos, Competing quantum effects in the dynamics of a flexible water model. *The Journal of chemical physics*, 2009. 131(2): pp. 24501 - 24511.
- [28] Martínez, L., et al., PACKMOL: A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations. *Journal of Computational Chemistry*, vol. 30, No. 13, 2009. pp. 2157-2164.
- [29] Pak, B.C. and Y.I. Cho, Hydrodynamic and Heat Transfer Study of Dispersed Fluids with Submicron Metallic Oxide Particles. *Experimental Heat Transfer*, vol. 11, No. 2, 1998, pp. 151-170.
- [11] Noorian, H., D. Toghraie, and A.R. Azimian, Molecular dynamics simulation of Poiseuille flow in a rough nano channel with checker surface roughnesses geometry. *Heat and Mass Transfer*, vol. 50, No. 1, 2014, pp. 105-113.
- [12] Jiang, L. and L. Wen, Construction of biomimetic smart nanochannels for confined water. *National Science Review*, vol. 1, No. 1, 2014, pp. 144-156.
- [13] Mark, P. and L. Nilsson, Structure and Dynamics of the TIP3P, SPC, and SPC/E Water Models at 298 K. *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 105, No. 43, 2001, pp. 9954-9960.
- [14] Guevara-Carrion, G., J. Vrabec, and H. Hasse, Prediction of self-diffusion coefficient and shear viscosity of water and its binary mixtures with methanol and ethanol by molecular simulation. *The Journal of Chemical Physics*, vol. 134, No. 7, 2011.
- [15] Bertolini, D. and A. Tani, Thermal conductivity of water: Molecular dynamics and generalized hydrodynamics results. *Physical Review E*, vol. 56, No. 4, 1997, pp. 4135-4151.
- [16] Allen, M.P. and D.J. Tildesley, Computer simulation of liquids, 1989, New-York: *Oxford University Press*.
- [17] Tironi, I.G., R.M. Brunne, and W.F. van Gunsteren, On the relative merits of flexible versus rigid models for use in computer simulations of molecular liquids. *Chemical Physics Letters*, vol. 250, No. 1, 1996, pp. 19-24.
- [18] Habershon, S., T.E. Markland, and D.E. Manolopoulos, Competing quantum effects in the dynamics of a flexible water model. *The Journal of Chemical Physics*, vol. 131, No. 2, 2009.
- [19] Hail, J.M., Molecular dynamics simulation: Elementary Methods, 1992, *New York: John Wiley & Sons*.
- [20] Frenkel, D. and B. Smit, Understanding molecular dynamics: From Algorithm to Applications, second edition, 2002, *New-York: Academic Press*.
- [21] Jones, J.E., On the Determination of Molecular Fields. II. *From the Equation of State of a Gas*. Vol. 106, 1924, pp. 463-477.
- [22] Rapaport, D.C., The Art of Molecular Dynamics Simulation. 1996: *Cambridge University Press*, 414.
- [23] Everaers, R. and M. Ejtehadi, Interaction potentials for soft and hard ellipsoids. *Physical Review E*, vol. 67, No. 4, 2003.
- [24] Tadros, T.F., Colloids in Paints: Colloids and Interface Science, Vol. 6. 2010, *Wiley-VCH: Weinheim*.
- [25] Pashley, R.M. and M.E. Karaman, Applied Colloid and Surface Chemistry, 2004, *West Sussex: John Wiley & Sons Ltd*.