((یادداشت مہندسی))

# محاسبه ویسکوزیته نانو سیال مدل فرضی SPC آب در دینامیک

مولكولى

وحيد زارعي <sup>٣</sup> دانشگاه بینالمللی امام خمینی، قزوین علیرضا شاطری و محمدمهدی زارعی کردشولی ٔ دانشکدہ مہندسی مکانیک دانشگاه شهر کر د

(تاریخ دریافت: ۹۴/۱۲/۱۹؛ تاریخ پذیرش: ۹۵/۱۲/۲۵)

#### چکیدہ

در این تحقیق از مدل شبیهسازی دینامیک مولکولی برای محاسبه ویسکوزیته نانو سیال حاوی نانو ذرات مس استفاده شده است. در ابتدا، نانو ذرات مس بهصورت ناحیه کروی بین نانو سیال پایه آب با مدول سه گانه SPC قرار گرفتهاند. سیستم تحت شرایط مرزی تعیین شده و کد نویسی در نرمافزار لمیس و کسر حجمیهای ۳/۲ و ۴/۴ و ۶/۹ و ۹/۱ درصد تحت حرکت براونیاتمها مورد اجرا قرار گرفته است. سه تابع یتانسیل معروف لنارد جونز، کولمب و روش جاسازی اتمی به کار گرفته شدهاند. از بین روشهای دینامیک تعادلی و دینامیک غیرتعادلی، روش دینامیک تعادلی و معادله گرین- کوبو برای محاسبه ویسکوزیته بهکار گرفته شده است. نتایج بهدستآمده نشان میدهد که بهطور کلی با اضافه شدن نانو ذرات مس به سیال آب و افزایش درصد کسر حجمی، مقدار ویسکوزیته نیز افزایش مییابد. نانو سیالات علاوه بر کسر حجمی ذرات تابع، عوامل دیگری، نظیر حرکت براونی و یدیده خوشه شدن دارند که هریک بهنوبه خود باعث تغییراتی در مقدار ویسکوزیته می شود. نتایج شبیهسازی باکارهای دیگران و مدل پیش بینی خواص ترمودینامیکی مقایسه و مشخص شد که از دقت قابل توجهی برخوردارند.

واژههای کلیدی: پتانسیل بین اتمی، دینامیک مولکولی، ویسکوزیته، معادله گرین- کوبو، نانو سیال، دینامیک تعادلی، پدیده خوشه شدن

# Calculation of the Viscosity of Nanofluid Water SPC Model in Molecular **Dynamics**

A. Shateri and M.M. Zarei Kurdshouli Mech. Eng. Department

Shahrekord University

V. Zarei Imam Khomeini International University

(Received:9/March/2016; Accepted: 15/March/2017)

#### ABSTRACT

This paper presents molecular dynamics modeling for calculating viscosity of nanofluids containing copper nanoparticles. In the first case, the copper nanoparticles were located as a spherical region in water-based fluid module SPC. System under specified boundary conditions, and writing code by LAMMPS software, and nanofluid ratios of 3.2,4.4,6.9 and 9.1 percented by Brownian motion of atoms, was carried out. three popular potential function, Lennard-Jones, Coulomb, and embedded atom method were used. Between equilibrium molecule dynamic, and non- equilibrium molecule dynamic, (EMD) and Green-kubo formula were used to calculate viscosity. The results show that by increasing the amount of voloume fraction, viscosity increases. nanofluids in addition to other factors, such as volume fraction of particles in Brownian motion and clustering phenomenon, each in turn causes changes in viscosity. The simulation results were compared with other's works and found that the obtained results are remarkably accurate.

Keywords: Pair Potential, Molecular Dynamics, Viscosity, Green-Kubo Equation, Nanofluids, Dynamic Balance, **Clustering Phenomenon** 

shateri@eng.sku.ac.ir - استادیار: (نویسنده پاسخگو): - استادیار

۲- کارشناس ارشد: gmail.com@gmail.com - کارشناس ارشد

۳- کارشناس ارشد: zaree.vahidi66@gmail.com

فهرست علائم

F	$(N)$ $\therefore$ $(N)$
Far	نيروى برهم نيس (١٢)
- ex	نيروي خارجي (۱۹) د
К <sub>В</sub>	ثابت بولتزمن (1.3806504e-23kg/ s²K)
ke	انرژی جنبشی (J)
m	جرم مولکول (kg)
r <sub>ij</sub>	فاصله بین مولکول i و مولکول j(nm)
Т	دما (K)
t	زمان (ns)
v	سرعت (m/s)
x ,y,z	مختصات مولكولها
$\mu_{bf}$	ويسكوزيته سيال پايه
$\mu_{nf}$	ويسكوزيته نانوسيال
h	آنتالپی
$\sigma$	مقياس مسافت بينمولكولي (nm)
τ	زمان مشخصه (ns)
ε	عمق چاہ پتانسیل لنارد_ جونز (J)

#### ۱– مقدمه

ایده پراکنده سازی ذرات جامد در سیالات، با توجه به بالا بودن رسانش جامدات فلزی و اکسیدهای آنها و کوچک بودن اندازه این ذرات، (حدود ۱ تا ۱۰۰۱۳) در سال ۱۸۸۱ به وسیله پراکنده سازی ذرات میکرومتری عملی شد [۲–۱]. در سال ۱۹۹۵ در آزمایشگاه ملی آرگون در ایالات متحده امریکا چوی واژه نانو سیال را برای سیالی با نانو ذرات معلق در آن به کار برد [۳]. بر حسب کاربرد نانوسیال ات آنها را به سه دسته نانوسیال ات انتقال حرارت، روان کننده و مغناطیسی تقسیم بندی می کنند. نانوسیال مغناطیسی که فروسیال نیز نامیده می شود، محلول کلوئیدی پایدار است که شامل نانو ذرات مغناطیسی پراکنده شده در یک سیال پایه است [۴].

نانوسیالات در مقایسه با سوسپانسیونها، در مقیاسهای میکرومتر و میلیمتر دارای پایداری بهتری بوده، خصوصیات رئولوژیکی بهتر [۵] و بهطور قابل ملاحظهای رسانندگی گرمایی بزرگتری دارند. نانوسیال بسیار شبیه سیال تکفازی عمل میکند تا مخلوط متداول (سیال/جامد)، نانوسیال طبیعتاً دوفازی و گونهای از مخلوط سیال/جامد است. در سالهای اخیر

بسیاری از پژوهشگران هم به صورت تئوری و هم به صورت آزمایشگاهی اثرات نانوسیالات را برافزایش انتقال حرارت ابزارهای مهندسی بررسی کردهاند. ایشان همچنین گسترهای از روشهای متنوع آماده سازی، خصوصیات و مدلهای مختلف استفاده شده برای محاسبه ویژگیهای ترموفیزیکی نانوسیال ات (برای مثال رسانندگی گرمایی، ویسکوزیته، چگالی، ظرفیت گرمایی ویژه) را تابه حال استفاده کردهاند. از جمله این روشها استفاده از مخلوط کردن سیالات متداول انتقال حرارت نظیر آب (سیال پایه) و ذرات جامد با ابعاد نانومتری می باشد.

در مسئله بازده انتقال حرارت در تجهیزاتی نظیر مبدلهای حرارتی، هدایت حرارتی سیال حامل انرژی و ضریب جابجایی انتقال حرارت نقش اساسی را بر عهده دارند. سیالات متداول در انتقال حرارت و حامل انرژی در صنایع را معمولا آب، روغنها و اتیل گلیکول تشکیل میدهند. با افزایش رقابت جهانی درزمینه صنایع مختلف و نقش انرژی در هزینه تولید، این صنایع بهشدت به سمت توسعه سیالات پیشرفته و جدید با شاخصهای حرارتی بالا پیش میروند.

بهخوبی مشخص است که فلزات در شکل جامد خود دارای هدایت حرارتی بسیار بالایی نسبت به سیالات هستند. بهعنوان مثال هدایت حرارتی مس در دمای محیط حدود ۲۰۰ برابر آب و ۳۰۰۰ برابر روغنموتور است. از طرفی هدایت حرارتی مواد فلزی نیز بسیار بیشتر از مواد غیرفلزی است. دستاورد جدید نانوفناوری این امکان را فراهم آورده تا بتوان ذراتی با اندازه بسیار کوچک نانومتری تولید و فرآوری کرد. این پیشرفت سبب شد تا در سال ۱۹۹۳ فکر استفاده از نانوذرات فلزی در داخل سیالات حامل انرژی نظیر آب و اتیلن گلیکول ایجاد و موضوع نانوسیال بهعنوان موضوع جدید انتقال حرارت مطرح گردد.

کاهش اندازه ذرات یک جامد که توأم با افزایش تعداد آنها در واحد جرم میباشد، منجر به افزایش سطح مخصوص می گردد. بهطوری که سطح مخصوص ذراتی با اندازه نانومتری در حدود ۱۰۰۰ برابر سطح مخصوص ذراتی با ابعاد میکرومتر میباشد. با کاهش ذرات به حدود نانومتر درصد بیشتری از اتمهای آن در نزدیکی سطح قرار می گیرند. سطح ذرات در انتقال حرارت مؤثر بوده و استفاده از نانوسیال به افزایش سطح انتقال حرارت منجر می شود. نانوذرات به کار گرفته شده یک

www.SID.ir

سطح بسیار زیاد برای موضوع انتقال حرارت ایجاد میکند و همین عامل یک مزیت بالقوه برای نانوسیال میباشد.

مقایسه سطح ایجادشده برای انتقال حرارت در نانو ذرات با سطح پودرهای متداول میکرومتری بیانگر توانایی و قابلیت زیاد نانو ذرات در افزایش انتقال حرارت و ایجاد سوسپانسیون پایدار میباشد. لازم به ذکر است که یکی از مشکلات افزودن ذرات بهاندازه میکرو به سیال پایه، باعث تهنشینی سریع آنها میباشد، که با کاهش اندازه به مقیاس نانو تا حدود زیادی مرتفع میگردد.

۲- شبیهسازی دینامیک مولکولی

دینامیک مولکولی، شبیهسازی رایانهای حرکات فیزیکیاتمها و مولکولهاست. اتمها و مولکولها برای یک دوره از زمان اثر متقابل دارند و در این دوره حرکت اتمها بررسی میشود. در این روش مسیر حرکت مولکولها و اتمها در هرگونه هندسه و سیستم ممکن، با حل عددی معادلات حرکت نیوتن برای یک محفظه از ذرات با اثر متقابل بهدست میآید. نیروهای بین ذرات و انرژی پتانسیل توسط میدانهای نیروی مکانیکی مولکولی تعیین میشود.

در شبیه سازی های دینامیک مولکولی، شرایط اولیه سیستم از حالت تعادل دور هست. ازاین و اولین مرحله شبیه سازی در دینامیک مولکولی بایستی در زمان تعادل انجام گیرد تا سیستم به حالت تعادل خود برسد. هنگام به تعادل رسانی، خواص ترمودینامیکی و ساختاری کنترل شده، تا این که درنهایت پایدار می شوند.

شبیهسازی دینامیک مولکولی محاسبات عددی مسیر تخمینزده یک اتم یا مولکول است. شبیهسازی کلاسیک دینامیک مولکولی برپایه قانون دوم نیوتن حرکت پتانسیل بیناتمی نیوتن پایدار است. با دانستن جرم و پتانسیل بیناتمی، موقعیت بعدی در زمان بهدست میآید.

نتایج روشهای محاسبهشده، مشخص شدن خواص و ویژگی است مثل ویسکوزیته<sup>۱</sup>.

با توانایی پیشبینی موقعیت اتمها در هرگام زمانی، با توجه به قانون دوم نیوتن، دینامیک مولکولی به ما امکان مشاهده نحوه

تکامل ساختار در اتصال را میدهد که در آزمایشها تقریباً مشاهده آن غیرممکن است [۶].

معادله عمومی حرکت برای N ذره در سیستم بهوسیله معادله زیر بیان میشود:

$$\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{N} F_{ij} = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} \qquad i=1,2,3,\dots,N , \qquad (1)$$

که<sub>ij</sub> نیروی وارد بر اتم i بهوسیله اتم f<sub>i</sub>, m<sub>i</sub>و r<sub>i</sub>, m<sub>i</sub> و موقعیت اتم iرا نشان میدهد. (یکی از محدودیتهای معادله نیوتن نیاز به معادلات اضافی برای توصیف حرکات چرخشی است.)

بسیاری از نیروهای در بعد ماکرو، با کوچک شدن ذرات و سطح بسیار بالای آنها، تاثیر خود را از دست میدهند و جای خود را به نیروهای بینمولکولی میدهند. از دید مولکولی، فرضیات جریان ماکرو زیر سوال میرود، زیرا رفتار سیال در مقیاس کوچک تغییر میکند و مقیاس طول اهمیت پیدا میکند. فرضیه پیوستگی در ابعاد مولکولی بهعلت وجود فواصل بین مولکولی صدق نمیکند؛ بنابراین، برای توجیه رفتار سیالات در این بعد، یا مدلهای و مولکولی که فرضیه پیوستگی درآن نقشی ندارند را با در نظر گرفتن محدودیتهایی استفاده میکنند.

روش دینامیک مولکولی برای اولین بار در سال ۱۹۵۰ برای مطالعه اثر متقابل ذرات کروی سخت معرفی و باعث فهم بهتر رفتار مایعات و جامدات ساده شد. بدین ترتیب با توجه به پتانسیلهای موجود در دینامیک مولکولی و ثابت بودن، (میتوان گفت منحصربهفرد بودن) رفتار مایعات و جامدات، (نیروها و خواص و ...) در شرایط استاندارد، درک و فهم بهتری از آنها بهدست میآید [۱۰–۷].

پیشرفتهای مهم بعدی در سال ۱۹۶۴ زمانی که رحمان (از وی بهعنوان پدر دینامیک مولکولی یاد میشود) شبیهسازی را با استفاده از پتانسیلهای واقعی برای آرگون مایع انجام داد. او در این شبیهسازی جریان پوازی حاوی آرگون مایع درون یک نانوکانال را با اعمال نیروی خارجی روی ذرات سیال، با استفاده از تابع پتانسیل مختلف انجام داد [۱۱].

<sup>1-</sup> Viscosity

اولین شبیهسازی یک سیستم واقعی در سال ۱۹۷۴ توسط رحمان و استفلنگر روی آب مایع انجام گرفت. این شبیهسازی که درواقع روی مدول های موجود برای آب انجام گرفت، با ارائه نمودارها و نتایج هرکدام از مدول های آب را با توجه به شرایط و فرضیات مساله موردبررسی قرارداد [۱۲].

در دههی گذشته بهطور وسیع از روش دینامیک مولکولی برای شبیهسازی بسیاری از پدیدههای فیزیکی مانند انواع خواص مکانیکی و انواع فرایندهای تولیدی و متالوژی استفادهشده است. بهطوریکه دامنه کاربرد آنها حتی به صنایع پیچیده، اعم از شرکتهای هوافضا نیز رسیده است که از دینامیک مولکولی برای خنکسازی قطعات حساس آنها استفاده می شود [۱۳].

مارکوس و تامسون روی خواص ترمو فیزیکی مانند ویسکوزیته و چگالی سیالات کاربردی در صنعت، بهصورت عددی کارکردند و نتایج آنها درزمینه نیروها، از دقت خوب وقابل توجهی برخوردار است [۱۴].

بوتون و همکاران روی خواصی مانند ضریب تفوذ و ویسکوزیته سیال آبکار کردند و بعد از آزمایش و مقایسه، مدل ایده الی از نوع مدل مولکولی آب و بهینهسازی خواص بالا در سیال ارائه دادند [1۵].

فرانکی و رومنس روی فرمولها و پارامترهای مربوط به خواص سیالات و مقدار دقیق آنها و یک سری اصلاحیههایی مربوط به شرایط استاندارد در قالب جدول و نمودارها ارائه دادند [18].

رجب پور و همکاران که روی مدلسازی نانوسیال آب-مس برای محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه کارکردند، به نتایج قابلقبول، (به این صورت که با تغییرات میزان درصد نانو ذرات مس میزان تغییرات ظرفیت گرمایی ویژه نیز چشمگیر است. آنها درصدتمرکز حجم نانو ذرات مس را تغییر و نتایج بهدستآمده را باکارهای دیگران مقایسه کردند.) رسیدند [۱۷].

در شبیه سازی دینامیک مولکولی به دلیل گستردگی مبحث، معمولاً بعضی از شرایط و پارامترهای حالت را ثابت و بقیه پارامترهای موردنظر را مورد بررسی قرار میدهند. در اصطلاح به این شرایط حکم فرما بر مساله هنگرد می گویند.

#### ۲-۱- هنگردهای متداول در دینامیک مولکولی

با ثابت نگهداشتن پارامترها امکان شبیهسازی هنگردهای مختلف ایجاد می شود. هنگرد ها انواع مختلفی دارد که با توجه به نوع کاربرد، یکی از آنها را انتخاب می کنند.

## ۲-۱-۱- هنگرد میکروکانونیک

این هنگرد که پیشفرض دینامیک مولکولی است، به <sup>۱</sup> تعداد، حجم و انرژی ثابت معروف است و به سادگی قابل پیاده سازی است. در این هنگرد تعداد اتمها، حجم شبیه سازی و انرژی کل ثابت است. برای ثابت نگه داشتن انرژی کافی است از اعمال نیروهای خارجی در معادله های حرکت جلوگیری کرد. بدین و سیله انرژی کل سیستم باید ثابت بماند.

#### ۲-۱-۲- هنگرد کانونی بزرگ

در این هنگرد که تعداد، فشار و دما ثابت<sup>۲</sup> نیز نامیده می شود علاوه بر تعداد ذرات و دمای سیستم، فشار نیز ثابت باقی می-ماند. تثبیت فشار در شبیه سازی به مراتب سخت تر از تثبیت دماست. در این شبیه سازی از روش هایی مانند نوز\_ هور معادله حرکت را به گونه ای تغییر می دهند که به طور هم زمان دما و فشار ثابت بماند.

سادهترین پتانسیل بیناتمی، عکسالعمل بین دواتم است – که این نوع از پتانسیل با عنوان پتانسیل دوگانه<sup>۳</sup> شناخته میشود. پتانسیلهای دوگانه شامل کولمب، قانون دوم نیوتن، لناردجونز و پتانسیل مورس میباشند.

عکسالعمل بیناتمی نانو ذرات بهوسیله پتانسیل لنارد جونز بهصورت زیر است:

$$U_{LJ}(r) = 4\varepsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right], \tag{(7)}$$

که ٤ و ٥ سیگما به ترتیب پارامترهای انرژی و طول هستند و r فاصله بین اتمی است. پتانسیل لنارد جونز در مقایسه با سایر پتانسیلهای شبیه سازی برای مس هزینههای محاسباتی کمتری دارد. در اینجا مولکولهای آب تحت عنوان مدل بار نقطه ای ساده<sup>†</sup> که یک مولکول آب سه وجهی صلب باردار

<sup>1-</sup> Number, Voloume, Energy (NVE)

<sup>2-</sup> Number, Pressure, Temperature (NPT)

<sup>3-</sup> Pair Potential

<sup>4-</sup> Simple Point Charge (SPC)

است، فرض می شود. این مدل به دلیل سادگی و کارایی محاسباتی در بین شبیه سازی دینامیک مولکولی بسیار معروف است. برای محاسبه عکس العمل های کولمبیک از روش مش ذره ذره ذره <sup>۱</sup> استفاده شده است. به دلیل مشار کت توزیع بار در نیروی تقابل بین ذره ای، الگوریتم pppm برای محاسبه جمله پتانسیل الکتریکی استفاده شده است.

## ۳- اهداف اصلی طرح

در این تحقیق بررسی خواص ترموفیزیکی تعداد محدودی از نانوسیال ، (با توجه به کاربرد آنها در بحث صنعت که برای خنکسازی لوازم و قطعات پیچیده و حساس شامل ابرکامپیوترها و موارد پزشکی) مشاهده چگونگی رفتار آنها و بررسی ویسکوزیته در محفظهای مربعی، مطابق شکل ۱ تحت شرایط مرزیهای تعیینشده است.

به عبارت دیگر تعداد محدودی از نانوسیال ات (به دلیل زیاد بودن واکنش ها و نیروهای بین مولکولی، تعداد مولکول ها را محدود می کنند.) را در محفظ ه مربعی، بررسی و داده های به دست آمده را با نتایج کار دیگران مقایسه و نتیجه گیری می شود.

محفظه مربعی شکل ۱ به این صورت است که سیال موجود آب و نانو ذرات مس که به صورت ناحیه ای آبی رنگ است، در بین آب قرار دارد. شرایط مرزی مسئله به این صورت است که دیواره محفظه ثابت و مولکول ها باید در شرایط تعادل دینامیکی قرار گیرند تا پارامترهای دلخواه موردبررسی قرار گیرند.



**شکل (۱):** تصویر سیستم شبیهسازی شده در زمان تعادل نانوسیال آب- مس که نانو ذرات مس بهصورت کرههای آبی تحت حرکت براونی مشخص شدهاند.

1- Particle Particle Mesh

شبیه سازی دینامیک مولکولی متشکل از حل عددی معادلات حرکت کلاسیک است. برای این منظور باید همه نیروهای وارد بر اتمها محاسبه شود. بنابراین تعداد محدودی از نانو سیالات را درون محفظهای که اندازههای آن در حد نانو است، در نظر گرفته می شود و با اعمال شرایط مرزی مختلف، (شار ثابت، دما ثابت و یا عایق بودن) خواص ترموفیزیکی نانوسیال ، به دست آورده می شود. تابع پتانسیل در داخل سیستم با نیروهای مولکولی می تواند پیچیده شود. طبیعت پیچیده آنها به علت اثرات کوانتومی پیچیده در حال وقوع در سطح زیراتمی است. به منظور به دست آوردن نتایج قابل قبول بین اتمی کلاسیک باید به صورت قابل توجهی اثرات کوانتومی را نمایش دهد. به طور معمول تابع پتانسیل تابع مشاهدات تجربی است و همچنین مدل سازی و شبیه سازی در مقیاس کوانتومی است [۸-۷].

در شبیه سازی دینامیک مولکولی به دلیل کار کردن با اعداد بسیار کوچک و برای جلوگیری از افزایش حجم محاسبات و خطاهای ایجادشده از واحدهای کاهیده مانند جدول ۱ استفاده می شود.

انرژی پیوندی و فاصله پیوندی بین اتمهای اکسیژن- هیدروژن- مس در سطح مشترک با یکدیگر بر طبق قانون اختلاط لورنتس- برتولت بهصورت زیر به دست میآید:

(٣)

(۴)

$$\sigma_{1-2} = \frac{(\sigma_1 + \sigma_2)}{2},$$

$$\varepsilon_{1-2} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}$$
 .

جدول (۱): دستگاه کاهیده لنارد جونز.

واحد كاهيده	کمیت
$F/(\epsilon/\sigma^2)$	نيرو
$V/(\sigma/\tau)$	سرعت
E/ε	چگالی
$t/(\frac{\sigma m 1/2}{\sigma 1/2})$	زمان
L/σ	طول

پارامترهای پتانسیل لنارد جونز برای برهم کنشهای بیناتمی در جدول ۲ آمده است.

spc اب.							
$\sigma(A^0)$	€(kcal / mol)	نوع عکسالعملھا					
۲/۳۳۷	१/۴۳۹	مس– مس					
37/188	•/١۵٢١	اكسيژن- اكسيژن					
٠/۴	•/• 48	هيدروژن-هيدروژن					
۱/۷۷۵	۰/۰۸۳۶	هيدرو <u>ژن</u> ⊣كسيژن					
•/••٩	•/•	هيدروژن- مس					
١/۵٩٢	۱/۲۱+۵	اکسیژن- مس					

جونز برای مدل فرضی	لنارد	پتانسيل	پارامترهای	:(۲)	جدول
		J spc			

## ۴- روش شبیهسازی

سیستم موردتحقیق شامل یک مکعب با اندازه ۵۰ 24*A* ۲۰ 24*A* ۲۰ که حاوی حدود ۱۶۰۰ مولکول آب و اتمهای مس به صورت بلور و ساختار<sup>۱</sup> مرکز پر-وجوه پر با ثابت بلوری ۳۰۶۱۵ تحت پتانسیل روش جاسازی اتمی و حرکت براونی در مرکز مکعب قرار گرفتهاند.

سیستم درهنگرد NPT که تعداد مولکولها، فشار و دما ثابت است اجرا میشود. Fix water npt در دماهای تعیینشده بر سیستم حکمفرما است. روش دینامیک مولکولی تعادلی بر پایه استفاده از دستور فیکس<sup>۲</sup> برقرار است.

در تعادل دینامیکی از گام زمانی ۱ فمتو ثانیه استفاده شد و دادهها و نمونهها هر ۲۰۰۰ گام زمانی بدون از دست رفتن اطلاعات نمایش داده می شود.

همان طور که گفته شد مکعب با سطوح مرکزدار یکی از شبکههای کریستالی است که هشت اتم در گوشههای مکعب و شش اتم در مراکز ۶ وجوه مکعب قرار می گیرد. در کل برای این شبکه، تعداد نقاط شبکه بهازای هر سلول برابر 4=(1/2)\*6+(1/8)\*8 می باشد. این شبکه که آلومینیوم، نیکل، مس، طلا، نقره و آهن این گونه ساختاری دارند، دارای بیشترین فشردگی و کمترین فضای خالی در بین شبکههای مکعبی است، (متراکم ترین نوع ساختار بلوری است.) بنابراین عدد همسایگی یا عدد کوئوردیناسیون در ساختار برا نشان می دهد.

سرعت اولیه ذرات سیال بهصورت تصادفی بر اساس دمای دادهشده، به سیستم اعمالشده است. این توزیع تصادفی بر اساس ماکسول- بولتزمن که یک تابع توزیع گاوسی است به سیستم اعمالشده است که برای یک گاز ایده ال این توزیع به صورت زیر است [۱۹–۱۸]:

$$P(v) = \left[\frac{m}{2\pi k_{B}T}\right]^{3/2} \exp\left[\frac{m(v_{x}^{2} + v_{y}^{2} + v_{z}^{2})}{2\pi k_{B}T}\right].$$
 ( $\Delta$ )

در این تحقیق همچنین از نرمافزار توانمند VMD<sup>®</sup> استفادهشده است. درواقع خروجی برنامه لمپس بهعنوان ورودی نرمافزار VMD محسوب میشود.

VMD همان دینامیک مولکولی دیداری، درواقع یک برنامه تحلیلی و مشاهده مولکولی است که برای سیستمهای بیولوژیکی مثل پروتئین، نوکلئیک اسید هاو...طراحی شده است. این نرمافزار بهوسیله تیم تحقیقاتی دانشگاه ایلینویز آمریکا طراحی شده است در بین برنامه های گراف مولکولی، VMD توانایی بینظیری در کارآمدی عملکرد روی چندین گیگابایت دینامیک مولکولی را دارد [۲۰].



شکل (۲): سلول واحد با ساختار شبکه مرکز پر \_ وجوه پر

نیروی میدانی روش جاسازی اتمی<sup>۴</sup> برپایه شبیهسازیها، یک توصیف کارآمد محاسباتی از ساختار، مکانیک و ویژگیهای دمایی سیستمهای فلزی که شامل نفوذ، تغییر شکلهای پلاستیکی و شکستی میباشد، را ارائه میدهد. درواقع با ارزیابی انرژی و نیروها، حتی برای مجموعهی زیاد اتمها در مقایسه با محاسبات اصولی اولیه، عملکرد بهتری دارد. پتانسیل EAM بیانگر مدل مشترک پیوندی اتمی در سیستمهای فلزی است [۲۲–۲۲].

درروش جاسازی اتمی انرژی کل یک سیستم به صورت رابطه (۶) تعریف می شود:

<sup>1-</sup> Face Center-Cubic (FCC)

<sup>2-</sup> Fix

<sup>3 -</sup>Visual Molecular Dynamic (VMD)

<sup>4 -</sup>Embede Atomic Method (EAM)

$$E_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{ij} v\left(r_{ij}\right) + \sum_{i} F(\bar{\rho}_{i}), \qquad (8)$$

که در اینجا،  $V(r_{ig})$  یک تابع پتانسیل دوگانه است بهعنوان یک تابع فاصله  $r_{ig}$  بین اتم  $i \ e \ f$  عمل میکند و F بهعنوان انرژی جاسازی یک تابع چگالی الکترونی میزبان  $\overline{\rho}$ که به قسمت i بهوسیله اتمهای دیگر موجود در سیستم القا میشود، عمل میکند و داریم:

$$\overline{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho(r_{ij}),$$

که در آن، (P (r) تابع چگالی الکترون است [۲۱-۲۰].

 $(\mathbf{Y})$ 

نتایج مطالعات دهه اخیر بسیاری از محققان در زمینه انتقال حرارت و ویسکوزیته در دینامیک مولکولی حاکی از افزایش چشمگیر خواص ترموفیزیکی ذرات معلق نسبت به سیال پایه است. محققان بسیاری رابطه حرکت براونی نانو ذرات در سیال را با ویسکوزیته بررسی کردند و دریافتند که حرکت براونی با ایجاد میدان سرعت وسیع در سیال احاطهکننده و خوشهای شدن نانو ذرات که هم مسیری برای انتقال حرارت و مقاومت اتم ها در برابر برش ایجاد میکنند [۳۰–۲۴].

خواص دمایی با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی میتواند مشخص شود. دو روش دینامیک تعادلی<sup>۱</sup> و دینامیک غیرتعادلی<sup>۲</sup> برای مشخص کردن خواص دمایی استفاده میشود. روش شبیهسازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی برای بهدست آوردن خواص انتقال دمایی استفاده میشود، درحالیکه استفاده از شبیهسازی تعادلی تنها برای بهدست آوردن خواص دمایی انتفاده میشود. شبیهسازی NEMD معمولاً از شبیهسازی NEMD سریعتر است درحالیکه شبیهسازی MEMD به محاسبه بالای تابع هم تطابقی<sup>۳</sup> بستگی دارد. شبیهسازی NEMD در محاسبه تعادلات دمایی، توزیعهای دمایی و شرایط مرزی در سیستمها با مسیرهای متوسط آزاد تناقضاتی دارد. [۳۳–۳۱].

روش جایگزین برای روش غیرتعادلی، روش تعادلی است. هیچگونه اختلاف دمایی به سیستم در شبیهسازی EMD اعمال نمیشود، اما از پیشبینی حرکت اتمها برای مشخص کردن خواص دمایی استفاده میشود.

1- Equation Molecule Dynamic (EMD)

از فرمول گرين \_کوبو داريم:

$$\mu = \frac{V}{k_B T} \int_0^\infty \left\langle P_{qz}(0) p_{qz}(t) \right\rangle dt , \qquad (A)$$

که µ ویسکوزیته، p<sub>qz</sub> به تانسور تنش که مربوط به صفحههای xy,xz و yz است و به فرم زیر است:

$$p_{qz} = \frac{1}{V} \left[ \sum_{i} m_{i} V_{iq}(t) V_{iz}(t) + \sum_{i \neq j} r_{ijq} f_{ijz}(t) \right], \quad (9)$$

که q,z، به جهتهای x,y,z اشاره میکند [۳۵-۳۴].

#### ۵- نتایج

دانشمندان علاوه بر اندازه ذرات، دما عوامل و مکانیسمهای مهم دیگری در افزایش ویسکوزیته در نانوسیال ات را ارائه میدهند. کبلینسکی و همکاران [۲۷] چهار عامل دیگر را درافزایش ویسکوزیته نانوسیال ها موثر میدانند که میتوان با بررسی آنها رفتار غیرعادی نانوسیال ها را توجیه کرد:

- حرکت براونی نانوذرات،
- نانو لایههای ایجادشده در مرز نانوذرات و سیال پایه،
- طبیعت انتقال گرما در نانوذرات و بررسی انتقال فونونی،
  - تأثير خوشه شدن نانوذرات.

سطح مشترک که بهصورت لایه ناز کی از مایع در اطراف ذره تشکیل می شود و می تواند به عنوان یک پل یا یک مانع در انتقال گرما عمل کند. با توجه به آزمایش های حمیدی و همکاران [۳۶] نشان می دهد که این لایه باعث افزایش ویسکوزیته می شود و شبیه به جامد هست و ساختمان اتمی این لایه که ضخامت حدود ۵ تا ۶ مولکول دارد (در حد نانومتر) امی تای یا یه که ضخامت حدود ۵ تا ۶ مولکول دارد (در حد انومتر) می میت بسیار زیادی نسبت به توده سیالی دارد و افزایش ضخامت این نانو لایه در افزایش ویسکوزیته نانوسیال موثر است.

حرکت براونی در مدل همیلتون در نظر گرفته نمیشود و سیال در حالت ایستا و ساکن توسط ثابت نفوذ ذره مشخص میشود که از رابطه زیر وجود دارد:

$$D = \frac{K_B T}{3\pi\eta d} \,. \tag{11}$$

<sup>2 -</sup> Non Equation Molecule Dynamic (NEMD)

<sup>3 -</sup> Autocorrelation

 $K_B$  ثابت بولتزمن،  $\eta$  ویسکوزیته سیال، b قطر ذره و T نیز دما میباشد. با این معادله میتوان تأثیر حرکت براونی روی ویسکوزیته را تخمین زد. تاثیر حرکت براونی در ایجاد خوشه بسیار مهم بوده و این حرکت از طریق افزایش احتمال تشکیل خوشه در اثر برخورد نانوذره، باعث افزایش ویسکوزیته میشود [77]. در انتقال گرما بهوسیله فونون هرچه درصد حجمی ذره بالاتر و ذره کوچکتر باشد فاصله بین ذرات کمتر میشود و در حقیقت در جامدات کریستالی عامل اصلی افزایش ارتعاشات شبکه ی فونونهاییکه به صورت بینظم و تصادفی حرکت میکنند، حرکت براونی ذرات جامد است که باعث نزدیکی ذرات و اثر فونونها میشود.

براثر جذب نیروهای واندروالسی، حرکت براونی با ایجاد میدان سرعت وسیع در سیال احاطه کننده، نانو ذرات خوشه را به وجود میآورد که در اثر این پدیده، محل عبوری با مقاومت گرمایی کمتر برای انتقال گرما به وجود میآید. البته پدیده خوشه شدن از دو جهت ممکن است اثر منفی روی نانوسیال داشته باشد. این پدیده با ایجاد تودههای بزرگ ممکن است باعث عدم پایای سوسپانسیون شود و همچنین با ایجاد نواحی خالی از نانو ذرات در مایع و بالا رفتن مقاومت گرمایی باعث کاهش انتقال گرما شود. خوشه شدن باعث بالا رفتن درصد حجمی میشود و هرچه درصد حجمی نانوذره بیشتر باشد افزایش بیشتری در ویسکوزیته نانوسیال مشاهده میشود؛ که میباشد. در خوشههای نامتراکم ترو افزایش درصد حجمی موثر از مایع، احاطه میشوند که این لایه تاثیر به سزایی در افزایش ویسکوزیته خوشهای دارد.

نمودار شکل ۳ به پیشبینی ویسکوزیته سیال پایه آب بدون حضور نانو ذرات مس میپردازد. نمودار برای مقادیر دمایی مختلف و از ۲۹۸ درجه کلوین شروع می شود.

با توجه به نمودار با افزایش دما، ویسکوزیته کاهش می یابد. با توجه به مقادیر مرجع خوانده شده از اینکروپرا و موسسه فناوری استاندارد[۳۷]، که نشان دهنده کاهش ویسکوزیته با افزایش دما و تکرار این الگو تا مقادیر خاص دمایی و بعد افزایش ویسکوزیته است، نمودار زیر دارای الگویی مانند اینکروپراست و از دقت خوبی برخوردار است. ولی در چند نقطه دارای بی ثباتی و یا عدم تکرار الگوست.

باید به این نکته نیز توجه کرد که نحوه مقادیر حساب شده در اینکروپرا با نحوه حساب کردن مقادیر از طریق دینامیک مولکولی که روش کلاسیک است با هم فرق می کنند و بهطور کلی و شرایط و فرضیات آنها با هم متفاوت است. در دینامیک مولکولی از پیوستگی به دلیل فاصله بین مولکولها صرفنظر میشود. شبیهسازیهای دینامیک مولکولی به محاسبه کامپیوتری بالای تابع هم تطابقی فشار بستگی دارد و تعادلات دمایی و توزیع های دمایی و شرایط مرزی در سیستم با مسیرهای متوسط ازاد تناقضاتی دارد. به همین دلیل در دماهای خاص، سطح انرژی هابی ثباتی در نمودار پیدا میکند.



شکل (۳): پیش بینی تغییرات ویسکوزیته آب برای دماهای مختلف بر اساس شبیهسازی تعادل دینامیک مولکولی

با توجه به کدنویسی برنامه و هندسه و روش شبیهسازی مبنی بر تعریف ناحیه کروی حاوی نانوذرات مس در محفظه سیال آب با شعاعهای انتخابی و درصدهای حجمی خاص شامل ویسکوزیته دردماهای مختلف به صورت نمودارهای شکل ۴ و **۵** و ۶ و ۷ درآمد. از بررسی نمودارها میتوان دریافت که با افزایش دما و کاهش درصدهای حجمی نانو ذرات، مقدار ویسکوزیته کاهش پیدا میکند، ولی همانند نمودار شکل ۳ شامل بی ثباتی و انحرافهایی است. از طرفی با توجه به کار هو شامل بی ثباتی و انحرافهایی است. از طرفی با توجه به کار هو مربعی با ابعاد مختلف به همراه اندازه گیری تجربی کلیه خواص ترموفیزیکی نانوسیال پرداختند و اظهار داشتند که افزایش یا ترموفیزیکی انتقال گرما در سه نوع محفظه نانوسیال بهطور ساده نمیتوان توضیح داد. آنها دلایل ممکن برای رفتار غیرعادی را مورد بررسی قراردادند و توضیح دادند

که اثر کسر حجمی متغیر براثر انتقال نانو ذرات بهوجود آید. تاثیر مهمی در انتقال گرما دارد.

فرض میشود ویسکوزیته مؤثر نانوسیال برابر است با مجموع ویسکوزیته سیال پایه و ویسکوزیته ناشی از وجود ذرات نانو در سیال پایه که داریم:  $\mu = \mu_{nf} + \mu_{bf}$ . ویسکوزیته ناشی از وجود ذرات نانو در سیال پایه را ویسکوزیته ظاهری نامید.

سرعت نسبی بین سیال پایه و ذرات نانو باعث ایجاد تنش برشی در اطراف ذرات می گردند که این تنش بین ذرات جامد و سیال در جریانهای تک فازی وجود ندارد. با بهدست آوردن تنش برشی ناشی از این نیرو میتوان ویسکوزیته ظاهری را محاسبه کرد. مکانیسمهای متعددی وجود دارند، که باعث ایجاد سرعت نسبی بین ذرات نانو و سیال پایه می شوند که مهم ترین آنها ناشی از حرکت براونی است.

الگوی نانوسیال برای درصد کسر حجمی کلی مشخصی برقرار است. هر چه در صد بالاتر رود کسر حجمی بالاتر و بعد از مقدار خاصی باعث پدیده خوشه شدن و افزایش وزن مولکولی که به نوبه خود باعث افزایش ویسکوزیته میشود. برای ویسکوزیته در جهت های x,y,z تعاریف مشابهی وجود دارد، اما برای یک ماده همگن ویسکوزیته مستقل از جهت انتقال گرما و برای یک ماده همگن ویسکوزیته مستقل از جهت انتقال گرما و کرکت است، یعنی $\mu_x=\mu_y=\mu_x=$ اما با توجه به تحلیل کرنویسی و خروجی برنامه لمپس و این که ارا $\mu_{TT}=\mu_{TT}=\mu_{TT}$  است، میتوان نتیجه گرفت که در بعضی شرایط و دماهای خاص و کسرهای حجمی، از همگن در نظر گرفتن نانوسیال باید خودداری کرد و نانوسیال را دو فازی می گیرند و این نابرابری ویسکوزیته در جهت های مختلف نشان دهنده گرادیانهای دمایی مختلف در هر دیواره است که باعث عدم توزیع مولکولها و انتقال آنهاست.

انباشتگی نانوذرات در جهت گرادیان دمای منفی باعث به وجود آمدن گرادیان کسر حجمی میشود، در حالی که پخش براونی باعث پخش نانوذرات و یا ایجاد شار جرمی در جهت گرادیان کسر حجمی منفی میشود، که باعث عدم ثبات در نمودارهای ویسکوزیته است.

در دینامیک مولکولی به خاطر زیاد بودن نیروهای بین مولکولی و پیچیده بودن محاسبات آنها، برای حساب کردن

مقادیر مربوطه، ماتریسهایی با درایههای بسیار زیاد تشکیل می شود که این درایه ها خطای محاسبات را افزایش میدهد از این رو تفاوت بین مقادیر تا حدودی عادی است







با کسر حجمی ۶/۹ درصد برحسب دماهای مختلف





در نمودار شکل ۸ که نسبت ویسکوزیته نانوسیال به ویسکوزیته سیال پایه است، با افزایش درصد کسر حجمی نسبت سره می افزایش مییابد. این انتظار می رود که تأثیرات حرکت براونی با افزایش دما بیشتر می شود.



**شکل (۸)**: نسبت ویسکوزیته نانوسیال به سیال پایه بر اساس شبیهسازی دینامیک مولکولی

پتانسیل لنارد جونز دارای توزیع چگالی غیریکنواخت میباشد. گرچه مدل پتانسیل لناردجونز ۶-۹ باعث ایجاد اختلاف در مشخصات هیدرودینامیکی سیستم میشود اما اعمال این مدل باعث همگرایی دیرتر نتایج میشود، لذا ضرایب پتانسیل نیمه تجربی، باعث افزایش زمان محاسبات میشود [۳۹].

اوج مقدار سرعت مولکولها برای پتانسیل لنارد جونز ۶-۹ بیشتر از مدلهای دیگر است، که این باعث افزایش انرژی جنبشی نسبت به مدلهای دیگر است. انرژِی کل سیستم حاصل جمع انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل مولکولها میباشد

www.SID.ir







درصدکسری حجمی های مختلف براساس دیگر مراجع

۷- مراجع

- CHOI, S.U.S. "Enhancing Thermal Conductivity of Fluid with Nanoparticles Development and Applications of Non - Newtonian Flow", Vol. 66, p.99, 1999.
- Zhu, D., li, X., WANG, N., Wang, X., Gao, J. Curr. APPL.Phys(2009)
- 3. CHOI, S.U.S. "Enhancing Thermal Conductivity Of Fluid With Nanoparticles Development And Applications Of Non Newtonian Flow", Asme Int. Mech. Eng. congress and Exposition, San Fransisco, USA, (1999).
- 4. Viota, J.L., Caballero, F.G., Duran, J.D.G. and Delgado, A.V J, Colloid Interface Sci. (2008)
- 5. Beskok, A. karniadakis, G. "Micro Flow and Nano Flow Fundemantal and Simulation", publication of the book Elsevier,2003.
- Alder, B.J., Wainwright, T.E.J. "Phase Transition for a Hard Sphere System", J. chem. Phys. Vol.27, pp.1208-1209,1957.
- Alder, B.J., Wainwright, J. "Studies in Molecular Dynamics. General Methods", j. chem. Phys. Vol.31, pp.459-466, 1959.
- Allen, M.P. and Tildesley, D.J. "Computer Simulation of Liquids", Clarendon Press. Oxford, 1978.
- Abraham, F.F. "Computational Statical Mechanics, Methodology, Applications and Supercomputing", J. Advances in Physics, 1988.
- Rafii Tabar, H. "Modelling the Nano Scale-Phenomena in Condensed Matter Physics Via Computer –based Numerical Simulations", Physics Report, 2001.
- 11. Rahman, A. "Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon", physical review, pp. A405-A411,1964.

۶- نتیجهگیری

این مقاله ارائهدهنده پیشرفتهای اخیر در تحقیقات روی ویسکوزیته در نانوسیالات با استفاده از روش دینامیک مولکولی میباشد. در این مقاله مس بهعنوان نانوذره جهت بررسی ویسکوزیته در محفظهای حاوی سیال آب که مس را در وسط محفظه پوشانده و در برگرفته بهکاربرده شده است. ویسکوزیته با افزایش دما و کاهش کسر حجمی کاهش مییابد ولی دارای انحرافاتی است که در یک جمعبندی کلی میتوان ویسکوزیته نانوسیال را تابع ویسکوزیته نانوسیال، خلوص نانوسیال، نوع نانوسیال، خواص سطحی و دقیق نانوذره، نوع سیال و نانوذره، ناونیت گرمایی ذره، جز حجمی مؤثر ذره، نوع پوشش ذره، زاویه چرخش خوشه و مقدار اسیدیته نانوسیال دانست.

با استفاده از نتایج بهدستآمده میتوان نتیجه گرفت که روش تعادل دینامیک مولکولی که از روش گرین\_کوبو استفاده میکند قادر بهپیش بینی ویسکوزیته نانوسیال آب\_مس است.

نتایج حاصل اگر بهصورت مفصل مورد تحلیل و بررسی قرار گیرند، میتوانند در آینده راهکارهای جدیدی را ایجاد کنند:

الف- در آینده پزشکی جهت بررسی و فرستادن محفظه به قسمتهای مختلف بدن، بافتها و غدههای درون اندام و یا حتی زمینهساز تحقیقات در مورد DNA و غدههای سرطانی قرار گیرد.

ب- در صنعت برای خنکسازی قطعات بسیار ریز و حساس در رایانهها و پردازشگرها استفاده شود.



شکل (۱۲): نمودار کلی پیشبینی تغییرات ویسکوزیته نانوسیال آب\_مس با کسرهای حجمی مختلف برای دماهای متفاوت و بر اساس شبیهسازی تعادل دینامیک مولکولی

www.SID.ir

- 32. Muller-Plathe, F. and Reith, D. "Cause and effect Reversed in Non-Equilibrium Molecular Dynamics: an Easy Route to Transport Coefficients", Computational and Theoretical Polymer Science, Vol. 9, No's. 3–4, pp. 203–209, 1999.
- 33. Walker, E.A. "Influence Of Phonon Modes On The Thermal Conductivity Of Single-Wall, Double-Wall, and Functionalized Carbon Nanotubes", Faculty of Graduate School of Vanderbilt University, 2012.
- Hoheisel, C. "Theoretical Treatment of Liquids and Liquid Mixture, Elsevier New York, 1993.
- 35. Eapen, J. Li, J., and Yip, S. "Phys. Rev. Lett.", Vol. 98, 028302, 2007.
- Hamidi, A. Amrollahi, A. Rashidi, A. "Analysing the Mathematical Models to Calculate the Thermal Conductivity of Nanofluids", Iranian Chemical Engineering Journal, Vol. 8, No. 40, 2009.
- 37. National Institute Of Standards And Technology,Thermophysical Properties Of Fluid Systems,Http://Webbook.Nist.Gov/Chemistry/Flui d/
- Ho, C.J., Liu, W.K., Chang, Y.S., Lin, C.C. "Natural Convection Heat Transfer of Alumina- Water Nanofluid in Vertical Square Enclosures: AnExperimental Study", Int. J. Thermal Sciences, Vol. 49, pp. 1345-1353, 2010.
- 39. Aminfar, H. and Razmara, N. "Molecular Dynamics Simulation of Liquid Argon Flow in Nanochannels using Different Potential Function", Modarres Mechanical Engineering, Vol. 13, No. 6, pp. 114-125, 2015 (In Persian).

- Stiflinger, F.H. and Rahmani, A. "Improved Simulation of Liquid Water by Molecular Dynamics", The J. chem. Phys., Vol 60, pp.1545-1557, 1974.
- 13. http://lammps.sandia.gov
- Martin, G. and Thompson, A. P. "Industrial Property Prediction using Towhee and LAMMPS", Sandia National Laboratories, 2003.
- Botan, A., Tazi, S., Rotenberg, B., and Turq, P. "Diffusion Coefficient Shear Viscosity of Rigid Water Models", CNRS and UPMC Universe Paris, 2012.
- Franky, M. and Rummens, A. "A Critical Evaluation of Lennard –Jones and Stockmayer Potential Parameters and of Some Correlation Methods", University of Regina, 1976.
- 17. Rajabpor, A., Yousefi, F. "Molecular Dynamic Simulation of the Specific Heat Capacity of Water-Cu Nanoluids", Int. nano letters, 2013.
- Bakhshan, Y. and Shadloo Jahromi, A. "Molecular Dynamics Simulation of Surface Specifics Effects on the Nano scale fluid flow", Modarres Mechanical Engineering, Vol. 15, No. 5, pp. 176-184, 2015 (In Persian).
- Allen, M. P. and Tildesley, D. J. "Computer Simulation of Liquid Oxford University Pressa Oxforda,1989.
- 20. sandia.gov/sjplimp/VMDTUTORIAL.HTM
- Daw, M. S. and Baskes, M. I. "Phys. Rev. B29644", 1984.
- 22. Mishin, Y. "Handbook of Materials Modelinged S Yip", (The Netherlands: Springer), Vol. 2, pp. 459–463, 2005.
- Voter, A.F. John Wiley & Sons, "Intermetallic Compounds", New York, Vol. 1, No. 4, p.77.83,1994.
- 24. Wang, X. and Xu, X. "Thermophys. and Heat Transfer", Vol. 13, pp. 474–480,1999.
- 25. Eastman, J.A., Choi, S.U.S., Li, S., Yu, W., and Thompson, L.J. "Appl. Phys. Lett.", Vol. 78, pp. 718–720, 2001.
- Patel, H.E., Das, S. K., Sundararajan, T., Nair, A. S., George, B., and Pradeep, T. "App. Phys. Lett.", Vol. 83, pp. 2931–2933, 2003.
- Keblinski, P., Phillpot, S.R., Choi, S.U.S., and Eastman, J.A. "Mechanisms of Heat Flow in Suspensions of Nano-sized Particles (nanofluids)", Int. J. Heat Mass Transfer; Vol. 45, pp.855–863, 2002.
- Jang, S. P. and Choi, S.U.S. "Appl. Phys. Lett.", Vol. 84, pp.4316–4318, 2004.
- Kumar, D. H., Patel, H. E., Kumar, V.R.R., Sundararajan, T., Pradeepand, T., and Das, S. K. "Phys. Rev. Lett.", Vol. 93, 2004.
- 30. Prasher, R., Bhattacharya, P., and Phelan, P. E. "Phys. Rev. Lett.", Vol. 94, 2005.
- 31. Fourier, J., "The Analytical Theory of Heat", London: Cambridge, 1878.