

## بررسی جریان و خواص ترموفیزیکی نانوسیال‌ها در نانوکanal با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

دانشجوی دکتری، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه هرمزگان، بندرعباس، ایران

دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه هرمزگان، بندرعباس، ایران

استادیار، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران

استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه هرمزگان، بندرعباس، ایران

رضا هنرخواه\*

یونس بخشان

محمود رحمتی

جمشید خورشیدی مال احمدی

### چکیده

در مقاله حاضر، ابتدا ضریب رسانای گرمایی نانوسیال با چهار نوع ذره شامل مس، نقره، پلاتین و طلا با سیال پایه آب درون یک نانوکanal مسی با استفاده از روش دینامیک مولکولی غیرتعدالی با میدان نیرو Pcff محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد که نانوسیال نقره بیشترین افزایش ضریب رسانای گرمایی را دارد. بررسی برهمکنش و تمایل بین آب و نانوذره با استفاده از آنالیز تابع توزیع شعاعی (RDF) و ضریب نفوذ نانوسیال درون نانوکanal انجام گردیده است. همچنین خواص ترموفیزیکی نانوسیال‌ها شامل  $C_p, C_v$  به روش دینامیک مولکولی تعدالی مورد بررسی قرار گرفت، بررسی‌ها نشان می‌دهد که با افزایش نانوذره به آب مقدار گرمایی ویژه در فشار و حجم ثابت کاهش می‌یابد. در بررسی نمودار توزیع چگالی اتم‌ها، نتایج نشان داد که بیشترین شدت چگالی مربوط به نانوذره نقره و بیشترین ضخامت لایه آب تشکیل شده در کنار نانوذره طلا می‌باشد. لزجت نانوسیال‌ها از دو روش دینامیک مولکولی تعدالی و غیرتعدالی نیز محاسبه و مشخص گردید با افزایش نانوذره در نانوسیال، لزجت آن افزایش می‌یابد.

واژه‌های کلیدی: رسانای گرمایی، میدان نیرو Pcff، تابع توزیع شعاعی، ضریب نفوذ، مقدار گرمایی ویژه، لزجت.

## Analysis of Flow and Thermophysical Properties of Nanofluids In a Nanochannel using Molecular Dynamic (MD) Simulation

R. Honarkhah

Y. Bakhshan

M. Rahmati

J. khorshidi Mal Ahmadi

Department of Mechanical Engineering, Hormozgan University, Bandarabbas, Iran

Department of Mechanical Engineering, Hormozgan University, Bandarabbas, Iran

Department of Chemical Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran

Department of Mechanical Engineering, Hormozgan University, Bandarabbas, Iran

### Abstract

In the present paper, using the non-equilibrium molecular dynamic (NEMD) method, thermal conductivity coefficient of water based nanofluids was calculated and the influence of the metal nanoparticles type with four particle types including copper, silver, platinum, and gold inside a cooper nanochannel was investigated. Also, Pcff force field was used for modeling of the bonded and unbonded interactions among the molecules of water, nanoparticles, and the walls. The results, show that the silver nanoparticle has the maximum effect on the increasing of the nanofluid thermal conductivity coefficient. The interaction and tendency between water and nanoparticles were investigated by using of the radial distribution function (RDF) analysis and the diffusion coefficient of the nanofluid inside the nanochannel was then evaluated. Moreover, the thermodynamic properties of nanofluids including  $C_v$  and  $C_p$  were studied by using equilibrium molecular dynamic (EMD) method. The studies indicate that by adding nanoparticles to water, the specific heat value is reduced in constant pressure and volume, of which the minimum and maximum specific heat reduction is related to copper and platinum nanoparticles. By investigating the diagram of atoms' density distribution, it was found that the highest density is related to the silver nanoparticle and the maximum thickness of water layer is formed alongside with the gold nanoparticle. The viscosity of the nanofluids was also calculated by two methods of equilibrium and non-equilibrium dynamics and it was specified that the viscosities obtained for the nanofluids were increased by adding the nanoparticles to water fluid.

**Keywords:** Thermal Conductivity Coefficient, Pcff Force Field, Radial Distribution Function, Diffusion Coefficient, Specific Heat Value, Viscosity.

دینامیک مولکولی اولین بار توسط آلدرد<sup>۲</sup> در سال ۱۹۵۶، به‌عنوان یک روش استاندارد شبیه‌سازی در محاسبات فیزیک آماری مطرح گردید. دینامیک مولکولی یک فن محاسباتی قدرتمند برای شبیه‌سازی رفتار واقعی مواد با کمک حل معادله حرکت برای یک سیستم ذرات است.

### ۱- مقدمه

روش دینامیک مولکولی<sup>۱</sup> یکی از متداول‌ترین روش‌های عددی برای مدل‌سازی رفتار مواد در مقیاس نانو می‌باشد. روش شبیه‌سازی

<sup>2</sup> Alder

<sup>1</sup> Molecular Dynamics (MD)

\* نویسنده مکاتبه کننده، آدرس پست الکترونیکی: r.honarkhah@yahoo.com

یک کانال استفاده کرده‌اند. آن‌ها برای مدل کردن برهمکنش بین سیال و نانوذره از تابع برهمکنش لنارد-جونز بهره برده‌اند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که با افزایش درصد حجمی نانوذره تا ۱/۴ درصد حجمی در سیال رسانای گرمایی تقریباً ۵۰ درصد افزایش می‌یابد اما افزایش عمق کانال موجب کاهش رسانای گرمایی نانوسیال می‌شود در صورتی که تأثیر چندانی بر رسانای گرمایی آرگون خالص ندارد. رسانای گرمایی فام و همکاران [۵] به مطالعه برهمکنش آب و آرگون در نانوکanal سیلیکون با استفاده از روش دینامیک مولکولی تعادلی پرداخته‌اند و نشان داده‌اند که سیال تمایل زیادی به جذب بر روی سطح دارد که این باعث کاهش اثر دمای دیواره نانوکanal بر دمای سطح تماس آن‌ها با سیال می‌شود.

هو و همکاران [۶] در کار مشابه دیگری از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تعادلی برای بررسی رفتار حرکتی نانوسیال مس-آرگون در داخل نانوکanal استفاده کرده‌اند آن‌ها از تابع برهمکنش لنارد-جونز برای برهمکنش سیال-سیال، نانوذره-سیال و دیواره-سیال و برای برهمکنش نانوذره-نانوذره از تابع برهمکنش EAM استفاده کرده‌اند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که برخی از مولکول‌های سیال در اطراف دیواره کانال قرار گرفته و مانند یک جسم جامد عمل می‌کنند و برخی دیگر از آن‌ها روی سطح نانوذره جذب می‌شوند.

به‌طور کلی می‌توان بیان کرد که معمولاً برای بررسی رسانای گرمایی از روش دینامیک مولکولی تعادلی استفاده می‌شود و اخیراً روش دینامیک مولکولی غیر تعادلی مورد توجه قرار گرفته است و مطالعات شبیه‌سازی در این زمینه کمتر است. به‌عنوان نمونه ژانگ و همکاران [۷] با استفاده از روش دینامیک مولکولی غیر تعادلی به بررسی رسانای گرمایی سیالات مختلف از جمله آب پرداخته‌اند که در مطالعه آن‌ها از مدل SPC/E برای برهمکنش‌های بین مولکول آب استفاده شده است. بررسی آن‌ها نشان می‌دهد که مقادیر رسانای گرمایی آب محاسبه شده توسط روش دینامیک مولکولی (۰/۷۹ W/m.K) اختلاف زیادی با مقادیر آزمایشگاهی (۰/۶۰۱ W/m.K) دارد [۸].

بریسمن و رومر [۹] رسانای گرمایی آب را با استفاده از مدل TIP4P/2005 و روش دینامیک مولکولی غیر تعادلی در دمای ۳۰۰ K مقدار ۰/۹۷ W/m.K محاسبه کرده که اختلاف قابل توجهی برای رسانای گرمایی آب مشاهده می‌گردد [۱۰].

هیو و همکاران [۱۱] به بررسی جریان و رسانای گرمایی نانوسیال آرگون-مس توسط روش دینامیک مولکولی غیر تعادلی پرداخته‌اند. آن‌ها برای مدل کردن برهمکنش سیال و نانوذره از تابع برهمکنش لنارد-جونز استفاده کرده‌اند و گزارش کرده‌اند که افزایش قطر نانوذره به همراه افزایش سرعت نانوسیال در کانال سبب افزایش قابل توجهی در رسانای گرمایی می‌شود اما در صورتی که نانوسیال ساکن باشد، افزایش سایز نانوذره تأثیر چشمگیری بر خواص حرارتی نخواهد داشت.

با توجه به بررسی دقیق مطالعات شبیه‌سازی انجام شده در این زمینه نشان می‌دهد که در اکثر مطالعات سیال پایه برای سادگی، سیال آرگون انتخاب شده است و کمتر به سیال آب پرداخته شده است. از سوی دیگر بررسی‌ها نیز تأیید می‌کنند که شبیه‌سازی ضریب حرارتی آب و یا نانوسیال‌ها با سیال پایه آن به تابع برهمکنش مورد استفاده برای آب خیلی وابسته است و باعث می‌شود اختلاف قابل توجهی بین

این روش می‌تواند ویژگی‌های فیزیکی مواد را به‌وسیله عامل اندرکنش بین ذرات پیش‌بینی کند. با استفاده از این روش، خط سیر و جنبش فیزیکی اتم‌ها، مولکول‌ها و نانوذرات درون سیستم را می‌توان تعیین نمود. اتم‌ها اجازه اندرکنش با یکدیگر را دارند و مقادیر متغیر همچون فشار، دما، انرژی و غیره محاسبه می‌شود. همچنین، در این روش می‌توان ویژگی‌های فیزیکی مواد را به کمک فرض کردن یک عامل مناسب بین ذرات پیش‌بینی کرد. هرچند محدودیت‌هایی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مثل تعداد ذرات و زمان شبیه‌سازی ناشی از قدرت رایانه وجود دارد، ولی در طی چند سال گذشته، افزایش قدرت رایانه‌ها و بهبود مداوم روش‌های شبیه‌سازی باعث شد تا امروزه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از یک مدل آزمایشی فیزیک آماری به یک روش بسیار سودمند برای پیشگویی اکثر خواص مواد تبدیل شود. به‌طور کلی برای محاسبه رسانای گرمایی از دو روش دینامیک مولکولی تعادلی و غیر تعادلی استفاده می‌شود. در روش دینامیک مولکولی تعادلی به‌عنوان نمونه بوشهری و همکاران [۱] به بررسی خواص رسانای گرمایی سیال آب به همراه نانوذرات SiO<sub>2</sub> و Pt با استفاده از روش دینامیک مولکولی تعادلی و رابطه گرین-کوبو<sup>۱</sup> پرداخته‌اند. آن‌ها از مدل SPC/E برای در نظر گرفتن برهمکنش بین مولکول‌های آب استفاده کرده‌اند و مقدار رسانای گرمایی آب در دمای ۲۹۳ کلوین برابر با ۰/۶۳ W/m.K محاسبه کرده‌اند که همخوانی قابل قبولی بین نتایج شبیه‌سازی و نتایج آزمایشگاهی وجود دارد. بررسی آن‌ها نشان می‌دهد که افزایش غلظت نانوذره موجب افزایش و در صورتی که افزایش اندازه نانوذره موجب کاهش رسانای گرمایی می‌شود و حداکثر ۸ درصد رسانای گرمایی نانوسیال از آب بیشتر است. همچنین نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که نوع نانوذره تأثیر قابل توجهی بر افزایش رسانای گرمایی ندارد.

ناواس و همکاران [۲] به بررسی خواص حرارتی نانوسیال‌های مس و نیکل با سیال پایه اکسید دی‌فینیل<sup>۲</sup> توسط روش دینامیک مولکولی تعادلی پرداخته‌اند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که اضافه کردن نانوذرات نیکل رسانای گرمایی را کاهش و برای نانوذرات مس تقریباً ۱۱ درصد افزایش را به همراه دارد. بررسی و تحلیل آن‌ها نشان می‌دهد که برهمکنش بین ذرات فلزی و حلقه بنزنی سیال پایه بر خواص هدایت حرارتی نانوسیال تأثیر زیادی دارد.

لی و همکاران [۳] از روش دینامیک مولکولی تعادلی به‌منظور بررسی تأثیر دما و اندازه نانوذره بر خواص حرارتی نانوسیال آرگون-مس با استفاده از فرمول گرین-کوبو، رسانای گرمایی نانوسیال را محاسبه کرده‌اند. همچنین آن‌ها برای مدل کردن برهمکنش سیال و نانوذره از تابع برهمکنش لنارد-جونز استفاده کرده‌اند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که افزایش اندازه نانوذره و همچنین درصد حجمی آن در سیال، موجب بهبود خواص حرارتی آرگون می‌شود به‌طوری‌که برای نانوسیال با ۸ درصد حجمی نانوذره مس با سایز ۲ نانومتر موجب افزایش تقریباً ۵۰ درصدی رسانای گرمایی را به همراه دارد. در مورد دما آن‌ها مشاهده کرده‌اند که افزایش دما تأثیر چندانی بر رسانای گرمایی نانوسیال ندارد. فرانک و همکاران [۴] از روش دینامیک مولکولی تعادلی و روابط گرین-کوبو برای بررسی خواص گرمایی نانوسیال آرگون-مس در داخل

<sup>1</sup> Green- Kubo

<sup>2</sup> Diphenyl oxide

خواص آب، مدل‌های برهمکنش زیادی برای محاسبه خواص ترموفیزیکی استفاده می‌شود که رسانای گرمایی آب از این قاعده مستثنا نیست که در تمامی آن‌ها از تابع پتانسیل برهمکنش لنارد-جونز<sup>۶</sup>، کولومبی به همراه تابع برهمکنش هارمونیک برای تعیین طول پیوند و زاویه استفاده شده است. تفاوت این مدل‌ها علاوه بر مقادیر توابع برهمکنش در تعداد سایت‌های فعال، صلب یا انعطاف‌پذیر بودن ساختار و قطبش پذیری است و معمولاً به صورت ساختارهای صلب در نظر گرفته می‌شوند [۱۰]. بررسی مطالعات اخیر در زمینه شبیه‌سازی سیالات و بخصوص آب، نشان می‌دهد که استفاده از میدان‌های نیرو Pcff [۱۳-۱۸] نسبت به سایر مدل‌های آب نتایج خوب و قابل قبولی با درصد خطا کمتر در پیش‌بینی خواص آن‌ها نشان می‌دهد؛ که در این مطالعه نیز از این مدل استفاده شده است. در میدان نیرو Pcff از توابع برهمکنش با روابط (۵-۲) برای مدل کردن برهمکنش‌های بین‌مولکولی و درون‌مولکولی استفاده می‌شود

$$U_{Lj}^{ij}(r_{ij}) = \epsilon_{ij} \left[ 2 \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^9 - 3 \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2)$$

$$U_{Coul}^{ij} = B \frac{q_i q_j}{\epsilon_0 r_{ij}} \quad B = 332.0647 \quad (3)$$

$$U_{str} = \frac{1}{2} k_{str} (R - R_0)^2 \left[ 1 + C(R - R_0) + D(R - R_0)^2 \right] \quad (4)$$

$$U_{bend} = \frac{1}{2} k_{bend} (\theta - \theta_0)^2 \left[ 1 + C(\theta - \theta_0) + D(\theta - \theta_0)^2 \right] \quad (5)$$

ضرایب مربوط به توابع برهمکنش میدان نیرو Pcff برای آب در جدول ۱ مشخص شده است.

جدول ۱- مقادیر توابع انرژی برهمکنش آب با میدان‌های نیرو pccf

نوع اتم	$\sigma(\text{\AA})$	$\epsilon(\text{kcal/mol})$	بار الکتریکی (e)	جرم مولکولی (gr/mol)
O	۳/۱۵۰۷	۰/۲۷۴۰	-۰/۷۹۸۲	۱۵/۹۹۹۴
H	۱/۰۹۸	۰/۰۱۳۰	۰/۳۹۹۱	۱/۰۰۷۹

نوع پیوند	طول پیوند/زاویه خمش مرجع	ثابت کشش/خمش	ضریب ثابت C	ضریب ثابت D
O-H	$R_0 = ۰/۹۷۰$	$K_{str} = ۵۶۳/۲۸$ (kcal/mol $\text{\AA}^2$ )	-۱۴۲۸/۲۲	۱۹۰۲/۱۲
H-O-H	$\theta_0 = ۱۰۳/۷۰$	$K_{bend} = ۴۹/۸۴$ (kcal/mol)	-۱۱/۶۰	-۸/۰۰

## ۲-۲- قوانین اختلاط

قوانین اختلاط لورنز- برتلوت<sup>۷</sup> مطابق روابط (۶، ۷) یک ابزار آسان برای محاسبه پارامترهای تداخلی از فراهم می‌کند تا بتوان غیریکنواختی بین مناطق برهمکنش اتمی مولکول‌های مختلف را در نظر گرفت [۳، ۱۹].

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_{ii} \epsilon_{jj}} \quad (6)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2} (\sigma_{ii} + \sigma_{jj}) \quad (7)$$

عبارت تداخلی انرژی بر اساس میانگین هندسی و عبارت تداخلی پارامتر اندازه بر اساس میانگین قطر مناطق برهمکنشی است.

نتایج حاصل از شبیه‌سازی و داده‌های آزمایشگاهی وجود داشته باشد. گستردگی مدل‌های برهمکنش برای آب خود تأیید کننده این مهم است که نیاز به یک میدان نیرو مناسب برای پیش‌بینی خواص حرارتی نانوسیال‌ها با سیال پایه آن احساس می‌شود. علاوه بر بررسی مطالعات شبیه‌سازی در زمینه بررسی رسانای گرمایی نانوسیال‌ها نشان می‌دهد که نانوذره مس نسبت به سایرین بیشتر مورد توجه است و کمتر به نانوذرات نقره، پلاتین و طلا پرداخته شده است. نکته قابل توجه دیگر رفتار حرکتی نانوسیال در داخل یک نانوکanal است که می‌تواند خواص گرمایی آن‌ها را تحت تأثیر قرار دهد که بررسی مطالعات نشان می‌دهد کمتر این مهم در نظر گرفته شده است؛ بنابراین در این مطالعه به بررسی رفتار رسانای گرمایی نانوسیال‌ها با سیال پایه آب در داخل نانوکanal توسط روش دینامیک مولکولی غیرتعادلی پرداخته می‌شود و پارامترهایی نظیر جنس، توانایی و سرعت نفوذ نانوسیال و همچنین خواص ترموفیزیکی در نانوکanal را محاسبه و بررسی می‌شود.

## ۲- روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

در روش دینامیک مولکولی تغییرات سیستم با انتگرال‌گیری از معادلات حرکت به دست می‌آید. ابتدا مکان اولیه ذرات بر اساس یک مدل پیکربندی اولیه تعیین و توزیع سرعت تعادلی ذرات از رابطه توزیع ماکسول-بولتزمن<sup>۱</sup> مطابق رابطه (۱) مشخص می‌شود [۱۲].

$$p(v_{\alpha,i}) = \left( \frac{m_i}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left( - \frac{1}{2} \frac{m_i v_{\alpha,i}^2}{k_B T} \right) \quad \alpha = x, y, z \quad (1)$$

پس از تعیین شرایط اولیه، نیروهای بین‌مولکولی و درون‌مولکولی محاسبه و از معادلات حرکت انتگرال‌گیری شده و مکان و سرعت جدید اتم‌ها به کمک الگوریتم ورت<sup>۲</sup> به دست می‌آید. این حلقه مداوم تکرار می‌شود تا در نهایت سیستم به تعادل می‌رسد.

## ۲-۱- تابع پتانسیل همکنش

در شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای نیروهای بین‌مولکولی و درون‌مولکولی به صورت مجموعه‌ای از معادله‌های ریاضی بیان می‌شوند و اهمیت بسیاری در دقت و صحت نتایج شبیه‌سازی‌ها دارند. در نتیجه مسئله اصلی یافتن برهمکنش بین اتم‌ها و نیروهای مؤثر بر آن‌ها در هر لحظه از زمان است. انتخاب یک پتانسیل بین‌اتمی، یعنی شیوه برهمکنش اتم‌ها به‌طور یقین ورودی اصلی برای توسعه یک مدل اتمی است؛ بنابراین انرژی پتانسیل کل سیستم مولکولی مجموع انرژی‌های بین-مولکولی و درون‌مولکولی می‌باشد.

در این تحقیق چهار میدان پتانسیل شامل دو انرژی پتانسیل بین‌مولکولی (وان دروالسی<sup>۳</sup> و الکترواستاتیکی) و دو انرژی پتانسیل درون‌مولکولی (کشش پیوندی<sup>۴</sup> و خمش پیوندی<sup>۵</sup>) برای کل سیستم مولکولی در نظر گرفته شده است.

با توجه به آنکه آب به‌عنوان سیال پایه در این مطالعه در نظر گرفته شده است، بررسی‌ها نشان می‌دهد که به دلیل اهمیت بررسی

<sup>1</sup> Maxwell-Boltzmann

<sup>2</sup> Verlet

<sup>3</sup> Van der Waals

<sup>4</sup> Bond Stretching

<sup>5</sup> Bond Bending

<sup>6</sup> Lennard-Jones

<sup>7</sup> Lorentz-Berthlot

### ۳-روش اجرا و نتایج

در این مطالعه برای انجام تمامی محاسبات از کد منبع باز لمپس<sup>۱</sup> استفاده شده است؛ که ابتدا با نوشتن کد برنامه‌نویسی اطلاعات موردنیاز<sup>۲</sup> لمپس استخراج و سپس با نوشتن کدهای ورودی<sup>۳</sup> لمپس، توابع موردنیاز را از برنامه مرجع فراخوانی می‌کنیم.

#### ۳-۱- محاسبه ضریب رسانای گرمایی نانوسیال‌ها

برای بررسی و محاسبه رسانای گرمایی از دو روش دینامیک مولکولی تعادلی و غیرتعادلی استفاده می‌شود که در روش تعادلی از رابطه‌ی گرین-کوبو به صورت روابط (۸، ۹) استفاده می‌گردد [۲۰-۲۲].

$$K = \frac{1}{3VK_B T^2} \int_0^{\infty} \langle J_q(0) J_q(t) \rangle dt \quad (8)$$

$$J_q = \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N r_i E_i \quad (9)$$

در رابطه گرین-کوبو باید از تابع شار گرمایی انتگرال گرفته شود و این حجم معادلات دیفرانسیلی رو که در هر گام زمانی باید حل شود تا حالت دقیق سیستم به دست آید را افزایش می‌دهد؛ که در هر مرحله از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای هر اتم در هر گام زمانی 6 معادله دیفرانسیل، سه تابع مکانی و سه تابع برای تکانه حل می‌شود.

در دینامیک مولکولی غیرتعادلی برای محاسبه رسانای گرمایی از قانون فوریه استفاده می‌شود؛ که استراتژی این روش به این صورت است که در وضعیت تعادلی سیستم با ایجاد یک شار گرمایی در دیواره-ها اختلال ایجاد که با تعبیه‌ی دو ناحیه‌ی گرم و سرد در دیواره‌ها این کار انجام می‌شود و سپس تغییرات دما را نسبت به مکان محاسبه و رسانای گرمایی را مطابق رابطه (۱۰) به دست می‌آید [۹، ۱۰].

$$K = \frac{Q}{A \frac{dT}{dz}} \quad (10)$$

که در این پژوهش ما از مدل دوم برای محاسبه رسانای گرمایی بهره برده‌ایم. برای انجام شبیه‌سازی و محاسبه رسانای گرمایی نانوسیال روند زیر انجام شده است.

#### ۱- ساختن جعبه شبیه‌سازی

#### ۲- کمینه کردن انرژی جعبه شبیه‌سازی

۳- تعادل دمای جعبه شبیه‌سازی: تمامی محاسبات انجام شده در دمای ۲۹۸ انجام می‌شود که برای این منظور جعبه شبیه‌سازی توسط هنگرد<sup>۴</sup> NVT به مدت ۱۰ ps به تعادل دمایی می‌رسد که برای ثابت نگه‌داشتن آن از ترموستات نوس-هور<sup>۵</sup> استفاده می‌شود [۲۳]. این ترموستات از نوع مقیاس بندی سرعت بوده و در هر مرحله با مقیاس بندی سرعت‌ها و دمای لحظه‌ای که بر اساس تئوری انرژی جنبشی مدل می‌شود، دمای سیستم را ثابت نگه می‌دارد؛ بنابراین می‌توانیم دمای سیستم را از روابط (۱۱، ۱۲) به دست آوریم.

$$\frac{3}{2} NK_B T = KE(T) \quad (11)$$

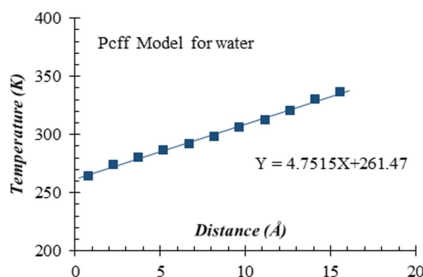
$$KE(T) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i v_i^2 \quad (12)$$

۴- از انسمبل NVT دیگری برای محاسبه ضریب هدایت حرارتی نانوسیال به مدت زمان ۵ ns و با در نظر گرفتن هر گام زمانی ۱ fs استفاده می‌شود.

۵- به دست آوردن  $dT/dz$ : برای به دست آوردن توزیع دمایی در راستای  $z$ ، عمق کانال را تقسیم‌بندی کرده و دما در هر قسمت محاسبه می‌گردد.

۶- محاسبه رسانای گرمایی نانوسیال: از تقسیم گرادیان دمایی بر شار اعمال شده در دیواره‌ها مقدار ضریب هدایت حرارتی به دست می‌آید.

در شبیه‌سازی مولکولی نیاز است که در مرحله اول صحت نتایج به دست آمده مورد بحث و بررسی قرار گیرد. برای این منظور در ابتدا رسانای گرمایی آب به صورت خالص و سپس نانوسیال‌ها در نانوکanal با جنس دیواره مسی توسط روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی و انسمبل NVT محاسبه شده است. برای محاسبه رسانای گرمایی آب از جعبه شبیه‌سازی با ابعاد  $30 \times 30 \times 30$  آنگسترومی و تعداد ۹۰۰ مولکول آب استفاده شده است [۱۰]، که چگالی آب در این حالت برابر با  $996/67 \text{ kg/m}^3$  است. در جهت  $z$  فاصله ۳۰ آنگسترومی به ۲۰ قسمت مساوی تقسیم‌بندی شده است. از آنجایی که جعبه شبیه سازی متقارن است بنابراین رفتار تغییرات دما از وسط جعبه شبیه سازی دقیقاً برعکس می‌شود بنابراین می‌توان توزیع دما را در بازه ۰-۱۵ آنگستروم مورد بحث و بررسی قرار داد. به منظور کاهش حجم محاسبات، برای برهمکنش‌های کوتاه برد از شعاع قطع ۱۲ آنگستروم و برای برهمکنش‌های بلند برد (الکترواستاتیک) از روش جمع اوالد [۲] استفاده می‌گردد. نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی مربوط به توزیع دمای آب در راستای  $z$  جعبه شبیه‌سازی، با اعمال شار گرمایی  $1 \text{ kcal/mole} \cdot \text{fs} \cdot \text{\AA}^{-2} \times 10^{-5}$  در شکل ۱ ترسیم شده است.



شکل ۱- نمودار توزیع دمای آب در نانوکanal با میدان‌های نیرو Pcff

همان‌طوری که نتایج در شکل ۱ نشان می‌دهد توزیع دما یک‌روند کاملاً خطی به خود گرفته است که این نشان‌دهنده این است که تعداد مولکول‌ها و زمان محاسبات در نظر گرفته شده برای محاسبه رسانای گرمایی آب بسیار مناسب بوده است. مقدار ضریب هدایت حرارتی محاسبه شده برای آب خالص  $0.53 \text{ W/m} \cdot \text{K}$  است که تقریباً ۱۳ درصد

<sup>1</sup> Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator

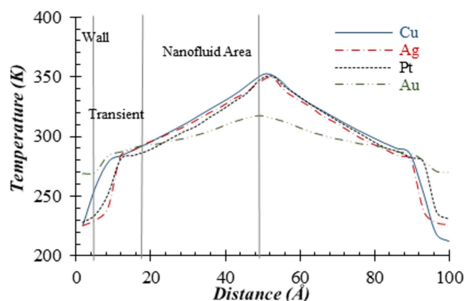
(LAMMPS)

<sup>2</sup> Data File

<sup>3</sup> Input File

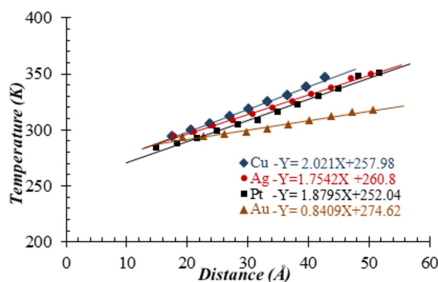
<sup>4</sup> Ensemble

<sup>5</sup> Nose-Hoover Thermostat



شکل ۳- توزیع دمای نانوسیال‌ها در راستای عمق نانوکانال

برای محاسبه رسانای گرمایی نانوسیال باید گرادیان دمایی مربوط به بخش نانوسیال را محاسبه و با مشخص بودن مقدار شار گرمایی، رسانای گرمایی به دست می‌آید؛ و از آنجایی که نمودار توزیع دما مقارن است فقط توزیع دما تا مرکز کانال بررسی می‌شود. نمودار توزیع دما برای نانوسیال‌ها مختلف در شکل ۴ نشان داده شده است. همان طوری که نتایج نشان می‌دهد توزیع دما برای نانوسیال‌ها بسیار خطی است که این می‌تواند تأیید کننده روند شبیه‌سازی صحیح باشد. نتایج نشان می‌دهد که نانوسیال مس بیشترین گرادیان دما و نانوسیال طلا کمترین گرادیان دما را به خود اختصاص داده‌اند. با توجه به شیب حاصل از نمودار دما به دست آمده از شکل ۴ در جدول ۳ مقدار رسانای گرمایی نانوسیال‌ها با توجه به شار گرمایی اعمال شده بر دیواره محاسبه شده است.



شکل ۴- نمودار توزیع دمای نانوسیال‌ها در نانوکانال

همان‌طور که در جدول ۳ مشخص است شار حرارتی اعمال شده بر دیواره برای نانوسیال‌های مختلف متفاوت است، در واقع با توجه به رسانای گرمایی متفاوت نانوسیال باید مقدار شار گرمایی به صورتی انتخاب شود که توزیع دما در بازه ۲۷۳-۳۷۳ کلوین قرار گیرد که آب تغییر فاز ندهد. نتایج مربوط به رسانای گرمایی نانوسیال‌ها نشان می‌دهد نانوسیال نقره بیشترین و سپس به ترتیب طلا، پلاتین و مس بیشترین افزایش رسانای گرمایی نانوسیال را دارند.

جدول ۳- مقادیر رسانای گرمایی نانوسیال‌ها در نانوکانال

نانوذره	شار گرمایی (kcal/mol.fs.Å <sup>2</sup> )	dT/dZ	رسانای گرمایی (W/m.K)	K <sub>nf</sub> /K <sub>w</sub>
Cu	۱/۹۶۷×۱۰ <sup>-۵</sup>	۲/۰۴۸	۰/۶۶۷	۱/۲۶
Ag	۲/۰۵۶×۱۰ <sup>-۵</sup>	۱/۷۵۴	۰/۷۹۸	۱/۵۰
Au	۱/۱۹۰×۱۰ <sup>-۵</sup>	۰/۸۴۱	۰/۷۴۲	۱/۴۰
Pt	۱/۸۸۷×۱۰ <sup>-۵</sup>	۱/۸۷۹	۰/۶۹۸	۱/۳۱

در جدول ۴ میزان افزایش ضریب حرارتی نانوسیال‌های مختلف با نتایج مطالعات آزمایشگاهی مقایسه شده است؛ که می‌توان گفت نتایج

با مقدار آزمایشگاهی ارائه شده توسط رامیر و همکاران [۸] در دمای K ۲۹۸ با مقدار به دست آمده ۰/۶۱ W/m.K اختلاف دارد.

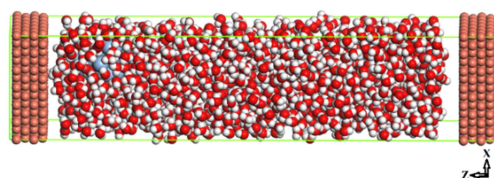
برای بررسی تأثیر جنس نانوذره فلزی بر خواص ضریب هدایت گرمایی نانوسیال‌ها باید برهمکنش‌های بین نانوذرات فلزی و همچنین برهمکنش آن‌ها را با آب و دیواره را در نظر گرفت و از آنجایی که میدان نیرو Pcff رسانای گرمایی آب را به عنوان سیال پایه خوب پیش‌بینی نموده است و برای ذرات فلزی هم این میدان نیرو می‌تواند برهمکنش‌های بین آن‌ها را پیش‌بینی کند؛ بنابراین برای برهمکنش بین مولکول‌های آب-آب، نانوذره-نانوذره، دیواره-آب، دیواره-نانوذره و همچنین نانوذره-آب از میدان نیرو Pcff استفاده شده است. در جدول ۲ مشخصات مربوط به نانوذره و ضرایب تابع برهمکنش آن‌ها مشخص شده است.

جدول ۲- مشخصات و ضرایب توابع برهمکنش نانوذرات

نانو ذره	تعداد اتم	شعاع (nm)	جرم مولکولی (gr/mol)	ε(kcal/mol)	σ(Å)
Cu	۴۳	۰/۵	۶۳/۵۴۶۰	۳/۸۱۸۷	۲/۶۷۷۵
Ag	۳۸	۰/۵	۱۰۷/۸۶۸۰	۴/۱۰۰۲	۳/۰۲۲۲
Au	۴۳	۰/۵	۱۹۶/۹۶۷۰	۶/۰۹۸۰	۳/۰۱۷۷
Pt	۴۳	۰/۵	۱۹۵/۰۸۴۰	۹/۱۴۴۷	۲/۹۰۳۴

برای در نظر گرفتن ضرایب مربوط به برهمکنش‌های غیر پیوندی نانوذرات با مولکول‌های آب، نانوذرات با دیواره و آب با دیواره از قوانین اختلاط مطابق روابط (۶،۷) استفاده می‌شود که مقادیر پارامترهای لنارد-جونز مربوط به مولکول آب با میدان Pcff در جدول ۱ موجود است.

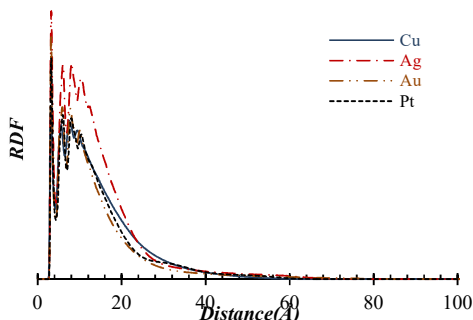
برای ساختن نانوسیال با درصد حجمی دو درصد از نانوذرات فلزی با شعاع پنج آنگستروم با ساختار کریستالی FCC به همراه ۱۲۰۰ مولکول آب استفاده شده است. جعبه شبیه‌سازی مطابق شکل شماره ۲ شامل دو دیواره ۴ لایه‌ای از مس با ابعاد ۲۱/۶۹ × ۲۱/۶۹ آنگستروم مربع با ساختار FCC است که به همراه نانوسیال اندازه ۱۰۰ آنگستروم در جهت z را تشکیل می‌دهند.



شکل ۲- تصویری از جریان مولکول‌های نانوسیال در نانوکانال مسی

برای محاسبه رسانای گرمایی نانوسیال‌های مختلف درون نانوکانال مسی، پس از انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در دمای K ۲۹۸، در ابتدا توزیع دما در راستای عمق کانال مربوط به نانوسیال‌ها را مشخص و ترسیم نموده که در شکل ۳ قابل مشاهده است.

نانوذره بیشتر گردد و رسانای گرمایی آن بیشتر از سایر نانوذرات باشد.



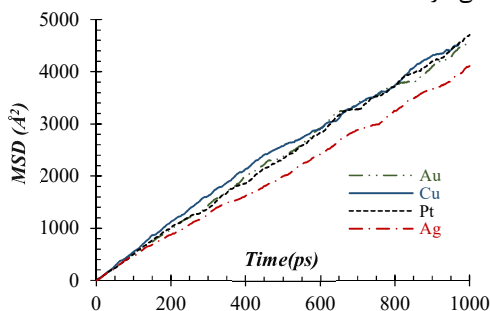
شکل ۵- نمودار تابع توزیع شعاعی برای نانوسیالها

### ۳-۳- محاسبه ضریب نفوذ نانوسیال

ضریب نفوذ پارامتری است که توانایی و سرعت نفوذ نانوسیال را درون نانوکanal را بیان می‌کند که با سرعت متوسط نانوسیال رابطه مستقیم دارد. با استفاده از موقعیت مولکول‌های نانوسیال در زمان‌های مختلف و با استفاده از مکانیک آماری ضریب نفوذ محاسبه می‌شود. برای این منظور از نمودار میانگین مربعات جابجایی<sup>۲</sup> (MSD) مولکول‌های نانوسیال در مقابل زمان استفاده و ضریب نفوذ نانوسیال در نانوکanal مطابق رابطه (۱۴) محاسبه می‌گردد.

$$DI = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta r_i^2(t) \quad (14)$$

نمودار MSD برحسب زمان برای نانوسیال‌های مختلف در شکل ۶ ترسیم شده است. همان‌طوری که شکل ۶ نشان می‌دهد تقریباً تغییرات MSD برای سه نانوسیال پلاتین، طلا و مس تقریباً یکسان است و فقط نانوسیال نقره مقدار جابجایی کمتری نسبت به سایرین دارد. از آنجایی که در اینجا اندازه نانو ذرات یکسان است می‌توان بیان کرد که ضریب نفوذ نانوسیال به برهمکنش و تمایل آن با مولکول‌های آب بستگی دارد.



شکل ۶- نمودار MSD برای نانوسیالها

در جدول ۵ مقدار ضریب نفوذ نانوسیال‌ها محاسبه شده است. ضریب نفوذ نانوسیال نقره با توجه به نتایج RDF مربوط به نانوذره و مولکول‌های آب می‌توان بیان کرد که اطراف نانوذره نقره مولکول‌های آب بیشتری نسبت به سایر نانوذرات در بر گرفته است و در واقع جذب

هم‌خوانی قابل قبولی با نتایج آزمایشگاهی موجود دارند. باید در نظر داشت که مقدار رسانای گرمایی تحت تأثیر اندازه نانوذره نیز می‌باشد و از آنجایی که هر چه اندازه نانوذره کمتر باشد سطح تماس آن بیشتر است، انتظار می‌رود به دلیل اندازه ۵ آنگستروم شعاع ذرات در نظر گرفته شده در این تحقیق مقادیر افزایش رسانای گرمایی نانوسیال‌ها نسبتاً بیشتر از مطالعات آزمایشگاهی موجود باشد.

جدول ۴- مقایسه افزایش رسانای گرمایی نانوسیال‌ها با نتایج

#### آزمایشگاهی

ردیف	سیال پایه	نانوذره	درصد نانوذره	درصد افزایش رسانای گرمایی	مرجع
۱	آب	نقره	۱	۳۵	[۲۴]
۲	آب	نقره	۰/۴	۱۱	[۲۵]
۳	آب	نقره	۲	۵۰	این مطالعه
۴	آب	پلاتین	۳/۵	۲۰	[۲۶]
۵	آب	پلاتین	۲	۳۱	این مطالعه
۶	آب	مس	۲-۰/۱	۲۴-۴	[۲۸, ۲۷]
۷	آب	مس	۲	۲۶	این مطالعه

با در نظر گرفتن این نکته که اندازه و غلظت تمامی نانوسیال‌ها یکسان است می‌توان گفت که رسانای گرمایی نانوسیال‌ها تحت تأثیر جنس نانوذره و برهمکنش آن با آب است. هر چه مولکول‌های آب به نانوذره نزدیک‌تر شوند و به هم تمایل بیشتر داشته باشند انتقال حرارت از آب به نانوذره و بالعکس بیشتر خواهد بود. برای بررسی برهمکنش و تمایل بین آب و نانوذره از آنالیز تابع توزیع شعاعی (RDF) استفاده می‌گردد.

### ۳-۲- تابع توزیع شعاعی<sup>۱</sup>

برای مشخص نمودن توزیع فواصل بین دو نوع اتم  $\alpha$  و  $\beta$  از تابع توزیع شعاعی استفاده می‌شود که بر اساس مکانیک آماری رابطه ریاضی آن به صورت رابطه (۱۳) است.

$$g_{\alpha\beta}(r) = \frac{N}{\rho N_{\alpha} N_{\beta}} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \sum_{k=1}^{N_{\beta}} \delta(r - |r_i - r_k|) \quad (13)$$

درواقع تابع توزیع شعاعی تمایل بین اتم‌ها برای قرار گرفتن در کنار یکدیگر را مشخص می‌کند. چنانچه مولکول‌هایی به یکدیگر نزدیک شوند شدت پیک RDF بیشتر و در صورتی که از هم فاصله بگیرند از شدت پیک‌های نمودار RDF کاسته می‌شود؛ تابع توزیع شعاعی آب-نانوذره برای نانوسیال‌های مختلف در شکل ۵ ترسیم شده است.

همان‌طوری که نتایج نشان می‌دهد اولین پیک نمودار در فاصله ۳/۲۵ آنگستروم برای تمامی نانوسیال‌ها قرار دارد که بدین معنی است که حداقل فاصله بین مولکول‌های آب و سطح نانوذرات ۳/۲۵ آنگستروم است. در این فاصله بزرگ‌ترین پیک مربوط به نانوسیال نقره و سپس به ترتیب طلا، پلاتین و مس می‌باشد؛ بنابراین می‌توان بیان کرد که تمایل مولکول‌های آب برای قرار گرفتن در کنار نانوذرات نقره نسبت به سایرین بیشتر است و همین امر باعث می‌شود سطح تماس آب با

<sup>2</sup> Mean square displacement

<sup>1</sup> Radial Distribution Function(RDF)

[۱۰] تقریباً ۲۳ درصد خطا وجود دارد. مطالعات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مربوط به گرمایی ویژه در فشار ثابت مقدار خطا حاصل از محاسبات را برای مدل‌های برهمکنش آب تا ۴۱ درصد نیز گزارش کرده‌اند [۱۰]. نتایج مطابق جدول ۶ نشان می‌دهند که با افزایش نانوذره به آب مقدار گرمایی ویژه در فشار ثابت کاهش می‌یابد [۲۹-۳۲] که مقدار آن به جنس نانوذره بستگی دارد که کمترین کاهش گرمایی ویژه در فشار ثابت مربوط به نانوذره مس و بیشترین کاهش را نانوذره پلاتین برای آب به همراه داشته است.

جدول ۶- مقادیر آنتالپی و گرمایی ویژه در فشار و حجم ثابت

Cv (kj.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	Cp (kj.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	آنتالپی (kj.kg <sup>-1</sup> )	سیال/نانوسیال
۴/۵۴۵	۵/۱۴۳	-۱۲۴۹/۷۰۹	آب
۴/۰۵۹	۴/۶۷۱	-۱۲۴۴/۷۹۳	Cu
۳/۹۰۵	۴/۴۲۲	-۱۱۹۷/۰۶۰	Ag
۳/۳۳۳	۳/۷۹۲	-۱۱۱۰/۷۵۶	Au
۳/۳۰۸	۳/۷۶۳	-۱۲۱۱.۳۲۷	Pt

برای محاسبه گرمایی ویژه در حجم ثابت از انرژی پتانسیل سیستم توسط رابطه (۱۷) استفاده می‌شود [۱۰]:

$$C_V = \frac{1}{M} \frac{\partial E_g}{\partial T} \Big|_V \quad (17)$$

برای محاسبه گرمایی ویژه در حجم ثابت باید مقدار انرژی پتانسیل را در دماهای مختلف در حجم ثابت محاسبه نمود و از ترسیم مقدار انرژی پتانسیل برحسب دما مقدار شیب خط حاصله یعنی گرمایی ویژه در حجم ثابت را به دست آورد؛ بنابراین در بازه دمایی ۲۸۳ K - ۳۳۳ مقدار انرژی پتانسیل در انسمبل NVT و روش دینامیک مولکولی تعادلی با استفاده از چگالی تعادلی نانوسیال‌ها محاسبه شده است. در شکل ۸ نمودار انرژی پتانسیل برحسب دما در حجم ثابت ترسیم شده است. گرمایی ویژه در حجم ثابت برای آب در دمای ۲۹۸ K و فشار ۱ atm با استفاده از میدان نیرو pccff مقدار  $4/545 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$  به دست آمده است که نسبت به مقدار آزمایشگاهی  $4/18 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$  [۱۰] تقریباً ۹ درصد خطا وجود دارد. مطالعات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مربوط به گرمایی ویژه در حجم ثابت مقدار خطا حاصل از محاسبات را برای مدل‌های برهمکنش آب تا ۵۷ درصد نیز گزارش کرده‌اند [۱۰]. نتایج مطابق جدول ۶ نشان می‌دهند که با افزایش نانوذره به آب مقدار گرمایی ویژه در حجم ثابت کاهش می‌یابد که مقدار آن به جنس نانوذره بستگی دارد که کمترین کاهش گرمایی ویژه در حجم ثابت مربوط به نانوذره مس و بیشترین کاهش را نانوذره پلاتین برای آب به همراه داشته است

سطحی شده است بنابراین حرکت کندتری نسبت به سایر نانوسیال‌ها دارد و ضریب نفوذ آن کمتر می‌شود.

جدول ۵- مقادیر ضریب نفوذ نانوسیال‌ها

ردیف	نانوذره	ضریب نفوذ نانوسیال ( $\times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ )
۱	Cu	۸/۱۰۰
۲	Ag	۷/۸۱۱
۳	Au	۸/۲۶۳
۴	Pt	۸/۷۲۶

### ۳-۴- خواص ترمو فیزیکی نانوسیال‌ها

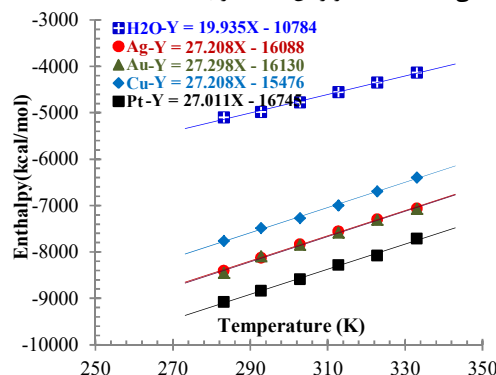
برای محاسبه گرمایی ویژه از آنتالپی سیستم استفاده می‌شود که مقدار آنتالپی از حاصل جمع انرژی جنبشی و داخلی به همراه حاصل ضرب حجم در فشار مطابق رابطه (۱۵) به دست می‌آید [۱۰]:

$$H = E_g + PV = K_e + P_e + PV \quad (15)$$

بنابراین برای محاسبه آنتالپی نانوسیال‌ها از انسمبل NPT با گام زمانی ۱ fs با تعداد مراحل یک میلیون و روش دینامیک مولکولی تعادلی استفاده شده است. در تمامی محاسبات دمای ۲۹۸ K و فشار ۱ atm در نظر گرفته شده است که اندازه نانوذرات ۵ آنگستروم و مشخصات جعبه شبیه‌سازی از نظر ابعاد و تعداد مولکول‌های آب دقیقاً مانند قبل است. مقادیر آنتالپی محاسبه شده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تعادلی برای آب مقدار  $1249/709 \text{ kJ.kg}^{-1}$  به دست می‌آید. برای محاسبه گرمایی ویژه در فشار ثابت از آنتالپی سیستم توسط رابطه (۱۶) استفاده می‌شود [۱۰]:

$$C_p = \frac{1}{M} \frac{\partial H}{\partial T} \Big|_p \quad (16)$$

بنابراین برای محاسبه گرمایی ویژه در فشار ثابت باید مقدار آنتالپی را در دماهای مختلف در فشار ثابت را محاسبه نمود و از ترسیم آنتالپی برحسب دما مقدار شیب خط حاصله یعنی گرمایی ویژه در فشار ثابت را به دست آورد؛ بنابراین در بازه دمایی ۲۸۳ K - ۳۳۳ مقدار آنتالپی در انسمبل NPT و روش دینامیک مولکولی تعادلی در فشار ۱ atm محاسبه شده است. در شکل ۷ نمودار آنتالپی برحسب دما در فشار ثابت ترسیم شده است. نتایج نشان می‌دهد که تغییرات آنتالپی با دما خطی است که نشانگر زمان شبیه‌سازی مناسب است.



شکل ۷- نمودار آنتالپی برحسب دما در فشار ثابت

گرمایی ویژه در فشار ثابت برای آب در دمای ۲۹۸ K و فشار یک اتمسفر با استفاده از میدان نیرو pccff مقدار  $5/143 \text{ kJ.kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$  به دست آمده است که نسبت به مقدار آزمایشگاهی  $4/18 \text{ kJ.kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$

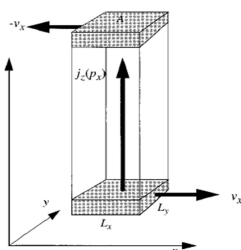
برای محاسبه لزجت، از روش دینامیک مولکولی تعادلی با استفاده از انسبیل NVT در دمای ۲۹۸ K و میدان نیرو  $pcff$  و با در نظر گرفتن شرایط مرزی متناوب، شعاع قطع ۱۲.۵ Å برای برهمکنش‌های بلند برد محاسبات انجام شده است. با استفاده از این روش مقدار لزجت آب  $Pa.s \times 10^{-4}$  به دست آمده است که با مقادیر تجربی  $Pa.s \times 10^{-4}$  [۱۰/۸۹۰] اختلاف دارد. در مطالعات قبلی نیز ۷۰ درصد خطا را گزارش کرده‌اند [۱۰].

در جدول ۷ لزجت آب و نانوسیال‌های مختلف توسط روش دینامیک مولکولی تعادلی محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهند که با افزایش نانوذره به سیال آب لزجت آن افزایش پیدا کرده است به طوری که بیش تأثیر را نانوذره طلا و کمترین اثر را نانوذره مس بر خواص لزجت آب گذاشته است. بررسی مطالعات قبلی نیز نشان می‌دهد که با اضافه کردن نانوذره به آب لزجت آن افزایش پیدا می‌کند [۳۴].

جدول ۷- مقادیر لزجت به روش دینامیک مولکولی تعادلی

سیال/ نانوسیال	لزجت ( $Pa.s \times 10^{-4}$ )	$\mu_{NF}/\mu_w$
آب	۲.۳۷	۱
Ag	۲.۸۰	۱.۱۸
Au	۲.۸۷	۱.۲۲
Cu	۲.۴۷	۱.۰۴
Pt	۲.۸۶	۱.۲۱

در روش دینامیک مولکولی غیرتعادلی در راستای Z جعبه شبیه‌سازی دو ناحیه در بالا و پایین جعبه مطابق شکل ۱۰ در نظر گرفته می‌شود که با یک سرعت ثابت در راستای x اما در جهت‌های مخالف کشیده می‌شود. سپس مقدار شار مومنوم و توزیع سرعت در راستای Z تعیین می‌شود که از تقسیم شار مومنوم بر توزیع سرعت، لزجت مطابق رابطه (۲۰) محاسبه می‌شود [۱۰، ۳۵].



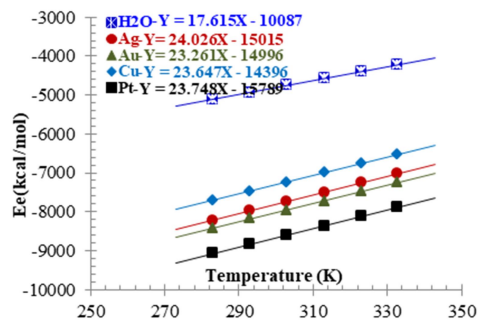
شکل ۱۰- محاسبه لزجت به روش دینامیک مولکولی غیرتعادلی

درواقع شار مومنوم از تقسیم زمان و سطح مقطع (A) در راستای x و y بر شار کل طبق رابطه (۲۱) تعیین می‌شود که عدد ۲ در رابطه فوق به خاطر شرایط مرزی متناوب در سیستم است [۳۵].

$$j_z(P_x) = -\mu \frac{\partial V_x}{\partial Z} \quad (20)$$

$$j_z(P_x) = \frac{P_x}{2tA} \quad (21)$$

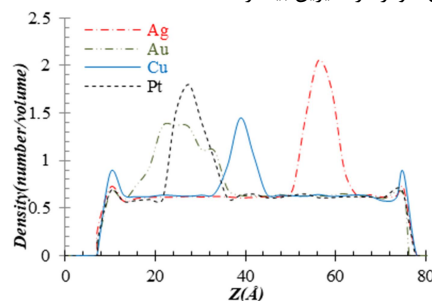
بنابراین مقدار لزجت آب با استفاده از روش دینامیک مولکولی غیر تعادلی  $Pa.s \times 10^{-4}$  به دست می‌آید که خطای بیشتری نسبت به روش گرین-کوبو دارد. با استفاده از روش دینامیک مولکولی غیر تعادلی می‌توان به ازای شار مومنوم نمودار توزیع سرعت آب در راستای کانال به صورت شکل ۱۱ ترسیم نمود.



شکل ۸- نمودار انرژی پتسیل برحسب دما در حجم ثابت

### ۳-۵- توزیع چگالی در نانوکanal

توزیع چگالی اتم‌ها در نانوکanal مس برای نانوسیال طلا، نقره، مس و پلاتین در شکل ۹ ترسیم شده است. همان طوری که نتایج نشان می‌دهند که تمایل مولکول‌های آب برای قرار گرفتن در نزدیکی دیواره کانال زیاد است. از آنجایی که جنس دیواره کانال از مس است باید تمایل مولکول‌ها برای قرار گرفتن در نزدیکی نانوذره مسی با دیواره یکسان باشد و همان طوری که نتایج توزیع چگالی مربوط به نانو سیال مس نشان می‌دهد این نوع پیک‌هایی که در نمودار تشکیل شده است مشابه می‌باشد. برای سایر نانو سیال‌ها با توجه به نوع نانوذره تعداد مولکول‌های آبی که در نانوذره را در بر گرفته است متفاوت خواهد بود. به طوری که برای نانو سیال نقره بیشترین شدت چگالی گزارش شده است که بدین معنی است تعداد مولکول آب زیادی در اطراف نانوذره نقره در یک ضخامت کم قرار گرفته است. برای نانوذره طلا نتایج نشان می‌دهند که در یک فاصله بیشتری از سطح نانوذره مولکول‌های آب قرار دارند بنابراین می‌توان گفت نانوذره طلا تمایل دارد تعداد مولکول‌های آب بیشتری را با خود همراه کند و ضخامت لایه آب تشکیل شده در کنار این نانوذره از سایرین بیشتر است.



شکل ۹- نمودار توزیع چگالی اتم‌های نانوسیال‌ها در نانوکanal

### ۳-۶- لزجت

برای محاسبه لزجت به طوری که از دو روش دینامیک مولکولی تعادلی [۱، ۳] و دینامیک مولکولی غیر تعادلی [۱۰، ۳۳] استفاده شده است. در روش دینامیک مولکولی تعادلی از روابط گرین-کوبو به صورت روابط (۱۸، ۱۹) استفاده می‌شود [۳، ۲۲]:

$$\eta_{x,y} = \frac{V}{K_B T} \int_0^{\infty} \langle P_{x,y}(0) P_{x,y}(t) \rangle dt \quad (18)$$

$$P_{x,y} = \sum_j m_j v_{xj} v_{yj} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} r_{xij} F_{yij} \quad (19)$$



نانوذره به آب مقدار گرمایی ویژه در فشار ثابت و حجم ثابت کاهش می‌یابد؛ که مقدار آن به جنس نانوذره بستگی دارد که کمترین کاهش گرمایی ویژه در مربوط به نانوذره مس و بیشترین کاهش را نانوذره پلاتین برای آب به همراه داشته است.

در بررسی نمودار توزیع چگالی اتم‌ها، نتایج نشان داد که تعداد مولکول آب زیادی در اطراف نانوذره نقره در یک ضخامت کم قرار گرفته که بیشترین شدت چگالی را دارد؛ و با توجه به آنکه نانوذره طلا تعداد مولکول‌های آب بیشتری را با خود همراه می‌کند، ضخامت لایه آب تشکیل شده در کنار این نانوذره از سایرین بیشتر است.

برای محاسبه لزجت نانوسیال‌ها از دو روش دینامیک مولکولی تعادلی با استفاده از روابط گرین-کوبو و دینامیک مولکولی غیر تعادلی استفاده گردید، نتایج نشان داد در روش دینامیک مولکولی تعادلی که خطای کمتری نسبت به دینامیک مولکولی غیر تعادلی دارد، لزجت نانوسیال‌ها به‌دست‌آمده با افزایش نانوذره به سیال آب افزایش پیدا کرده است به‌طوری‌که بیشترین تأثیر را نانوذره طلا و کمترین اثر را نانوذره مس بر خواص لزجت آب گذاشته است.

### ۵- نمادها

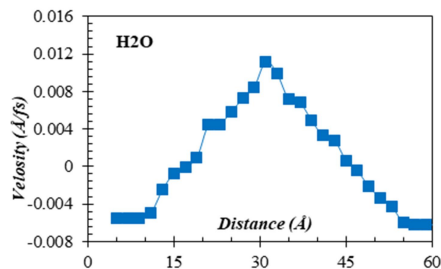
A	سطح مقطع انتقال گرما (Å)
Ag	نانوذره نقره
Au	نانوذره طلا
Cu	نانوذره مس
DI	ضریب نفوذ ( $m^2s^{-1}$ )
E <sub>i</sub>	مجموع انرژی جنبشی و پتانسیل ( $kcal.mol^{-1}$ )
J <sub>q</sub>	شار گرمایی ( $kcal.mol^{-1}fs^{-1}Å^{-2}$ )
K	رسانای گرمایی ( $Wm^{-1}K^{-1}$ )
k <sub>B</sub>	ثابت بولتزمن
KE	انرژی جنبشی ( $kcal.mol^{-1}$ )
k <sub>str</sub>	ثابت کشش ( $kcal.mol^{-1}Å^{-2}$ )
k <sub>bend</sub>	ثابت خمش ( $kcal.mol^{-1}$ )
N <sub>α,β</sub>	تعداد اتم‌های جزء α و β
Pt	نانوذره پلاتین
q <sub>i,j</sub>	بار جزئی (e)
r	فاصله بین اتم‌ها (Å)
r <sub>c</sub>	شعاع قطع (Å)
U	انرژی پتانسیل ( $kcal.mol^{-1}$ )

### علائم یونانی

ε <sub>0</sub>	ثابت گذردهی الکتریکی خلأ
ε <sub>ij</sub>	عمق چاه پتانسیلی ( $kcal.mol^{-1}$ )
σ <sub>ij</sub>	مقدار در σ <sub>r</sub> (r)=0 پتانسیل لنارد-جونز (Å)
η <sub>α,γ</sub>	لزجت

### ۶- مراجع

- [1] Bushehri M., Mohebbi A. and Rafsanjani H., Prediction of thermal conductivity and viscosity of nanofluids by molecular dynamics simulation. *Journal of Engineering Thermophysics*, vol. 25, pp. 389-400, 2016.
- [2] Navas J., Sánchez-Coronilla A., Martín E.I., Teruel M., Gallardo J.J., Aguilar T., Gomez-Villarejo R., Alcántara R., Fernández-Lorenzo C. and Piñero J.C., On the enhancement of heat transfer fluid for concentrating solar power using Cu



شکل ۱۱- نمودار توزیع سرعت آب در راستای کانال برای آب در جدول ۸ مقادیر گرادیان سرعت به همراه شار مومنوم به‌دست‌آمده در روش دینامیک مولکولی غیر تعادلی برای آب و سایر نانوسیال‌ها مشخص شده است.

جدول ۸- مقادیر لزجت به روش دینامیک مولکولی غیر تعادلی

سیال / نانوسیال	سطح مقطع (Å <sup>2</sup> )	گرادیان سرعت ( $f^{-1}s^{-1} \times 10^{-3}$ )	فلاکس مومنوم ( $Pa \times 10^{-22}$ )	لزجت ( $Pa.s \times 10^{-4}$ )	H <sub>NF</sub> /μ <sub>w</sub>
آب	۹۰۰	۱	۱/۸۹	۱/۸۹	۱
Ag	۱۷۳۷/۵	۰/۵	۱/۴	۲/۸	۱/۴۸
Au	۱۸۰۰	۰/۵	۱/۵	۳	۱/۵۸
Cu	۱۶۹۵/۲	۰/۶	۱/۵	۲/۵	۱/۶۶
Pt	۱۶۷۶/۵	۰/۶	۱/۵	۲/۵	۱/۶۶

### ۴- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این تحقیق تأثیر جنس نانوذره فلزی بر رسانای گرمایی نانوسیال نقره، طلا، پلاتین و مس با سیال پایه آب درون یک نانوکanal مسی با روش دینامیک مولکولی غیرتعادلی مورد بررسی قرار گرفت. با اعمال شار گرمایی مختلف بر دیواره برای هر کدام از نانوسیال‌ها گرادیان دماها به دست آمد. نتایج نشان داد که نانوسیال مس بیشترین گرادیان دما و نانوسیال طلا کمترین گرادیان دما را به خود اختصاص داده‌اند. در نتیجه اعمال شار گرمایی و به دست آمدن گرادیان دماها و با استفاده از قانون فوریه ضریب هدایت حرارتی نانوسیال‌ها محاسبه گردید که نقره بیشترین و سپس به ترتیب طلا، پلاتین و مس بیشترین افزایش رسانای گرمایی را دارند. با مقایسه نتایج به‌دست‌آمده با نتایج آزمایشگاهی به‌طور نسبی هم‌خوانی قابل قبولی وجود دارد که نشان‌دهنده دقت مناسب شبیه‌سازی‌های انجام‌گرفته می‌باشد.

برای بررسی برهمکنش و تمایل بین آب و نانوذره از آنالیز تابع توزیع شعاعی (RDF) استفاده گردید. نتایج نشان داد که تمایل مولکول‌های آب برای قرار گرفتن در کنار نانوذرات نقره نسبت به سایرین بیشتر است و همین امر باعث می‌شود سطح تماس آب با نانوذره بیشتر گردد و رسانای گرمایی آن بیشتر از سایر نانوذرات باشد. برای بررسی توانایی و سرعت نفوذ نانوسیال را درون نانوکanal، ضریب نفوذ محاسبه گردید که نتایج نشان داد ضریب نفوذ نانوسیال به برهمکنش و تمایل آن با مولکول‌های آب بستگی دارد. با توجه به آنکه اطراف نانوذره نقره مولکول‌های آب بیشتری نسبت به سایر نانوذرات در بر گرفته و در واقع جذب سطحی شده است، بنابراین حرکت کندتری نسبت به سایر نانوسیال‌ها دارد و ضریب نفوذ آن کمتر می‌شود.

در ادامه خواص ترموفیزیکی شامل C<sub>p</sub>, C<sub>v</sub> به روش دینامیک مولکولی تعادلی مورد بررسی قرار گرفت، نتایج نشان داد که با افزایش

- [21] Sarkar S. and Selvam R.P., Molecular dynamics simulation of effective thermal conductivity and study of enhanced thermal transport mechanism in nanofluids. *Journal of applied physics*, vol. 102, pp. 074302, 2007.
- [22] Hyžorek K. and Tretiakov K.V., Thermal conductivity of liquid argon in nanochannels from molecular dynamics simulations. *The Journal of chemical physics*, 144: p. 194507, 2016.
- [23] Chopkar M., Sudarshan S., Das P., and Manna I., Effect of particle size on thermal conductivity of nanofluid. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 39: p. 1535-1542, 2008.
- [24] Aberoumand S., Jafarimoghaddam A., Moravej M., Aberoumand H., and Javaherdeh K., Experimental study on the rheological behavior of silver-heat transfer oil nanofluid and suggesting two empirical based correlations for thermal conductivity and viscosity of oil based nanofluids, *Applied Thermal Engineering*, 101: p. 362-372, 2016.
- [25] Colangelo G., Favale E., Miglietta P., Milanese M., and de Risi A., Thermal conductivity, viscosity and stability of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-diathermic oil nanofluids for solar energy systems. *Energy*, 95: p. 124-136, 2016.
- [26] Sankar N., Mathew N., and Sobhan C., Molecular dynamics modeling of thermal conductivity enhancement in metal nanoparticle suspensions. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, vol. 35, pp. 867-872, 2008.
- [27] Philip J. and Shima P., Thermal properties of nanofluids. *Advances in colloid and interface science*, 183: p. 30-45, 2012.
- [28] Yu W., France D.M., Routbort J.L., and Choi S.U., Review and comparison of nanofluid thermal conductivity and heat transfer enhancements. *Heat Transfer Engineering*, 2008. 29: p. 432-460.
- [29] Zhou S. and Ni R., Measurement of the specific heat capacity of water-based Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanofluid. *Applied Physics Letters*, 92: p. 093123, 2008.
- [30] J.P. Meyer, S.A. Adio, M. Sharifpur, and P.N. Nwosu, The viscosity of nanofluids: a review of the theoretical, empirical, and numerical models. *Heat Transfer Engineering*, 37: p. 387-421, 2016.
- [31] Namburu P.K., Kulkarni D.P., Misra D., and Das D.K., Viscosity of copper oxide nanoparticles dispersed in ethylene glycol and water mixture. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 32: p. 397-402, 2007.
- [32] Esfe M.H., Afrand M., Gharehkhani S., Rostamian H., Toghraie D., and Dahari M., An experimental study on viscosity of alumina-engine oil: effects of temperature and nanoparticles concentration. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 76: p. 202-208, 2016.
- [33] Muller-Plathe F., Reversing the perturbation in nonequilibrium molecular dynamics: An easy way to calculate the shear viscosity of fluids. *Physical Review E*, 59(5): pp. 4894, 1999.
- [34] Fu Q., Zhu J., Xue Y., and Cui Z., Size-and shape-dependent melting enthalpy and entropy of nanoparticles. *Journal of Materials Science*, 52: p. 1911-1918, 2017.
- [35] Azmi W., Sharma K., Mamat R., Najafi G., and Mohamad M., The enhancement of effective thermal conductivity and effective dynamic viscosity of nanofluids—a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 53: p. 1046-1058, 2016.
- and Ni nanofluids. *An experimental and molecular dynamics study*, *Nano Energy*, vol. 27, pp. 213-22, 2016.
- [3] Lee S., Saidur R., Sabri M. and Min T., Effects of the particle size and temperature on the efficiency of nanofluids using molecular dynamic simulation, *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, vol. 69, pp. 996-1013, 2016.
- [4] Frank M., Drikakis D. and Asproulis N., Thermal conductivity of nanofluid in nanochannels. *Microfluidics and nanofluidics*, vol. 19, pp. 1011-1017, 2015.
- [5] Pham A.T., Barisik M. and Kim B., Molecular dynamics simulations of Kapitza length for argon-silicon and water-silicon interfaces. *International journal of precision engineering and manufacturing*, vol. 15, pp. 323-329, 2014.
- [6] Hu C., Bai M., Lv J., Wang P., Zhang L. and Li X., Molecular dynamics simulation of nanofluid's flow behaviors in the near-wall model and main flow model. *Microfluidics and nanofluidics*, vol. 17, pp. 581-589, 2014.
- [7] Zhang M., Lusetti E., de Souza L.E. and Müller-Plathe F., Thermal conductivities of molecular liquids by reverse nonequilibrium molecular dynamics. *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 109, pp. 15060-15067, 2005.
- [8] Ramires M.L., de Castro C.A.N., Nagasaka Y., Nagashima A., Assael M.J. and Wakeham W.A., Standard reference data for the thermal conductivity of water. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, vol. 24, pp. 1377-1381, 1995.
- [9] Bresme F. and Romer F., Heat transport in liquid water at extreme pressures: A non equilibrium molecular dynamics study. *Journal of Molecular Liquids*, vol. 185, pp. 1-7, 2013.
- [10] Mao Y. and Zhang Y., Thermal conductivity, shear viscosity and specific heat of rigid water models. *Chemical Physics Letters*, vol. 542, pp. 37-41, 2012.
- [11] Hu C., Bai M., Lv J. and Li X., An investigation on the flow and heat transfer characteristics of nanofluids by nonequilibrium molecular dynamics simulations. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, vol. pp. 1-12, 2016.
- [12] Leach A.R., *Molecular modelling: principles and applications*: Pearson education, 2001.
- [13] Pang J., Yang H., Ma J., and Cheng R., Solvation behaviors of N-isopropylacrylamide in water/methanol mixtures revealed by molecular dynamics simulations. *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 114, pp. 8652-8658, 2010.
- [14] Chen Z., Gu Q., Zou H., Zhao T., and Wang H., Molecular dynamics simulation of water diffusion inside an amorphous polyacrylate latex film. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, vol. 45, pp. 884-891, 2007.
- [15] Ennari J., Neelov I., and Sundholm F., Molecular dynamics simulation of the PEO sulfonic acid anion in water. *Computational and Theoretical Polymer Science*, vol. 10, pp. 403-410, 2000.
- [16] Chen Y.J., Xu G.Y., Yuan S.L., and Sun H.Y., Molecular dynamics simulations of AOT at isooctane/water interface, *Colloids and Surfaces A. Physicochemical and Engineering Aspects*, vol. 273, pp. 174-178, 2006.
- [17] Wu J.Y., Liu Q.L., Xiong Y., Zhu A.M., and Chen Y., Molecular simulation of water/alcohol mixtures, adsorption and diffusion in zeolite 4A membranes, *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 113, pp. 4267-4274, 2009.
- [18] Kucukpinar E. and Doruker P., Effect of absorbed water on oxygen transport in EVOH matrices. *A molecular dynamics study*, *Polymer*, vol. 45, pp. 3555-3564, 2004.
- [19] Rajabpour A., Akizi F.Y., Heyhat M.M., and Gordiz K., Molecular dynamics simulation of the specific heat capacity of water-Cu nanofluids. *International Nano Letters*, vol. 3, pp. 132. 1-6, 2013.
- [20] Kang H., Zhang Y., Yang M., and Li L., Nonequilibrium molecular dynamics simulation of coupling between nanoparticles and base-fluid in a nanofluid, *Physics Letters A*, vol. 376, pp. 521-524, 2012.