

دانگار تریت برس

الملحى وسكا في مارو للو شهريور ۱۳۹۲، دوره ۱۳ شماره ۶ ص ما ۱۲۵-۱۲۵

شبیهسازی دینامیک مولکولی جریان آرگون مایع درون نانو کانال با استفاده از تابع پتانسیلهای مختلف

حبيب امين فر"*، نير رزم آرا

۱- دانشیار مهندسی مکانیک، دانشگاه تبریز، تبریز ۲- دانشجوی دکترای مهندسی مکانیک، دانشگاه تبریز، تبریز hh_aminfar@tabrizu.ac.ir ،۵۱۶۶۶-۱۴۷۶۶

مجله علمى پژوهشر

چکیده- در مقاله حاضر، شبیهسازی دینامیک مولکولی جریان پوآزی حاوی آرگون مایع درون یک نانوکانال با اعمال نیروی خارجی روی ذرات سیال، با استفاده از تابع پتانسیلهای مختلف انجام شده است. برای محاسبه برهم کنشهای بین اتمها از سه مدل تابع پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، مختلف، استفاده شده است. مدلهای پتانسیلهای بین مولکولی مدل شده عبارتند از: پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۹، پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، پتانسیل مای مختلف انجام شده است. برای محاسبه برهم کنشهای بین اتمها از سه مدل تابع پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، محمات و رفتار هموار. انرژی پتانسیل پروفیلهای چگالی و سرعت در داخل کانال استخراج و بررسی شدهاند. نتایج حاصل نشان میدهند که مشخصات و رفتار هیدرودینامیکی جریان به نوع تابع پتانسیل برهم کنش وابسته بوده و پیشبینیهای پروفیل سرعت برای مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ بیشتر از پتانسیلهای لنارد-جونز ۶-۹۰ و لنارد-جونز ۵-۹۰ و استه بوده و پیشبینیهای پروفیل سرعت برای مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ بیشتر از پتانسیلهای لنارد-جونز ۵۰۲۱ و لنارد-جونز هموار میباشد. همچنین، در شرایط یکسان با اعمال مدل تابع پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹۰ سیستم شبیه مای دیرتر به تعادل میرسد که این امره موار میباشد. همچنین، در شرایط یکسان با اعمال مدل تابع پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹۰، سیستم شبیه ازی دیرتر به تعادل میرسد که این امره موجب افزایش زمان محاسبات میشود. نتایج حاصل از این تحقیق، تأثیر مدل جونز ۶-۹۰، سیستم شبیه مولکولی را در تحلیل و فهم جریانهای با مقیاس نانو نشان میدهد.

Molecular dynamics simulation of liquid argon flow in nanochannels using different potential functions

H. Aminfar^{1*}, N. Razmara²

Assoc. Prof., Mech. Eng., Tabriz Univ., Tabriz, Iran.
 PhD. Student, Mech. Eng., Tabriz Univ., Tabriz Iran.
 * P. O. B. 51666-14766 Tabriz, Iran. hh_aminfar@tabrizu.ac.ir

Abstract- In the present paper, Molecular Dynamics Simulation (MDS) is performed for Poiseuille flow of liquid Argon in a nanochannel by embedding the fluid particles in an external force with different potential functions. Three types of Lennard-Jones (LJ) potentials are used as interatomistic or molecular models for evaluations of interactions and density, velocity profiles across the channel are investigated. The interatomic potentials are LJ 12-6 potential, LJ 9-6 potential and LJ-Smooth potential. Density and velocity profiles across the channel are investigated. Obtained results show that hydrodynamic characteristics and behavior of flow depends on the type of interaction potential. It is shown that the LJ 9-6 predictions for velocity and temperature are larger than those of LJ12-6 and LJ-Smooth potentials. Also, applying LJ 9-6 results in further calculations time. The results show the effect of interaction force model on the understanding and analyzing of nanoscale flows.

Keywords: Molecular Dynamics Simulation, Nanochannel, Poiseuille Flow, Lennard-Jones.

۱– مقدمه

امروزه به دلیل پیشرفتهای علمی در زمینه ساخت تجهیزات در مقیاس میکرو و نانو، علم محاسباتی نانو به دلیل محدودیتهای آزمایشگاهی، روشی مناسب و کم هزینه برای شبیه سازی و بررسی مشخصات سیستمهای مورد نظر میباشد. به عبارت دیگر میتوان گفت علم محاسباتی نانو مکمل علم آزمایشگاهی نانو به شمار میآید. تعیین کمیتهای جریانی، برای طراحی درست و عملکرد بهینه تجهیزات میکرو و نانو و مخصوصاً درست و عملکرد بهینه تجهیزات میکرو و نانو و مخصوصاً تجهیزات پزشکی بسیار ضروری است. ماده از اتمها و مولکولها تشکیل شده است، اما در سطح ماکروسکوپی (مقیاسی که اشیا با چشم غیر مسلح قابل رویت میباشد) ماده به عنوان یک محیط پیوسته در نظر گرفته میشود.

با پدیدار شدن تجهیزات و تحقیقات در مقیاس نانو/میکرو، معادلات پیوستگی ارزش خود را از دست میدهند. توصیف پیوستاری از ماده در این مقیاس مولکولی در هم میریزد و برای محاسبه صحیح خواص مؤثر ماده، نیاز به توصیف ماده براساس خواص تکتک اتمها است. با وجود این که، از مدل محیط پیوسته، برای توصیف جریان سیالات در مقیاسهای مهندسی، در سطح وسیعی استفاده میشود، اما این مدل قادر به توصیف عوامل مؤثر در مقیاس مولکولی و غیر پیوسته مانند چرخش و تغییر شکل مولکولها، آثار الکترودینامیکی در مرز دیوار-سیال، پرش دمایی و آثار موئینگی نمیباشد. تمامیاین عوامل در سطح مولکولی خود را نشان میدهند و باعث ایجاد اختلافاتی بین نتایج تجربی و نتایج مبتنی بر مدل محیط پیوسته میشوند. این مشکل به ویژه در طی سالهای اخیر

یکی از روش های برخورد با مسائل در سطح مولکولی، در نظر گرفتن برهم کنش های تکتک مولکولها و رشد زمانی سیستم تا رسیدن به مرحله تعادل میباشد. سپس، خواص سیستم به صورت آماری قابل محاسبه میباشند. این چنین روش محاسباتی، شبیهسازی دینامیک مولکولی^۱ نامیده میشود (۱] که به عنوان یک رویکرد محاسباتی بسیار مهم در بررسی فیزیک جریان در این مقیاس مطرح میشود [۲-۴]. در طی سال های اخیر، مطالعات مهمی در زمینه بررسی هیدرودینامیک

جریان پوآزی به روش شبیهسازی دینامیک مولکولی انجام گرفته که در ادامه به بررسی برخی از این مطالعات علمی برجسته می پردازیم.

زیارانی و محمد [۵]، شبیهسازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی را برای جریان پوآزی مغشوش درون یک نانوکانال، انجام دادند. در این مطالعه دو نوع نیروی خارجی مغشوش، سینوسی و تابع پلهای، بر روی جریان داخل کانال اعمال شده است. این محققان، تابع پتانسیل برهم کنش ویک-چاندلر-الدرسن را برای مدل کردن پتانسیل بین اتمیدر نظر گرفتهاند. پروفیل سرعت منتجه از این کار تحقیقاتی، از نوع درجه دو بوده که تطابق خوبی با نتایج تحلیلی داشته است. همچنین تأثیر دو نوع نیروی خارجی مختلف بر روی انرژی کل، انرژی جنبشی و پروفیل سرعت و دمای سیستم بررسی شده است که نتایج حاصل نشانگر افزایش انرژی جنبشی و انرژی کل سیستم با افزایش مقدار نیروی خارجی اعمالی است. طغرایی و عظیمیان [۶]، جریان پوآزی در یک کانال باریک را با استفاده از روش دینامیک مولکولی شبیه سازی کردهاند. جریان پوازی آرگون مایع در یک نانوکانال با قرار دادن ذرات سیال در یک میدان نیرویی یکنواخت شبیهسازی شده است. پروفیلهای چگالی، سرعت و دما در عرض کانال بهدست آمدهاند. برای بهدست آوردن توزیع دمای یکنواختتر در عرض کانال از ترموستات گذاری موضعی در نزدیکی دیواره کانال استفاده شده است. نتايج بهدست آمده نشان مي دهند كه پروفيل سرعت، طول لغزش و سرعت لغزش به نیروی محرکه وابسته هستند.

کوسابا و همکاران [۲]، جریان پوآزی آب درون یک کانال باریک را با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی بررسی کردهاند. شبیهسازی برای عرض کانالها و ماده دیوارههای مختلف انجام گرفته است. در شبیهسازیها، خواص فیزیکی مواد و پتانسیل برهم کنش الکترواستاتیکی در نظر گرفته شدهاند. پروفیل سرعت و چگالی برای شبیهسازیهای مختلف بهدست آمدهاند. نتایج نشان میدهند که لغزش سرعت در دیواره نانوکانالها وجود دارد و به میزان شدت برهم کنش سیال-دیوار بستگی دارد. هانسن و اتوسن [۸]، با شبیهسازی دینامیک مولکولی جریان درون میکرو کانالها به این نتیجه رسیدند که پیشبینی هیدرودینامیکی ناویه استوکس برای

Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-28

^{1.} Molecular Dynamics Simulation

پروفیل سرعت در کانالهای با عرض کمتر از ۵ برابر قطر مولکولی نادرست میباشد. داویس و سومرز [۹]، با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی، تحلیل کاملی از پروفیل های سرعت و چگالی برای کانالهای با عرض ۸/۰-۶/۰ نانومتر ارائه کردهاند. سوفاس و همکاران [۱۰]، با اجرای شبیه سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی جریان پوآزی صفحه ای مایع آرگون به این نتیجه رسیدند که سهم پارامترهایی مانند دما و نیروهای خارجی در مقیاس نانو ناچیز است.

در جریانهای با مقیاس نانو، ساختار مولکولی سیال و سطح و پتانسیلهای برهم کنش آنها در مقیاس طولی مولكولى، نقش كليدى دارد. در اين مقياس اتمى، بررسى و دسته بندی تمامی پارامترهای تأثیر گذار ممکن بر پدیده جریان نانو مورد توجه ویژهای میباشد. در شبیهسازیهای دینامیک مولکولی پیشین، از پتانسیل لنارد- جونز ۶-۱۲ برای مدلسازی برهم کنش مولکولهای موجود در دامنه محاسباتی استفاده شده است. در حالی که اعمال توابع پتانسیل بین مولکولی مختلف و بررسی تأثیر آنها در هیدرودینامیک جریان در هیچ یک از کارهای تحقیقاتی گزارش نشده است [۸-۱۰]. به دلیل عدم امکان انجام آزمایشات در سطح نانو، از روش شبيهسازى ديناميک مولکولى استفاده مىشود. مدل توابع پتانسیل لنارد- جونز روابط نیمه تجربی هستند که آثار کوانتومی در استخراج آنها در نظر گرفته شده، لذا اعمال این توابع در واقع بررسی تأثیر روابط نیمه تجربی در پارامترهای نانوكانالها مىباشد.

هدف این مقاله، بررسی تأثیر مدل تابع پتانسیل برهم کنش بین مولکولی بر روی انرژی پتانسیل، جنبشی، انرژی کل، توزیع چگالی و سرعت جریان است. در این پژوهش، شبیهسازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی برای سه نوع مدل پتانسیل برهم کنش لنارد- جونز مختلف برای جریان درون نانوکانال در معرض یک نیروی محرک اولیه انجام میشود. انواع مدل پتانسیلهای بررسی شده توابع پتانسیل لنارد- جونز ۶-۱۲، پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ و پتانسیل لنارد- جونز هموار^۲ می باشد. این مدلها در الگوریتم دینامیک مولکولی اعمال شده و رفتار هیدرودینامیکی جریان پوآزی بررسی و شبیه ازی شده است.

با توجه به این شکل، ابتدا مکان و سرعت اولیه ذرات تعیین

۲– شبیهسازی دینامیک مولکولی

شبیه سازی دینامیک مولکولی، یک ابزار قدر تمند در بررسی جریان سیالات درون نانو کانالها می باشد. مبنای اصلیِ این روش، حل معادلات نیوتن در حرکت مولکولها با در نظر گرفتن پتانسیل برهم کنش بین مولکولها و عوامل مؤثر خارجی می باشد. با این روش، سیستم در گامهای زمانی مختلف شبیه سازی شده و سپس پارامترهای تعادلی و مشخصات شبیه سازی دینامیک مولکولی، در مقایسه با دیگر روش های شبیه سازی دینامیک مولکولی، در مقایسه با دیگر روش های مدل سازی در مقیاس نانو، یک روش مؤثر و دقیق در مطالعه رفتارهای جریانی و انتقال حرارتی نانو سیالات درون میکرو و نانو کانالها می باشد. شبیه سازی دینامیک مولکولی، حرکت هر مدل می کند. به طور خلاصه این روش، تصویری از حرکت مدل می کند. به طور خلاصه این روش، تصویری از حرکت مولکول ها در هنگام برخورد با یکدیگر و برخورد احتمالی با محیط اطراف را ایجاد می کند.

در شکل ۱، روندنمای شبیهسازی دینامیک مولکولی نشان داده شده است.



[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-28 [Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-28

DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.6.1.3

^{1.} Lennard-Jones

^{2.} Smooth

می شود. بعد از محاسبه نیروهای بین مولکولی بر حسب تابع پتانسیل و اعمال شرایط شبیه سازی، معادلات حرکت انتگرال گیری شده و مکان و سرعت جدید ذرات در هر مرحله ثبت می شود.

این حلقه مدام تکرار می شود تا زمانی که تعادل در سیستم حاصل شود و در نهایت، مقادیر متوسط کمیتهای ترمودینامیکی و خروجی های شبیه سازی بررسی می شوند.

شبیهسازی دینامیک مولکولی، با انتگرالگیری قانون دوم نیوتن شروع میشود و با اعمال روشهای انتگرالگیری مناسب مانند الگوریتم اختلاف محدود گییر یا روش ورله، پارامترهای دینامیکی مانند مکان و سرعت ذرات تعیین میشوند. سپس با استفاده از تحلیل مکانیک آماری، مشخصات فیزیکی ماکروسکوپی مانند فشار، سرعت متوسط، دما، چگالی عددی ذره و غیره تعیین میشود. بر اساس روش شبیهسازی دینامیک مولکولی، معادله دیفرانسیلی قانون دوم نیوتن برای هر مولکول به صورت رابطه (۱) نوشته میشود [۱].

$$m_{i}\frac{d\vec{r}^{2}}{dt^{2}} = \sum_{j_{w}\neq i}^{N} \vec{F}_{ij} + \sum_{j_{w}\neq i}^{N_{w}} \vec{F}_{ijw} + \vec{F}_{sou}\vec{i}$$
(1)

در این معادله زیرنویس i نشانگر ذره iام و بردار \bar{i} ، بردار واحد در جهت x است. عبارت اول در سمت راست معادله، نیروی مولکولی ناشی از پتانسیل لنارد- جونز بین ذره iام و مولکولهای دیگر سیال در دامنه محاسباتی میباشد. عبارت دوم، نیروی مولکولی بین ذره iام و تمام ذرات دیوار جامد jاست و عبارت آخر نشانگر نیروی خارجی است که باعث انحراف سیال از حالت تعادل میشود. نمونهای از این نیروها، نیروی گرانشی، نیروی الکتریکی، نیروی مغناطیسی و مانند آن است.

۳- مدلسازی عددی و جزئیات شبیهسازی

برای بررسی اثر مدل پتانسیل برهم کنش بر روی مشخصات هیدرودینامیکی جریان، نیروی برهم کنش بین هر جفت از مولکولها محاسبه و در شبیهسازی اعمال میشود. با اعمال یک مدل پتانسیل دوجسمیدر شبیهسازی، معادله دیفرانسیلی حرکت ذرات برای هر ذره به شکل زیر بیان میشود:

$$m_{i}\frac{d^{2}\vec{r}_{ij}}{dt^{2}} = -\sum_{j\neq i}\frac{\partial\varphi(\vec{r_{ij}})}{\partial r_{ij}} + \vec{F}_{\text{ext}}$$
(7)

، نیروی خارجی وارد بر هر مولکول میباشد. اعمال، نیرو بر مولکولها باعث تغییر در انرژی پتانسیل آنها در هنگام حرکت به واسطه میدان خارجی اعمالی میشود.

شکل ۲، طرحوارهای از مدل شبیهسازی را نشان میدهد. اتمهای سیال آرگون بین دو دیوار جامد از جنس مس قرار میگیرند. دیوارها مرز جامد هستند و در طول شبیهسازی ثابت میباشند، به عبارت دیگر سرعت و نیروی وارد بر اتمهای دیوارها همواره برابر صفر میباشد. اتمهای سیال متحرک میباشند و تحت تأثیر نیروی خارجی در جهت جریان حرکت میکنند.

شرایط مرزی تناوبی^۱ در جهت جریان، یعنی در طول محورهای x و y اعمال میشود. یعنی هر ذرمای که از یک سمت جریان وارد سیستم میشود، ذرمای دقیقاً یکسان با آن از سمت دیگر جریان خارج میشود. لذا تعداد کل ذرات موجود در سیستم ثابت میباشد که به آن مجموع آماری میکروکانونی گفته میشود [۱].



شکل ۲ طرحواره ای از مدل شبیهسازی جریان پوآزی درون نانوکانال

برخورد ذرات در مرز مشترک سیال- جامد (آرگون-مس)، همانند برخورد دیگر ذرات سیال میباشد. تنها تفاوتی که وجود دارد در میزان نیروی برهم کنش بین ذرهای است. نیروی برهم کنش، مشتق تابع پتانسیل برهم کنش است و با تغییر ضرایب برهم کنش موجود در تابع پتانسیل برهم کنش، تغییر مییابد، لذا،

^{1.} Periodic Boundary Condition

با تغییر پارامترهای برهم کنش سطح مشترک، میتوان ضرایب مدل پتانسیل را در سطح مشترک سیال-جامد تغییر داد.

ابتدا چیدمان تمامیذرات موجود در دامنه شبیهسازی با انتخاب یک ساختار شبکه اولیه مشخص میشود. بیشتر اجسام موجود در طبیعت دارای ساختار شبکهای مرکز پر-وجوه پر میباشند. لذا کل ذرات موجود (اتمهای سیال و دیوار) با ساختار اولیه از نوع ساختار شبکهای مرکز پر-وجوه پر¹ در سیستم شبیهسازی چیده میشوند [۱].

شکل ۳، یک سلول واحد با ساختار شبکهای مرکز پر-وجوه پر را نشان میدهد. اتمهای این شبکه در مراکز وجوه و گوشههای یک مکعب قرار گرفتهاند. در کل برای این شبکه، تعداد نقاط شبکه به ازای هر سلول برابر $4 = \frac{1}{6} \times 6 + \frac{1}{8} \times 8$ میباشد. پس از چیدمان اولیه، ذرات با توزیع سرعت تصادفی اولیه شروع به حرکت میکنند. توزیع سرعت ماکسول-بولتزمن، یک توزیع سرعت اولیه میباشد. توزیع سرعتهای یک گاز ایدهآل در دمای *T* از رابطه (۳) بهدست میآید [۱].

$$P(v) = \left[\frac{m}{2\pi k_B T}\right]^{\frac{3}{2}} \exp\left[-\frac{m\left(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2\right)}{2k_B T}\right]$$
(7)

T معادله توزیع ماکسول – بولتزمن احتمال اینکه در دمای T معادله توزیع ماکسول – بولتزمن احتمال اینکه در دمای می کند. سرعت اتم i با جرم m_i برابر v_i باشد، را پیش بینی می کند. توزیع ماکسول – بولتزمن یک توزیع گاوسی است که می توان آن را با استفاده از یک تولید کننده اعداد تصادفی به دست آورد.



شکل ۳ سلول واحد با ساختار شبکهای مرکز پر-وجوه پر

مدل مورد استفاده برای شبیه سازی مولکولی یک سیستم فیزیکی، با انتخاب یک تابع پتانسیل مناسب، حاصل می شود. در واقع با تعیین نوع و ضرایب تابع پتانسیل، سعی می شود تا تمامی آثار کوانتومی در آن قرار گیرد. تابع پتانسیل معروف

لنارد- جونز برای شبیهسازی طیف وسیعی از مواد ساده مانند گازهای بیاثر و برخی فلزات و همین طور شبیه سازی پیوندهای از نوع واندروالس استفاده می شود. φ_{ij} ، پتانسیل لنارد- جونز از رابطه (۴) به دست می آید [۱].

$$\varphi_{ij} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{6} \right]$$
(f)

در این رابطه، r_{ij} فاصله بین دو مولکول، σ مقیاس طول مولکولی و \mathcal{F} پارامتر شدت برهم کنش است. در شبیهسازی دینامیک مولکولی شعاع قطع r_c ، فاصلهای است که فرض میشود در بیشتر از این فاصله مولکولها با یکدیگر برهم کنش ندارند. مقادیر پارامترهای σ و \mathcal{F} بر حسب نوع مولکولهای سیال و دیوار تغییر میکنند.

در نهایت با ترکیب معادلات (۲) و (۴) و اعمال مفاهیم پتانسیل انتقال یافته و نیروی انتقال یافته، به معادله اصلی برای هر ذره سیال میرسیم. روش نیروی انتقال یافته بیانگر این است که نیروی بین مولکولی میان ذره سیالی i و ذرات دیگر سیال یا ذرات دیگر دیوار جامد با زیاد شدن فاصله بین آنها از شعاع قطع، صفر در نظر گرفته میشود. مزیت اصلی این کار، کاهش چشمگیر زمان محاسباتی در انتگرالگیری نیرو است [1].

پتانسیل لنارد- جونز ۶-۹، از پتانسیلهای دوجسمیمعروف میباشد که دارای رابطه (۵) میباشد.

$$\varphi_{ij} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^9 - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad , \quad r < r_c \qquad (\Delta)$$

تمامیپارامترهای موجود در رابطه فوق همانند پتانسیل لنارد-جونز ۶–۱۲ میباشد.

پتانسیل لنارد- جونز هموار، نوع دیگری از پتانسیل بین مولکولی است که برهم کنشهای لنارد- جونز را با اعمال هموارسازی نیرو بین شعاع قطع داخلی و خارجی محاسبه میکند. این مدل پتانسیل دارای رابطه (۶) میباشد.

$$\varphi_{ij} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{6} \right] , \quad r < r_{in}$$

$$F = C_{1} + C_{2} (r_{ij} - r_{in}) + C_{3} (r_{ij} - r_{in})^{2} + C_{4} (r_{ij} - r_{in})^{3} , \quad r_{in} < r_{ij} < r_{c}$$

$$(F)$$

$$A = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \frac{1$$

^{1.} Face-Centered-Cubic (FCC)

 $\sigma_{Cu-Ar} = \frac{(\sigma_{Cu} + \sigma_{Ar})}{2}$ (٩)

 $\varepsilon_{Cu-Ar} = \sqrt{\varepsilon_{Cu}\varepsilon_{Ar}}$ $(1 \cdot)$

پارامترهای پتانسیل لنارد- جونز برای برهم کنشهای بین اتمیآرگون و مس در جدول ۲ آمده است.

برای افزایش کیفیت محاسبات، نیروهای برهم کنش بین مولکولی در شعاع قطع $r_c=3\sigma$ صفر می شوند. شعاع قطع، فاصلهای است که در بیشتر از آن، نیروی پتانسیل بین اتمها صفر در نظر گرفته می شود. تمامی برهم کنش های بین مولکولی (مايع-مايع، جامد-جامد، مايع-جامد) با پتانسيل لنارد-جونز مدل می شوند. متناسب با ساختار شبکهای و چگالی سیال مورد نظر، سیال حاوی $N_f = 3780$ مولکول میباشد و تعداد کل مىباشد. مولكول هاى دامنه شبيهسازى برابر $N_{
m total} = 5220$ مىباشد. نیروی محرک خارجی در امتداد x به هر ذره سیال در طول شبیهسازی وارد می شود. کار تولید شده ناشی از نیروی خارجی به گرما تبدیل می شود که برای جلوگیری $ec{F}_{
m ext}=0.1arepsilon/\sigma^2$ از افزایش دمای سیستم، این گرما باید از طریق مولکولهای سیال به دیوار انتقال یابد. لذا از یک ترموستات برای دفع گرمای سیستم و ثابت نگه داشتن دمای دیوار استفاده میشود.

دستگاه گاهیده لنارد- جونز	جدول ۱
واحد كاهيده	كميت
L/σ	طول
Ε/ε	انرژی
$ ho\sigma^3$	چگالی
$v/(\frac{\sigma}{\tau})$	سرعت
$T / \left(\frac{\varepsilon}{k_B}\right)$	دما
$t/\left(rac{m^{1/2}\sigma}{\varepsilon^{1/2}} ight)$	زمان
$F/\left(\frac{\varepsilon}{\sigma^2}\right)$	نيرو

جدول ۴ پارامترهای پتانسیل لنارد-جونز			
σ (nm)	ε (J)		
0.3405	1.6539×10^{-21}	آرگون	
0.2338	65.5815×10^{-21}	مس	

این ترموستات از نوع مقیاس بندی سرعت بوده و در هر

می شوند که نیرو بین شعاع قطع داخلی r_{in} و شعاع قطع خارجی r_c به صورت هموار تغییر کند. در شعاع قطع داخلی، نيرو و مشتقات اول آن مطابق با فرمول لنارد- جونز ناهموار است، اما در شعاع قطع خارجی، نیرو و مشتقات اول آن برابر صفر خواهد بود.

معمولاً در شبیهسازی دینامیک مولکولی با اعداد خیلی کوچک سروکار داریم که برای جلوگیری از افزایش حجم محاسبات و ایجاد خطاهای محاسباتی، از واحدهای کاهیده استفاده می کنیم. برای مثال طول واقعی را بر ثابت σ تقسیم می کنیم و نتیجه را بر حسب واحد کاهیده σ بیان می کنیم. در صورت نیاز در پایان شبیه سازی، طول را در σ ضرب کرده تا به واحد اصلی خود برگردد. یکی از واحدهای کاهیده معمول در ديناميک مولکولي، دستگاه واحد کاهيده لنارد- جونز است. جدول ۱ برخی از واحدهای کاهیده لنارد-جونز را بیان میکند. از این رو، تمامی پارامترها به صورت بیبعد شده در شبیه سازی $30\sigma imes 24\sigma imes$ قرار گرفتهاند. ابعاد کانال شبیهسازی شده $\sigma imes 24\sigma$ میباشد و آرگون مایع به عنوان سیال عامل در نظر گرفته 8σ میشود. دمای سیستم شبیهسازی برابر $K_b T/arepsilon = 1$ و چگالی عددی سیستم برابر $ho\sigma^3 = 0.81$ میباشد. تحت این شرایط می توان آرگون را به عنوان یک سیال متراکم حدوداً ۳۰٪ بالاتر از دمای ذوب فرض کرد.

عدد نادسن به صورت نسبت مسافت آزاد میانگین مولکولی به بعد مشخصه سیستم تعریف می شود. این عدد شاخص تحلیل جریان پیوسته و مولکولی درون نانوکانالهاست. با انتخاب ابعاد و چگالی عددی سیستم شبیهسازی، تحلیل جریان لغزشی مولکولی در نانوکانال مورد نظر صادق میباشد.

دمای لحظهای ذرات در طول شبیهسازی به روش تئوری انرژی جنبشی به صورت روابط (۷) و (۸) حاصل می شود.

$$\frac{3}{2}Nk_bT = KE(t) \tag{V}$$

2

$$KE(t) = \frac{1}{2} \sum_{1}^{N} m_i v_i^2 \tag{A}$$

انرژی پیوندی و فاصله پیوندی بین اتمهای آرگون-مس در سطح مشترك سيال- ديوار برطبق قانون اختلاط لورنتز-برتولت بەدست مىآيد:

مرحله با مقیاس بندی سرعتها و به دنبال آن با مقیاسبندی دمای لحظهای براساس تئوری انرژی جنبشی، دمای مرزها ثابت نگه داشته میشوند.

معادلات حرکت با استفاده از الگوریتم سرعت ورلت (انتگرالگیری می شوند [۱]. برای یافتن مکان و سرعت ذره در گام بعدی، محاسبه نیروهای بین مولکولی ضروری است. نیروهای وارد بر هر ذره سیال و دیوار جامد با استفاده از مدل پتانسیل برهم کنش بین مولکولهای سیال و سیال-دیوار، به طور جداگانه محاسبه می شوند. دامنه محاسباتی حاوی سیال تک اتمی بین دو دیوار موازی با اعمال سه مدل متفاوت از پتانسیل لنارد جونز، شبیهسازی میشود. گام زمانی شبیهسازی برابر $au = (m\sigma^2/arepsilon)^{rac{1}{2}}$ برابر 0.001 au بوده که $au = (m\sigma^2/arepsilon)^{rac{1}{2}}$ می باشد. در ابتدای شبیه سازی، ذرات با آرایش شبکه ای مرکز یر-وجوه پر در مکانهای اولیه قرار می گیرند. سیس برای رسیدن به دمای مطلوب با سرعتهای اولیه تصادفی رشد می کنند. در هر مدل، سیستم پس از طی گام زمانی مشخص به تعادل می سد. سیس، پس از مرحله تعادل شبیه سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی تا ۳۰۰۰۰۰ گام زمانی ادامه می یابد. در انتها، توزیع انرژی، پروفیل چگالی و سرعت سیستم تحت شرایط مختلف مدلسازی شده و استخراج می شوند.

۴- بحث و نتایج

نتایج حاصل از کد به صورت انرژی کل و انرژی پتانسیل در گامهای زمانی شبیهسازی برای سه نوع مدل تابع پتانسیل مختلف در شکل ۴ ارائه شده است. انرژی کل سیستم حاصل جمع انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل مولکولها میباشد. انرژی پتانسیل تابع مدل برهم کنش بین مولکولی بوده و انرژی جنبشی تابع نیروی خارجی اعمالی بر سیستم میباشد. نتایج نشان میدهد که با پیشرفت زمانی سیستم، انرژی سیستم شبیهسازی در هر سه مدل همگرا میشود و این نشانه به تعادل رسیدن سیستم است. زمان همگرا شدن انرژی کل سیستم در مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ بیشتر از دو مدل دیگر میباشد، به عبارت دیگر مدل برهم کنش لنارد-جونز ۶-۹ دیرتر از دو مدل دیگر به تعادل میرسد.

DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.6.1.3





انرژی کل=

100000

گام زمانی

ب- پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲

انرژی کل

انرژی پتانسیل

200000

گام زمانی

ج- پتانسیل لنارد-جونز هموار **شکل ۴** انرژی کل و انرژی پتانسیل سیستم

انرژی پتانسیل=

200000

300000

300000



100000

^{1.} Verlet Velocity

حبيب امين فر و همكار

لذا استفاده از مدل تابع لنارد-جونز ۶–۱۲ و نوع هموار آن باعث کاهش زمان همگرایی سیستم می شود که این به نوبه خود، زمان محاسبات برای اعمال عوامل خارجی را کاهش مىدهد. با توجه به اين نمودارها، همان طور كه انتظار مىرفت، انرژی پتانسیل تحت تأثیر مدل تابع پتانسیل برهم کنش تغییر می یابد. مدل تابع پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ دارای انرژی پتانسیل کمتر (حدود ۰/۱) و به تبع آن دارای انرژی کل کمتری از دو مدل دیگر میباشد. همچنین، مقادیر متوسط انرژی کل در مقایسه با مقادیر انرژی پتانسیل دارای یک مقدار افزایشی است که به دلیل اضافه شدن انرژی جنبشی ناشی از اعمال نیروی خارجي است.

در شکل ۵، انرژی جنبشی سیستم برای سه مدل تابع پتانسیل رسم شده است. با اعمال مدل تابع پتانسیل لنارد- جونز ۶-۹، انرژی جنبشی سیستم دیرتر همگرا می شود. یعنی با اعمال این تابع پتانسیل، پاسخ سیستم به نیروی خارجی دیرتر خواهد بود. همان طور که مشاهده می شود، انرژی جنبشی این مدل یتانسیل بیشتر از دو مدل دیگر میباشد که این نشان میدهد که اعمال این مدل پتانسیل باعث تأثیرپذیری انرژی کل از انرژی جنبشی میشود.

با مقایسه شکل ۴- الف و شکل ۵ می توان روند یکسان تغییر انرژی جنبشی و انرژی کل سیستم با اعمال این مدل پتانسیل را مشاهده کرد.



شکل ۵ انرژی جنبشی سیستم برای سه نوع مدل تابع پتانسیل برهم كنش بين مولكولى مختلف

در شکل ۶، توزیع چگالی در گامهای زمانی مختلف به ترتيب برای پتانسيل لنارد-جونز ۶-۹، پتانسيل لنارد-جونز ۶-۱۲ و پتانسیل لنارد-جونز هموار نشان داده شده است. برای محاسبه پروفیلهای چگالی عددی و سرعت، نانوکانال در راستای محور z به n قسمت تقسیمبندی میشود. اصطلاحاً هر یک از این قسمتها، "بین⁽" (قفسه) نامیده می شود. هر یک از این قفسهها دارای حجم Lx × Ly × (H/n) میباشد. در این مقاله دامنه شبیهسازی به ۲۴ قفسه تقسیم شده است. چگالی عددی سیال، به صورت تعداد اتمهای قرار گرفته در هر قسمت در یک گام زمانی مشخص بیان می شود. این تعداد اتمها در کل زمان شبیهسازی، متوسط گیری می شوند و یک مقدار با متوسط گیری زمانی برای هر قسمت بهدست میآید.

برای مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، شکل ۶- الف، نقطه اوج چگالی سیال در لایههای نزدیکی دیواره بیشتر از لایههای میانی سیال میباشد. مشاهده می شود که با گذشت زمان، اوج چگالی گسترش یافته و دامنه آن کاهش مییابد و در نهایت در حالت تعادل، توزيع مولكولهاي سيال مخصوصاً در لايههاي نزدیکتر به دیواره به طور غیر یکنواخت می باشد.

همچنین در طول گامهای زمانی مختلف، نوسانات در پروفیل چگالی به طور کاملاً آشکار قابل تشخیص است، در نتیجه سیستم با پتانسیل بین مولکولی لنارد-جونز ۶-۹ دیرتر به حالت تعادل میرسد. ضرایب توانی نیمه تجربی در مدل یتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، باعث ایجاد نوسانات و نامتقارن شدن پروفیل چگالی عددی سیال میشود.

برای مدل یتانسیل لنارد-جونز ۶–۱۲، شکل ۶– ب، توزیع مولکول های سیال در گامهای زمانی مختلف تقریباً یکنواخت بوده و رفتار متقارن آن نسبت به صفحه میانی کانال کاملاً مشهود است. همچنین در نزدیکی دیواره کانال، یک نقطه اوج کوچک در توزیع چگالی سیال مشاهده می شود که در ادامه آن دامنه نوسانات شدیداً کاهش یافته و در نهایت پروفیل چگالی عددی تقریباً در مرکز کانال، به حالت یکنواخت در می آید. در شکل۶- ج، پروفیل چگالی مربوط به مدل پتانسیل لنارد-

جونز هموار، نشان میدهد که با گذشت زمان، نوسانات بسیار کمیدر توزیع مولکولهای سیال دیده می شود و رفتار متقارن آن مشابه مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲ است.

1. Bin

Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-28











شکل ۶ توزیع چگالی در گامهای زمانی مختلف

دلیل این امر، پارامترهایی است که جهت هموارسازی نیرو و مشتقات آن در مدل لنارد-جونز هموار، به کار رفته است. به طور کل مدلهای پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲ و لنارد-جونز هموار، تأثیر چندانی در چیدمان اتمهای سیال ندارند.

در گام زمانی ۳۰۰۰۰۰ کمیتهای مورد نظر را نمونهبرداری کرده و به تحلیل نتایج پرداخته می شود. در شکل ۷، پروفیل چگالی برای هر سه نوع مدل پتانسیل در گام زمانی انتهایی نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود، مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ باعث تغییر در چیدمان اتمهای سیال می شود. با اعمال این مدل پتانسیل برهم کنش بین مولکولی، مولکولهای سیال در نزدیک دیوارهها زیادتر بوده و سپس توزیع آنها در لایههای نسبتاً دورتر از دیواره کم شده و در نهایت در لایههای میانی سیال یکنواخت می شود. همچنین دو مدل دیگر تنها در ناحیه کوچک نزدیک به دیوارها گسترش یافته و در بقیه نواحی کانال یکنواخت می بشد.

پروفیل سرعت برای مدل توابع پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، لنارد-جونز ۶-۱۲ و لنارد-جونز هموار در شکل ۸، در گامهای زمانی مختلف تا رسیدن به حالت تعادل و در زمانهای بعد از آن نیز نشان داده شده است.

برای بهدست آوردن پروفیلهای سرعت جریانی، سرعت متوسط برای هر قسمت و در هر گام زمانی محاسبه می شود و سپس تمامیاین مقادیر متوسط گیری می شوند. این پروفیل ها با متوسط گیری آماری سرعت تک تک اتم ها به دست می آیند.



شکل ۷ تأثیر پتانسیل برهم کنش بر توزیع چگالی در گام زمانی ۳۰۰۰۰۰



شکل ۸ توزیع سرعت در گامهای زمانی مختلف

نکته اساسی قابل توجه در هر سه مدل این است که پروفیل سرعت پس از طی گام زمانی مشخص به حالت تعادل می رسند، اما زمان رسیدن به حالت تعادل در هر یک از مدل ها متفاوت است. پروفیل سرعت مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ در گام زمانی ۲۰۰۰۰ و برای دو مدل پتانسیل دیگر در گام زمانی ۲۰۰۰۰ به تعادل می رسد. همان طور که از نتایج مربوط به انرژی سیستم انتظار می رفت، در شرایط یکسان شبیه سازی، پروفیل سرعت مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ دیرتر به تعادل می رسد که باعث افزایش زمان محاسبات شبیه سازی می شود. همچنین برای مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، نوسانات پروفیل سرعت در گام های زمانی بعد از تعادل در مقایسه با دو مدل دیگر کمتر می باشد.

مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶–۱۲ دارای بیشترین نوسانات سرعت میباشد. این نوسانات با اعمال مدل پتانسیل لنارد-جونز هموار بهبود مییابد که دلیل آن، ضرایب هموارسازی نیرو به مقداری بیشتر از لنارد-جونز ۶–۱۲ میباشد.

طبق نتایج تحلیلی موجود در ادبیات فن، پروفیل سرعت جریان پوآزوی به صورت سهموی است [۵]. نتایج حاصل از کار دینامیک مولکولی حاضر، نشان میدهد که پس از رسیدن، منحنی خورانی سهموی پروفیل سرعت تطابق بسیار خوبی را با نتایج تحلیلی دارند. مخصوصا برای مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، پرش در مقادیر سرعت بسیار کم است.

مقایسه بین پروفیلهای سرعت مدلهای مختلف تابع پتانسیل در شکل ۹ در گام زمانی ۳۰۰۰۰۰ نشان داده شده است. نتایج بیانگر این حقیقت هستند که اوج مقدار سرعت برای مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶–۹ بیشتر از مقادیر متناسب با دو مدل پتانسیل دیگر میباشد. علت این امر ناشی از ضرایب توانی مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶–۹ اعمال شده بین مولکولها و به واسطه نیروهای متوسط گیری شده بزرگ در جریان درون نانوکانال میباشد. همان طور که در نتایج بخش قبل مشخص شد، انرژی جنبشی مربوط به این تابع پتانسیل بیشتر از دو مدل دیگر میباشد، لذا باعث افزایش سرعت مولکولها میشود. همچنین با اعمال مدل پتانسیل لنارد-جونز هموار، مقدار سرعت کمیبیشتر از مقدار لنارد-جونز ۶–۱۲ میباشد که این امر نیز ناشی از ضرایب تصحیح در فواصل قطع تابع

پتانسیل میباشد.



شکل ۹ تأثیر پتانسیل برهم کنش بر توزیع سرعت در گام زمانی ۳۰۰۰۰۰

۵- نتیجهگیری

شبيهسازى ديناميك مولكولى غيرتعادلى براى جريان پوآزى صفحهای حاوی مایع آرگون درون نانوکانال انجام شده است. دیوارهای کانال با اعمال ترموستات مناسب در دمای ثابت نگه داشته می شوند. تأثیر مدل تابع پتانسیل برهم کنش روی توزیع انرژی سیستم، چگالی سیال و سرعت درون نانوکانال مطالعه شده است. نتایج نشان می دهند که مدل یتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ نسبت به دو مدل دیگر دارای مقادیر سرعت بیشتری می باشد که این امر منجر به رفتاری کاملاً متفاوت با رفتار مورد انتظار تئوری پیوستگی میشود. سیال در لایههایی مجزا قرار گرفته و پروفیل چگالی در بسیاری از نواحی داخلی سطح کانال یکنواخت میباشد اما در نزدیکیهای دیوارها تجمع اتمها زیاد می باشد. در مدل های یتانسیل لنارد-جونز ۶–۱۲ و هموار، دامنه نوسانات در پروفیل چگالی چندان چشمگیر نبوده و مى توان گفت تقريباً ثابت مى ماند، اما مدل لنارد-جونز ۶-۹ دارای توزیع چگالی غیر یکنواخت می باشد. با منحنی خورانی روی پروفیل سرعت، منحنی سهموی با روند بسیار خوبی بر روی دادههای حاصل از شبیهسازی میافتد. این پروفیل مطابق با نتیجه حاصل از تئوری جریان پوآزی میباشد که در آن توزيع سرعت درون كانال همواره سهموى است. گرچه مدل یتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ باعث ایجاد اختلافاتی در مشخصات

هیدرودینامیکی سیستم میشود اما اعمال این مدل باعث همگرایی دیرتر نتایج میشود؛ لذا ضرایب این مدل پتانسیل نیمه تجربی باعث افزایش زمان محاسبات میشود. این مدلهای پتانسیل در سطح ماکرو در نظر گرفته نمیشوند، اما تأثیر آنها باید در طراحی سیستمهای حاوی سیال با مقیاس نانو در نظر گرفته شود.

۶- فهرست علايم

$$F$$
 نیروی بر هم کنش (N)

 (N)
 نیروی خارجی (N)

 F_{ext}
 (N)
 T_{ext}
 (N)

- [1] Allen M.P., Tildesley D.J., "Computer Simulation of Liquids", Oxford University Press, Oxford, 1989.
- [2] Priezjev N.V., Darhuber A.A., Troian S.M., "Slip Behavior in Liquid Films on Surfaces of Patterned Wettability: Comparison between Continuum and Molecular Dynamics Simulations", *Phys. Rev.* E, Vol. 71, 2005.
- [3] Karniadakis G.E., Beskok A., Aluru N., "Microflows and Nanoflows: Fundamentals and Simulation", *Springer, Heidelberg*, New York, 2nd ed, 2005.
- [4] Cieplak M., Koplik J., Banavar J.R., "Application

DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.6.1.3

شبیهسازی دینامیک مولکولی جریان آرگون مایع درون . . .

Polish Academy of Sciences: Technical Sciences, Vol. 57, No. 1, pp. 55-61, 2009.

- [8] Hansen, J.S., and Ottesen, J.T., "Molecular Dynamics Simulations of Oscillatory Flows in Microfluidic Channels", *Journal of Micro Fluidic* and Nano Fluidic, Vol. 2, pp. 301-307, 2006.
- [9] Somers, S.A., and Davis, H.T., "Microscopic Dynamics of Fluids Confined Between Smooth and Atomically Structured Solid Surfaces", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 96, pp. 5389- 5407, 1991.
- [10] Sofos, F., Karakasidis, T.E., and Liakopoulos, A., "Non-equilibrium Molecular Dynamics Investigation of Parameters Affecting Planer Nanochannel Flows", *Journal of Contemporary Engineering Science*, Vol. 2, pp. 283-298, 2009.

of Statistical Mechanics in Subcontinuum Fluid Dynamics", *Physica* A, Vol. 274, No. 1, pp. 281-293, December 1999.

- [5] Ziarani A.S., Mohamad A.A., "A Molecular Dynamics Study of Perturbed Poiseuille Flow in a Nanochannel", *Microfluid Nanofluid*, Vol. 2, pp. 12–20, 2005.
- [6] Toghraie D., Azimian A.R., "Non-Equilibruim Molecular Dynamics Simulation of Poiseuille Flow in a Nanochannel", *Iranian Journal of Mechanical Engineering*, Vol. 1, No. 1, pp. 21-33, March. 2010.
- [7] Kucaba-Pietal A., Walenta Z., and Peradzyński Z., "Molecular Dynamics Computer Simulation of Water Flows in Nanochannels", *Bulletin of the*