



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

حبیب امین فر^{۱*}، نیر رزم آرا^۲

۱- دانشیار مهندسی مکانیک، دانشگاه تبریز، تبریز

۲- دانشجوی دکتری مهندسی مکانیک، دانشگاه تبریز، تبریز

* تبریز، صندوق پستی ۵۱۶۶۶-۱۴۷۶۶، hh_aminfar@tabrizu.ac.ir

چکیده- در مقاله حاضر، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جریان پوآزی حاوی آرگون مایع درون یک نانوکanal 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 لnard-جونز مختلف، استفاده شده است. مدل‌های پتانسیل‌های بین مولکولی مدل شده عبارتند از: پتانسیل لnard-جونز ۶-۱۲، پتانسیل لnard-جونز ۶-۹، پتانسیل لnard-جونز 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 لnard-جونز ۶-۹ بیشتر از پتانسیل‌های لnard-جونز ۶-۱۲ و لnard-جونز هموار می‌باشد. همچنین، در شرایط یکسان با اعمال مدل تابع پتانسیل لnard-جونز ۶-۹، سیستم شبیه‌سازی دیرتر به تعادل می‌رسد که این امر موجب افزایش زمان محاسبات می‌شود. نتایج حاصل از این تحقیق، تأثیر مدل نیروی برهم کنش بین مولکولی را در تحلیل و فهم جریان‌های با مقیاس نانو نشان می‌دهد.

کلیدواژگان: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، نانوکanal، جریان پوآزی، لnard-جونز.

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

H. Aminfar^{1*}, N. Razmara²

1- Assoc. Prof., Mech. Eng., Tabriz Univ., Tabriz, Iran.

2- 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 interatomic 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 شبیه‌سازی 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 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 الکترو دینامیکی در مرز دیوار-سیال، پرش دمایی و آثار موئینگی نمی‌باشد. تمامی این 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 بسیار چشمگیر بوده است.

یکی از روش‌های برخورد با مسائل در سطح مولکولی، در نظر گرفتن برهم کنش‌های 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 سال‌های اخیر، مطالعات مهمی در زمینه بررسی هیدرو دینامیک

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

زیرانی و محمد [۵]، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی را برای جریان پوآزی مغشوش درون یک نانوکanal، 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-اندرسن را برای مدل کردن پتانسیل بین اتمی در نظر گرفته‌اند. پروفیل سرعت منتهی به 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. طغرایبی و عظیمیان [۶]، جریان پوآزی در یک کانال باریک را با استفاده از روش دینامیک مولکولی شبیه‌سازی کرده‌اند. جریان پوآزی آرگون مایع در یک نانوکanal با قرار دادن ذرات سیال در یک میدان نیرویی یکنواخت شبیه‌سازی شده است. پروفیل‌های چگالی، سرعت و دما در عرض کانال به دست آمده‌اند. برای به دست آوردن توزیع دمای یکنواخت‌تر در عرض کانال از ترموستات گذاری موضعی در نزدیکی دیواره کانال استفاده شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که پروفیل سرعت، طول لغزش و سرعت لغزش به نیروی محرکه وابسته هستند.

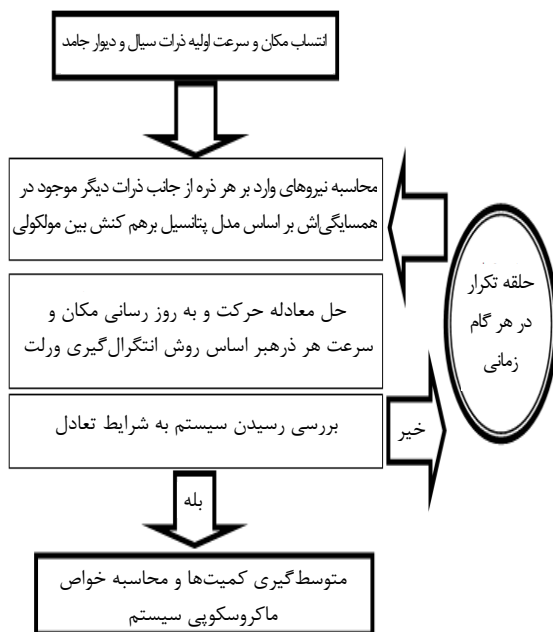
کوسابا و همکاران [۷]، جریان پوآزی آب درون یک کانال باریک را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی کرده‌اند. شبیه‌سازی برای عرض کانال‌ها و ماده دیواره‌های مختلف انجام گرفته است. در شبیه‌سازی‌ها، خواص فیزیکی مواد و پتانسیل برهم کنش الکترواستاتیکی در نظر گرفته شده‌اند. پروفیل سرعت و چگالی برای شبیه‌سازی‌های مختلف به دست آمده‌اند. نتایج نشان می‌دهند که لغزش سرعت در دیواره نانوکanal‌ها 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 هیدرو دینامیکی ناویه استوکس برای

1. Molecular Dynamics Simulation

۲- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، یک ابزار قدرتمند در بررسی جریان سیالات درون کانال‌ها می‌باشد. مبنای اصلی این روش، حل معادلات نیوتن در حرکت مولکول‌ها با در نظر گرفتن پتانسیل برهم‌کنش بین مولکول‌ها و عوامل مؤثر خارجی می‌باشد. با این روش، سیستم در گام‌های زمانی مختلف شبیه‌سازی شده و سپس پارامترهای تعادلی و مشخصات انتقالی به طور آماری محاسبه می‌شوند؛ لذا استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، در مقایسه با دیگر روش‌های مدل‌سازی در مقیاس نانو، یک روش مؤثر و دقیق در مطالعه رفتارهای جریان و انتقال حرارتی نانو سیالات درون میکرو و نانو کانال‌ها می‌باشد. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، حرکت هر یک از مولکول‌های سیستم را در حالت‌های جامد، مایع و گاز مدل می‌کند. به طور خلاصه این روش، تصویری از حرکت مولکول‌ها در هنگام برخورد با یکدیگر و برخورد احتمالی با محیط اطراف را ایجاد می‌کند.

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



شکل ۱ روندنمای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

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

پروفیل سرعت در کانال‌های با عرض کمتر از ۵ برابر قطر مولکولی نادرست می‌باشد. داویس و سومرز [۹]، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، تحلیل کاملی از پروفیل‌های سرعت و چگالی برای کانال‌های با عرض $0.8-0.6$ نانومتر ارائه کرده‌اند. سوفاس و همکاران [۱۰]، با اجرای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی جریان پوآزی صفحه‌ای 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 برهم‌کنش آنها در مقیاس طولی مولکولی، نقش کلیدی دارد. در این مقیاس اتمی، بررسی و دسته‌بندی تمامی پارامترهای تأثیرگذار ممکن بر پدیده جریان نانو مورد توجه ویژه‌ای می‌باشد. در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی پیشین، از پتانسیل لنارد-جونز^۱ $6-12$ برای مدل‌سازی برهم‌کنش 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 شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده می‌شود. 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 نانوکانال‌ها می‌باشد.

هدف این مقاله، بررسی تأثیر مدل تابع پتانسیل برهم‌کنش 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 برهم‌کنش لنارد-جونز مختلف برای جریان درون نانوکانال در معرض یک نیروی محرک اولیه انجام می‌شود. انواع مدل پتانسیل‌های بررسی شده توابع پتانسیل لنارد-جونز^۱ $6-12$ ، پتانسیل لنارد-جونز^۲ $6-9$ و پتانسیل لنارد-جونز هموار^۲ می‌باشد. این مدل‌ها در الگوریتم دینامیک مولکولی اعمال شده و رفتار هیدرودینامیکی جریان پوآزی بررسی و شبیه‌سازی شده است.

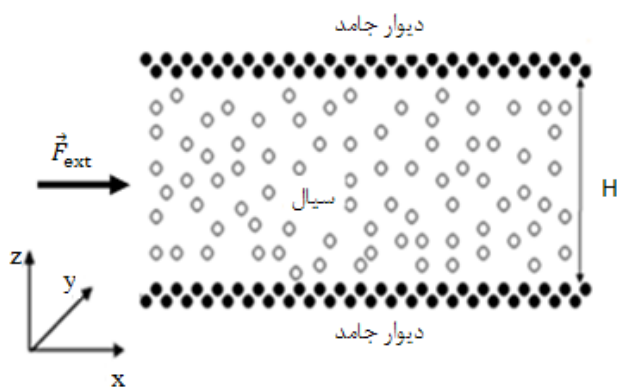
1. Lennard-Jones
2. Smooth

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_{ij}}{dt^2} = - \sum_{j \neq i} \frac{\partial \phi(\vec{r}_{ij})}{\partial \vec{r}_{ij}} + \vec{F}_{\text{ext}} \quad (2)$$

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 ذره‌ای که از یک سمت جریان وارد سیستم می‌شود، ذره‌ای 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،

می‌شود. بعد از محاسبه نیروهای بین مولکولی بر حسب تابع پتانسیل و اعمال شرایط شبیه‌سازی، معادلات حرکت انتگرال‌گیری شده و مکان و سرعت جدید ذرات در هر مرحله ثبت می‌شود.

این حلقه مدام تکرار می‌شود تا زمانی که تعادل در سیستم حاصل شود و در نهایت، مقادیر متوسط کمیت‌های ترمودینامیکی و خروجی‌های شبیه‌سازی بررسی می‌شوند.

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، با انتگرال‌گیری قانون دوم نیوتن شروع می‌شود و با اعمال روش‌های انتگرال‌گیری مناسب مانند الگوریتم اختلاف محدود گیر 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].

$$m_i \frac{d\vec{r}_i^2}{dt^2} = \sum_{j \neq i}^N \vec{F}_{ij} + \sum_{j \neq i}^{N_w} \vec{F}_{ijw} + \vec{F}_{\text{sou}} \vec{i} \quad (1)$$

در این معادله زیرنویس i نشانگر ذره i ام و بردار \vec{i} ، بردار واحد در جهت x است. عبارت اول در سمت راست معادله، نیروی مولکولی ناشی از پتانسیل لِنارد-جونز بین ذره i ام و مولکول‌های دیگر سیال در دامنه محاسباتی می‌باشد. عبارت دوم، نیروی مولکولی بین ذره i ام و تمام ذرات دیوار جامد j است 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 دوجسمی در شبیه‌سازی، معادله دیفرانسیلی حرکت ذرات برای هر ذره به شکل زیر بیان می‌شود:

1. Periodic Boundary Condition

لنارد- جونز برای شبیه‌سازی طیف وسیعی از مواد ساده مانند گازهای بی‌اثر و برخی فلزات و همین‌طور شبیه‌سازی پیوندهای از نوع واندروالس استفاده می‌شود. φ_{ij} ، پتانسیل لنارد-جونز از رابطه (۴) به‌دست می‌آید [۱].

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

در این رابطه، r_{ij} فاصله بین دو مولکول، σ مقیاس طول مولکولی و ε پارامتر شدت برهم‌کنش است. در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی شعاع قطع r_c ، فاصله‌ای است که فرض می‌شود در بیشتر از این فاصله مولکول‌ها با یکدیگر برهم‌کنش ندارند. مقادیر پارامترهای σ و ε 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 [۱].

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

$$\varphi_{ij} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^9 - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad r < r_c \quad (5)$$

تمامی پارامترهای موجود در رابطه فوق همانند پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲ می‌باشد.

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

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

$$F = C_1 + C_2(r_{ij} - r_{in}) + C_3(r_{ij} - r_{in})^2 + C_4(r_{ij} - r_{in})^3, \quad r_{in} < r_{ij} < r_c \quad (6)$$

ضرایب C_1, C_2, C_3, C_4 در کد به گونه‌ای محاسبه

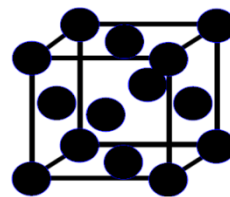
با تغییر پارامترهای برهم‌کنش سطح مشترک، می‌توان ضرایب مدل پتانسیل را در سطح مشترک سیال-جامد تغییر داد.

ابتدا چیدمان تمامی ذرات 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 پر^۱ 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 $4 = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{6}$ 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].

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

معادله توزیع ماکسول-بولتزمن احتمال اینکه در دمای T سرعت اتم i با جرم m_i برابر v_i باشد، را پیش‌بینی می‌کند. توزیع ماکسول-بولتزمن یک توزیع گاوسی است که می‌توان آن را با استفاده از یک تولیدکننده اعداد تصادفی به‌دست آورد.



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

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

1. Face-Centered-Cubic (FCC)

$$\sigma_{\text{Cu-Ar}} = \frac{(\sigma_{\text{Cu}} + \sigma_{\text{Ar}})}{2} \quad (9)$$

$$\varepsilon_{\text{Cu-Ar}} = \sqrt{\varepsilon_{\text{Cu}}\varepsilon_{\text{Ar}}} \quad (10)$$

پارامترهای پتانسیل لnard- جونز برای برهم کنش‌های بین اتمی آرگون و مس در جدول ۲ آمده است.

برای افزایش کیفیت محاسبات، نیروهای برهم کنش بین مولکولی در شعاع قطع $r_c = 3\sigma$ صفر می‌شوند. شعاع قطع، فاصله‌ای است که در بیشتر از آن، نیروی پتانسیل بین اتم‌ها صفر در نظر گرفته می‌شود. تمامی برهم کنش‌های بین مولکولی (مایع-مایع، جامد-جامد، مایع-جامد) با پتانسیل لnard-جونز مدل می‌شوند. متناسب با ساختار شبکه‌ای و چگالی سیال مورد نظر، سیال حاوی $N_f = 3780$ مولکول می‌باشد و تعداد کل مولکول‌های دامنه شبیه‌سازی برابر $N_{\text{total}} = 5220$ می‌باشد. نیروی محرک خارجی در امتداد x به هر ذره سیال در طول شبیه‌سازی وارد می‌شود. کار تولید شده ناشی از نیروی خارجی $\vec{F}_{\text{ext}} = 0.1\varepsilon/\sigma^2$ به گرما تبدیل می‌شود که برای جلوگیری 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.

جدول ۱ دستگاه کاهیده لnard- جونز

کمیت	واحد کاهیده
طول	L/σ
انرژی	E/ε
چگالی	$\rho\sigma^3$
سرعت	$v/(\frac{\sigma}{\tau})$
دما	$T/(\frac{\varepsilon}{k_B})$
زمان	$t/(\frac{m^{1/2}\sigma}{\varepsilon^{1/2}})$
نیرو	$F/(\frac{\varepsilon}{\sigma^2})$

جدول ۲ پارامترهای پتانسیل لnard- 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

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

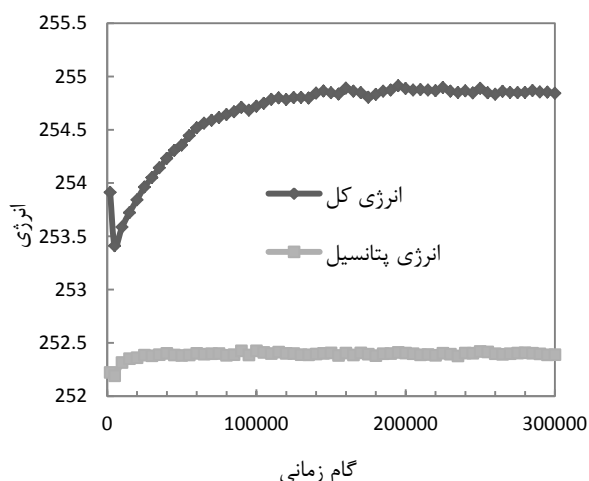
معمولاً در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با اعداد خیلی کوچک سروکار داریم که برای جلوگیری از افزایش حجم محاسبات و ایجاد خطاهای محاسباتی، از واحدهای کاهیده استفاده می‌کنیم. برای مثال طول واقعی را بر ثابت σ تقسیم می‌کنیم و نتیجه را بر حسب واحد کاهیده σ بیان می‌کنیم. در صورت نیاز در پایان شبیه‌سازی، طول را در σ ضرب کرده تا به واحد اصلی خود برگردد. یکی از واحدهای کاهیده معمول در دینامیک مولکولی، دستگاه واحد کاهیده لnard- جونز است. جدول ۱ برخی از واحدهای کاهیده لnard- جونز را بیان می‌کند. از این رو، تمامی پارامترها به صورت بی‌بعد شده در شبیه‌سازی قرار گرفته‌اند. ابعاد کانال شبیه‌سازی شده $30\sigma \times 24\sigma \times 8\sigma$ می‌باشد و آرگون مایع به عنوان سیال عامل در نظر گرفته می‌شود. دمای سیستم شبیه‌سازی برابر $K_b T/\varepsilon = 1$ و چگالی عددی سیستم برابر $\rho\sigma^3 = 0.81$ می‌باشد. تحت این شرایط می‌توان 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 می‌شود. این عدد شاخص تحلیل جریان پیوسته و مولکولی درون نانوکanal هاست. با انتخاب ابعاد و چگالی عددی سیستم شبیه‌سازی، تحلیل جریان لغزشی مولکولی در نانوکanal مورد نظر صادق می‌باشد. دمای لحظه‌ای ذرات در طول شبیه‌سازی به روش تئوری انرژی جنبشی به صورت روابط (۷) و (۸) حاصل می‌شود.

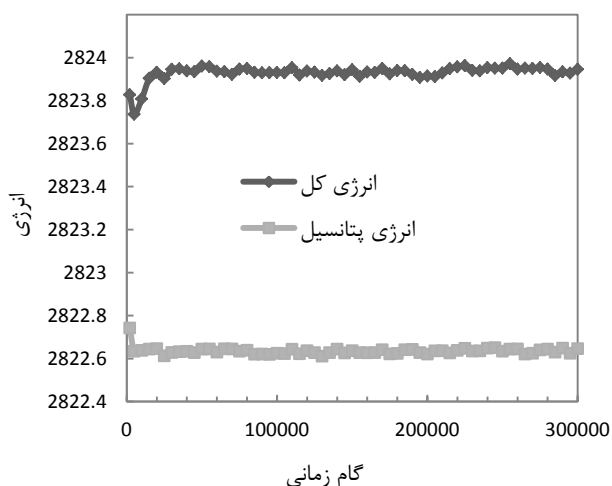
$$\frac{3}{2} N k_b T = KE(t) \quad (7)$$

$$KE(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i v_i^2 \quad (8)$$

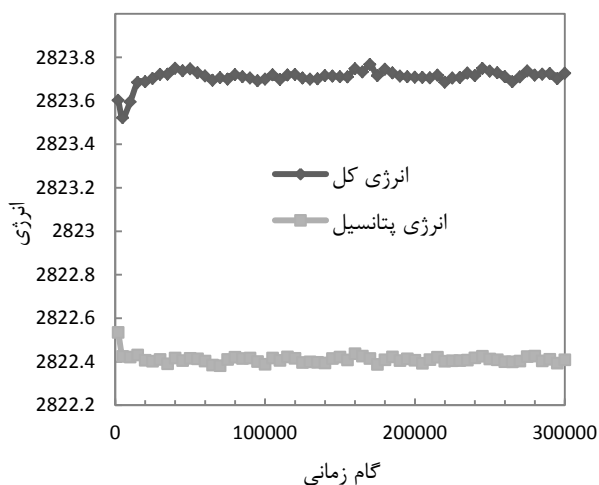
انرژی پیوندی و فاصله پیوندی بین اتم‌های آرگون-مس در سطح مشترک سیال-دیوار برطبق قانون اختلاط لورنتز-برتولت به دست می‌آید:



الف- پتانسیل لنارد-جونز ۹-۶



ب- پتانسیل لنارد-جونز ۱۲-۶



ج- پتانسیل لنارد-جونز هموار

شکل ۴ انرژی کل و انرژی پتانسیل سیستم

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

معادلات حرکت با استفاده از الگوریتم سرعت ورلت^۱ انتگرالگیری می‌شوند [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 می‌شوند. 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 0.001τ بوده که $\tau = (m\sigma^2/\epsilon)^{1/2}$ زمان مشخصه می‌باشد. در ابتدای شبیه‌سازی، ذرات با آرایش شبکه‌ای مرکز پر-وجوه پر در مکان‌های اولیه قرار می‌گیرند. سپس برای رسیدن به دمای مطلوب با سرعت‌های اولیه تصادفی رشد می‌کنند. در هر مدل، سیستم پس از طی گام زمانی مشخص به تعادل می‌رسد. سپس، پس از مرحله تعادل شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی تا ۳۰۰۰۰۰ گام زمانی ادامه می‌یابد. در انتها، توزیع انرژی، پروفیل چگالی و سرعت سیستم تحت شرایط مختلف مدل سازی شده و استخراج می‌شوند.

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 ۹-۶ بیشتر از دو مدل دیگر می‌باشد، به عبارت دیگر مدل برهم کنش لنارد-جونز ۹-۶ دیرتر از دو مدل دیگر به تعادل می‌رسد.

1. Verlet Velocity

در شکل ۶، توزیع چگالی در گام‌های زمانی مختلف به ترتیب برای پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲ و پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ محاسبه پروفیل‌های چگالی عددی و سرعت، نانوکنال در راستای محور z به n قسمت تقسیم‌بندی می‌شود. اصطلاحاً هر یک از این قسمت‌ها، "بین"^{۱۱} (قفسه) نامیده می‌شود. هر یک از این قفسه‌ها دارای حجم $L_x \times L_y \times (H/n)$ 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 می‌شود. این تعداد اتم‌ها در کل زمان شبیه‌سازی، متوسط‌گیری می‌شوند و یک مقدار با متوسط‌گیری زمانی برای هر قسمت به دست 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 می‌شود که با گذشت زمان، اوج چگالی گسترش یافته و دامنه آن کاهش می‌یابد و در نهایت در حالت تعادل، توزیع مولکول‌های سیال مخصوصاً در لایه‌های نزدیکتر به دیواره به طور غیر یکنواخت می‌باشد.

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 پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، باعث ایجاد نوسانات و نامتقارن شدن پروفیل چگالی عددی سیال می‌شود.

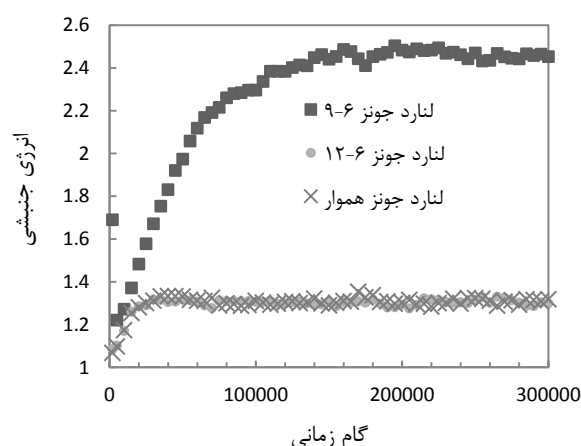
برای مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲، شکل ۶-ب، توزیع مولکول‌های سیال در گام‌های زمانی مختلف تقریباً یکنواخت بوده و رفتار متقارن آن نسبت به صفحه میانی کانال کاملاً مشهود است. همچنین در نزدیکی دیواره کانال، یک نقطه اوج کوچک در توزیع چگالی سیال مشاهده می‌شود که در ادامه آن دامنه نوسانات شدیداً کاهش یافته و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

در شکل ۶-ج، پروفیل چگالی مربوط به مدل پتانسیل لنارد-جونز همواره، نشان می‌دهد که با گذشت زمان، نوسانات بسیار کمی در توزیع مولکول‌های سیال دیده می‌شود و رفتار متقارن آن مشابه مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲ است.

لذا استفاده از مدل تابع لنارد-جونز ۶-۱۲ و نوع هموار آن باعث کاهش زمان همگرایی سیستم می‌شود که این به نوبه خود، زمان محاسبات برای اعمال عوامل خارجی را کاهش می‌دهد. با توجه به این نمودارها، همان طور که انتظار می‌رفت، انرژی پتانسیل تحت تأثیر مدل تابع پتانسیل برهم کنش تغییر می‌یابد. 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 خارجی 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 می‌شود. یعنی با اعمال این تابع پتانسیل، پاسخ سیستم به نیروی خارجی دیرتر خواهد بود. همان طور که مشاهده می‌شود، انرژی جنبشی این مدل پتانسیل 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 می‌توان روند یکسان تغییر انرژی جنبشی و انرژی کل سیستم با اعمال این مدل پتانسیل را مشاهده کرد.



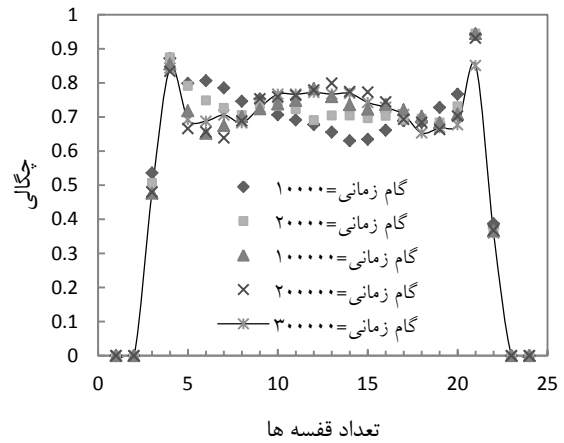
شکل ۵ انرژی جنبشی سیستم برای سه نوع مدل تابع پتانسیل برهم کنش بین مولکولی مختلف

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.

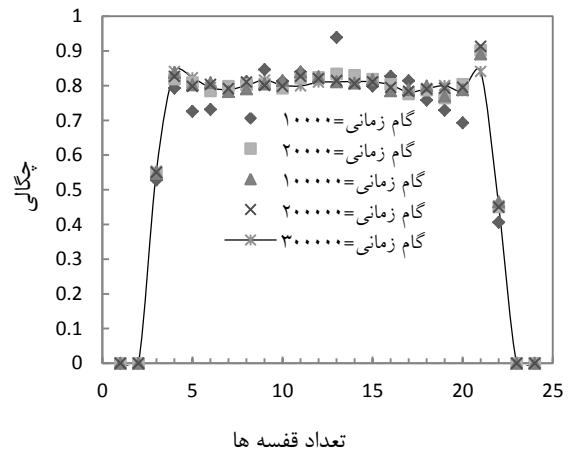
در گام زمانی ۳۰۰۰۰۰ کمیت‌های مورد نظر را نمونه‌برداری کرده و به تحلیل نتایج پرداخته می‌شود. در شکل ۷، پروفیل چگالی برای هر سه نوع مدل پتانسیل در گام زمانی انتهایی نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود، مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ باعث تغییر در چیدمان اتم‌های سیال می‌شود. با اعمال این مدل پتانسیل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

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.

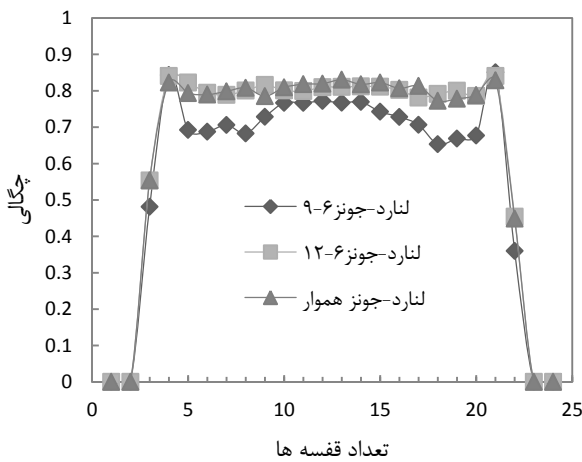
برای به دست آوردن پروفیل‌های سرعت جریانی، سرعت متوسط برای هر قسمت و در هر گام زمانی محاسبه می‌شود و سپس تمامی این مقادیر متوسط‌گیری می‌شوند. این پروفیل‌ها با متوسط‌گیری آماری سرعت تک‌تک اتم‌ها به دست می‌آیند.



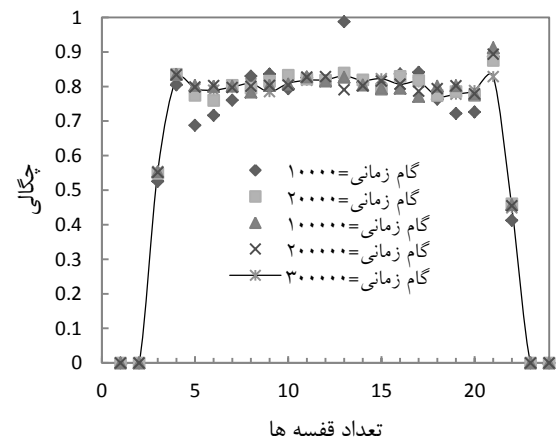
الف- پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹



ب- پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲



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



ج- پتانسیل لنارد-جونز هموار

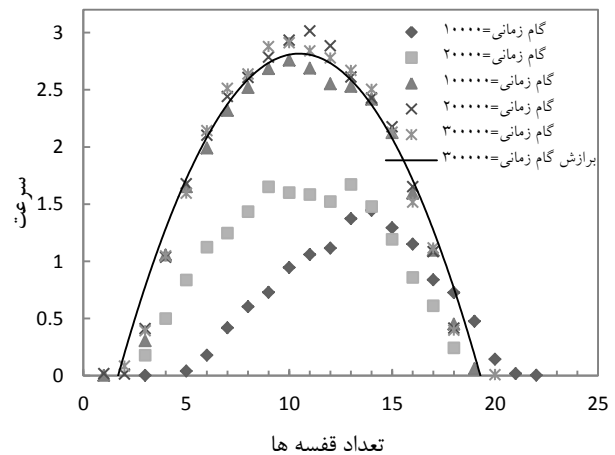
شکل ۶ توزیع چگالی در گام‌های زمانی مختلف

نکته اساسی قابل توجه در هر سه مدل این است که پروفیل سرعت پس از طی گام زمانی مشخص به حالت تعادل می‌رسند، اما زمان رسیدن به حالت تعادل در هر یک از مدل‌ها متفاوت است. پروفیل سرعت مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ در گام زمانی ۱۰۰۰۰۰ و برای دو مدل پتانسیل دیگر در گام زمانی ۲۰۰۰۰ به تعادل می‌رسد. همان‌طور که از نتایج مربوط به انرژی سیستم انتظار می‌رفت، در شرایط یکسان شبیه‌سازی، پروفیل سرعت مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ دیرتر به تعادل می‌رسد که باعث افزایش زمان محاسبات شبیه‌سازی می‌شود. همچنین برای مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، نوسانات پروفیل سرعت در گام‌های زمانی بعد از تعادل در مقایسه با دو مدل دیگر کمتر می‌باشد.

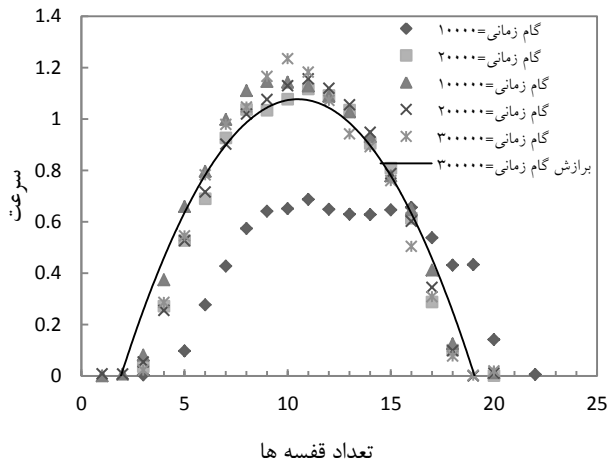
مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲ دارای بیشترین نوسانات سرعت می‌باشد. این نوسانات با اعمال مدل پتانسیل لنارد-جونز هموار بهبود می‌یابد که دلیل آن، ضرایب هموارسازی نیرو به مقداری بیشتر از لنارد-جونز ۶-۱۲ می‌باشد.

طبق نتایج تحلیلی موجود در ادبیات فن، پروفیل سرعت جریان پوزوی 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. مخصوصاً برای مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹، پرش در مقادیر سرعت بسیار کم است.

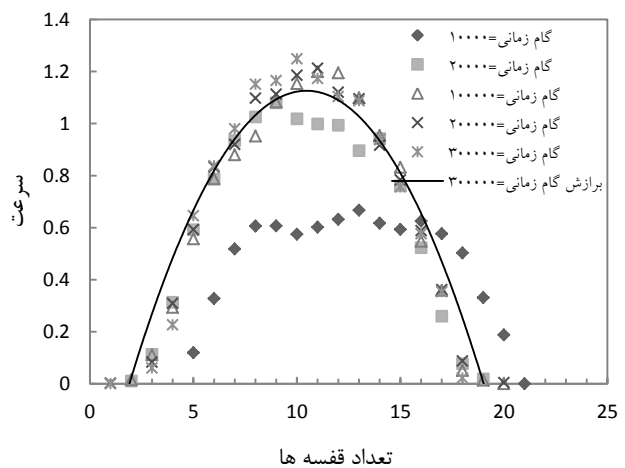
مقایسه بین پروفیل‌های سرعت مدل‌های مختلف تابع پتانسیل در شکل ۹ در گام زمانی ۳۰۰۰۰۰ نشان داده شده است. نتایج بیانگر این حقیقت هستند که اوج مقدار سرعت برای مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ بیشتر از مقادیر متناسب با دو مدل پتانسیل دیگر می‌باشد. علت این امر ناشی از ضرایب توانی مدل پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹ اعمال شده بین مولکول‌ها و به واسطه نیروهای متوسط‌گیری شده بزرگ در جریان درون نانوکanal می‌باشد. همان‌طور 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 کمی بیشتر از مقدار لنارد-جونز ۶-۱۲ می‌باشد که این امر نیز ناشی از ضرایب تصحیح در فواصل قطع تابع



الف- پتانسیل لنارد-جونز ۶-۹



ب- پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲



ج- پتانسیل لنارد-جونز هموار

شکل ۸ توزیع سرعت در گام‌های زمانی مختلف

پتانسیل می‌باشد.

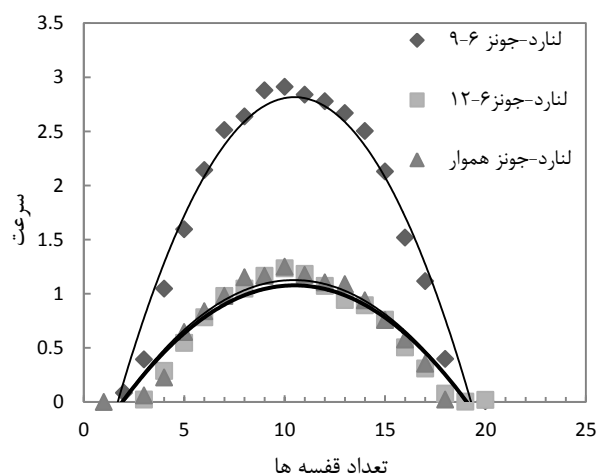
هیدرودینامیکی سیستم می‌شود اما اعمال این مدل باعث همگرایی دیرتر نتایج می‌شود؛ لذا ضرایب این مدل پتانسیل نیمه تجربی باعث افزایش زمان محاسبات می‌شود. این مدل‌های پتانسیل در سطح ماکرو در نظر گرفته نمی‌شوند، اما تأثیر آنها باید در طراحی سیستم‌های حاوی سیال با مقیاس نانو در نظر گرفته شود.

۶- فهرست علائم

F	نیروی بر هم کنش (N)
F_{ext}	نیروی خارجی (N)
k_B	ثابت بولتزمن ($1.3806 \times 10^{-3} \text{kg/s}^2\text{K}$)
KE	انرژی جنبشی (J)
m	جرم مولکول (kg)
N	تعداد مولکول‌ها
N_f	تعداد مولکول‌های سیال
r_c	شعاع قطع (nm)
r_{ij}	فاصله بین مولکول i و مولکول j (nm)
T	دما (K)
t	زمان (ns)
v	سرعت (m/s)
x, y, z	مختصات مولکول‌ها
ε	عمق چاه پتانسیل لنارد-جونز (J)
σ	مقیاس مسافت بین مولکولی (nm)
τ	زمان مشخصه (ns)
ρ	چگالی (kg/m^3)
φ	تابع پتانسیل بر هم کنش (J)

۶- مراجع

- [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



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

۵- نتیجه‌گیری

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی برای جریان پوآزی صفحه‌ای حاوی مایع آرگون درون نانوکanal انجام شده است. دیوارهای کانال با اعمال ترموستات مناسب در دمای ثابت نگه داشته می‌شوند. تأثیر مدل تابع پتانسیل برهم کنش روی توزیع انرژی سیستم، چگالی سیال و سرعت درون نانوکanal مطالعه شده است. نتایج نشان می‌دهند که مدل پتانسیل لنارد-جونز ۹-۶ نسبت به دو مدل دیگر دارای مقادیر سرعت بیشتری می‌باشد 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 می‌باشد. در مدل‌های پتانسیل لنارد-جونز ۱۲-۶ و هموار، دامنه نوسانات در پروفیل چگالی چندان چشمگیر نبوده و می‌توان گفت تقریباً ثابت می‌ماند، اما مدل لنارد-جونز ۹-۶ دارای توزیع چگالی غیر یکنواخت می‌باشد. 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 توزیع سرعت درون کانال همواره سهموی است. گرچه مدل پتانسیل لنارد-جونز ۹-۶ باعث ایجاد اختلافاتی در مشخصات

- 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-Equilibrium 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*