



شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اثر طول نانولوله کربنی بر سیستم جذب انرژی نانو سیالی

سید حسین گنجیانی^۱، علیرضا حسین نژاد^{۲*}

^۱-دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

^۲-دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

nezhadd@hamoon.usb.ac.ir ۹۸۱۵۵-۹۸۷

*راهدان، صندوق پستی ۹۸۱۵۵-۹۸۷

چکیده

در این کار، اثر طول نانولوله کربنی بر یک سیستم جذب انرژی نانو سیالی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شده است. برای این منظور 6 طول 5، 6، 7، 8، 9 و 10 nm برای هر یک از چهار نانولوله کربنی صندلی تک جداره صلب (8,8)، (10,10)، (12,12) و (14,14) انتخاب شده است. نتایج شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهد که در طول و قطرهای مختلف نانولوله کربنی، سطح نانولوله کربنی بدون اصطکاک است که باعث می‌شود بعد از اعمال یک سیکل بارگذاری-باربرداری بر سیستم، مولکول‌های آب بطور کامل از نانولوله کربنی خارج شوند. زاویه تماس که متناظر با شدت آب‌گریزی سطح نانولوله کربنی است، با افزایش طول و قطر نانولوله کربنی به صورت متوسط به ترتیب 4 و 2 درصد کاهش می‌یابد؛ در نتیجه، فشار نفوذ مولکول‌های آب به دون نانولوله کربنی بطور متوسط به ترتیب 30 و 15 درصد کاهش می‌یابد. بعلاوه، با افزایش قطر و طول نانولوله کربنی جرم و اندازه آن افزایش یافته و باعث کاهش چگالی و بازده جذب انرژی در سیستم جذب انرژی نانو سیالی می‌شود. همچنین چگالی شعاعی مولکول‌های آب در نانولوله کربنی برخلاف توده فاز مایع غیریکنواخت بوده و با افزایش طول نانولوله کربنی مقدار آن در هر دو بوسه کاهش یافته و در فاصله میان آنها افزایش می‌یابد.

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 30 خرداد 1395

پذیرش: 02 شهریور 1395

ارائه در سایت: 03 مهر 1395

کلید واژگان:

فشار نفوذ

کشش سطحی

زاویه تماس

تبديل انرژی

Molecular dynamics simulation of the effects of the carbon nanotube length on the nanofluidic energy absorption system

Sayed Hossein Ganjiani, Alireza Hossein Nezhad^{*}

Department of Mechanical Engineering, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran.

*P.O.B. 98155-987 Zahedan, Iran, nezhadd@hamoon.usb.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 19 June 2016
Accepted 23 August 2016

Available Online 24 September 2016

Keywords:
Infiltration pressure
Surface tension
Contact angle
Energy conversion

ABSTRACT

In this work the effect of carbon nanotube length on the nanofluidic energy absorption system is investigated by using molecular dynamic simulation. For this purpose, four armchair rigid carbon nanotubes (8,8), (10,10), (12,12) and (14,14), and six lengths (5, 6, 7, 8, 9 and 10) for each one are studied. Results of simulations show that the surface of carbon nanotube is frictionless at all lengths and diameters, causing water molecules to be deflitrated from carbon nanotubes after applying the loading-unloading cycle on the system. Contact angle, which represents hydrophobic intensity of carbon nanotube, is decreased on average 4 % and 2 % by increasing length and diameter of carbon nanotube, respectively; therefore, infiltration pressure of water molecules through carbon nanotube is decreased an average of 30 % and 15 %, respectively. Moreover, the mass and size of carbon nanotube increase by increasing length and diameter of carbon nanotube, leading to the reduction of energy absorption density and efficiency. Also, density of water molecules in carbon nanotube unlike the bulk of liquid phase is non uniform and decreases at the first and second shells. In addition, it increases along the distance between these shells by increasing length of carbon nanotube.

۱- مقدمه

یکی از سیستم‌های نانو سیالی که به خاطر بازده بسیار بالای آن مورد توجه قرار گرفته است، سیستم جذب انرژی نانو سیالی^۲ است. در این سیستم تعداد زیادی از ذرات مواد نانومتلخلخل با سطوح آب‌گریز در یک مایع کاربردی مخلوط شده‌اند [۳]. در این سیستم در ابتدا مولکول‌های مایع به خاطر آب‌گریزی سطوح نانوسوراخ‌های مواد نانومتلخلخل وارد نانوسوراخ‌ها نمی‌شوند. در واقع یک سد انرژی ناشی از اثرات کشش سطحی مانع از نفوذ

نانولوله‌های کربنی، با قطری در ابعاد نانو و سطوح مولکولی صاف و آب‌گریز، در سیستم‌های نانو سیالی^۱ کاربرد فراوانی دارند. در کارهای تجربی و شبیه‌سازی مختلفی خصوصیات سیال و مشخصات جریان مولکول‌های مایع و گاز درون نانولوله‌های کربنی بررسی شده است. مشخصات جریان در مقیاس نانو با مقیاس مacro و متفاوت هستند. به عنوان مثال نرخ جریان جرمی مولکول‌های آب درون نانولوله کربنی خیلی بیشتر از مقداری است که توسط تئوری جریان

² Nanofluidic energy absorption system

¹ Nanofluidic

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

S. H. Ganjiani, A. Hossein Nezhad, Molecular dynamics simulation of the effects of the carbon nanotube length on the nanofluidic energy absorption system, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 9, pp. 359-365, 2016 (in Persian)

توسط لیو و همکارانش [8] بررسی شده است. این بررسی نشان داد که با افزایش دمای سیستم و قطر نانولوله‌کربنی، فشار نفوذ کاهش می‌یابد و همچنین با افزایش قطر نانولوله‌کربنی، پروفایل چگالی شعاعی مولکول‌های آب درون نانولوله‌کربنی یکنواخت‌تر می‌شود. لیو و همکارانش [9] مکانیزم نفوذ آب درون نانوسوپاخ‌های مخروطی شکل را بررسی کردند. آنها نشان دادند که وقتی زاویه راس نانومخروط کربنی⁷ به اندازه کافی کوچک باشد، یک فشار خارجی برای شروع نفوذ مولکول‌های آب درون نانومخروط نیاز است و برای پیشرفت بیشتر مولکول‌های آب درون نانومخروط فشار خارجی باید در حال افزایش نگه داشته شود. با افزایش زاویه راس، فشار لازم برای نگه داشتن نفوذ می‌تواند بطرور موثری کاهش یابد. اما اگر زاویه راس به اندازه کافی بزرگ باشد، تحت شرایط محیطی، مولکول‌های آب می‌تواند بطرور خودبه‌خودی تا یک عمق مشخص از نانومخروط نفوذ کنند و بعد از آن برای نفوذ بیشتر مولکول‌های آب به یک فشار خارجی نیاز است. سیستم جذب انرژی نانوسیالی تحت بارگذاری دینامیکی نیز شیوه‌سازی شده است [12-10]. در این شیوه‌سازی‌ها نرخ بارگذاری از مرتبه 1000 m/s تا 100 m/s است. در بارگذاری دینامیکی به خاطر نرخ بالای بارگذاری یک موج مکانیکی در مولکول‌های آب ایجاد می‌شود که تا انتهای نانولوله‌کربنی پیش می‌رود و سپس بر می‌گردد. در مرحله پیش‌روی موج مکانیکی، رفتار حریان به شدت به سرعت برخورد وابسته است، بطوری که با افزایش نرخ بارگذاری، فشار نفوذ و سرعت انتقال حریان آب در نانولوله‌کربنی افزایش می‌یابد و همچنین چگالی کمتر و برهمنکش آب-نانولوله‌کربنی ضعیفتر می‌شود. اما در مرحله بازگشت موج مکانیکی، به خاطر اثرات فشار ضربه، ساختار آب بطرور قابل ملاحظه‌ای تغییر می‌کند و رفتار حریان کمتر به سرعت ضربه حساس است ولی به اندازه (قطر) نانولوله‌کربنی بیشتر حساس می‌باشد. کار انجام شده توسط بار ضربه‌ای به سه قسمت تبدیل می‌شود: (1) تغییر پتانسیل مولکول‌های آب، (2) انرژی برهمنکش جامد-مایع و (3) گرمای اتلاف شده توسط اصطکاک سطح جامد-مایع. در یک نانولوله‌کربنی با اندازه کوچک‌تر، قسمت سوم سهم اصلی در جذب انرژی را دارد و با افزایش اندازه نانولوله‌کربنی، سهم این قسمت به سرعت کاهش می‌یابد و قسمت اول سهم اصلی در جذب انرژی را کسب می‌کند. در یک بارگذاری دینامیکی علاوه بر دما و اندازه نانولوله‌کربنی، اثر نرخ بارگذاری نیز بر سیستم جذب انرژی نانوسیالی بررسی شده است [13]. در بارگذاری دینامیکی نیز با افزایش قطر نانولوله‌کربنی فشار نفوذ کاهش می‌یابد ولی با افزایش نرخ بارگذاری فشار نفوذ افزایش می‌یابد. برای بررسی بیشتر اثر دما بر سیستم جذب انرژی نانوسیالی یک میدان نیرو برای برهمنکش‌های بین اتم‌های کربن در نانولوله‌کربنی در نظر گرفته شده است (در این حالت نانولوله‌کربنی به صورت انعطاف‌پذیر در نظر گرفته می‌شود). واستنگی فرایند نفوذ به دما به دو علت می‌باشد: یکی نوسانات شعاعی که به خاطر حرارت به اتم‌های کربن القا شده است و دیگری تغییرات خصوصیات فیزیکی در سطح مولکولی است که شامل برهمنکش‌های پیوند هیدروژنی نیز می‌باشد. همچنین فشار نفوذ در یک نانولوله‌کربنی انعطاف‌پذیر اندکی کمتر از یک نانولوله‌کربنی صلب می‌باشد. در بارگذاری دینامیکی اثر تغییر نوع سیال بر سیستم جذب انرژی نانوسیالی نیز بررسی شده است [14]. در این بررسی سیال کاری یک محلول آب-گلیسرول با غلظت‌های مختلف در نظر گرفته شده است. مشاهده شد که چگالی جذب انرژی سیستم با افزایش غلظت گلیسرول بطور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد. بطوریکه زمانی که مایع از آب

مولکول‌های مایع به درون نانوسوپاخ‌ها می‌شود. اگر مخلوط مایع-ذرات نانومتلخلخل تحت فشار قرار گیرد، بعد از رسیدن فشار سیستم به یک فشار آستانه (فشار نفوذ¹) تعداد زیادی از مولکول‌های مایع وارد نانوسوپاخ‌ها می‌شوند. در واقع مولکول‌های مایع انرژی لازم برای غلبه بر سد انرژی را کسب می‌کنند و وارد نانوسوپاخ‌ها می‌شوند. به خاطر سطح مقطع ویژه بزرگ مواد نانومتلخلخل، چگالی جذب انرژی این سیستم نسبت به سایر سیستم‌های جذب انرژی رایج (مثل فوم‌ها، آلیاژ‌های حافظه‌دار و غیره) بسیار بیشتر است. در سیستم جذب انرژی نانوسیالی یک تبدیل انرژی از طریق سطح مشترک جامد-مایع در نانوسوپاخ‌ها صورت می‌گیرد. برخلاف سیستم‌های جذب انرژی رایج که انرژی مکانیکی به انرژی گرمایی تبدیل می‌شود، در سیستم جذب انرژی نانوسیالی، انرژی مکانیکی به صورت انرژی کشش سطحی جامد-مایع جذب می‌شود [3]. از جمله کاربردهای سیستم جذب انرژی نانوسیالی می‌توان به استفاده در میرابی²، سپر خودرو³، زره بد⁴ و غیره اشاره کرد. مواد نانومتلخلخل نانولوله‌کربنی⁵ یکی از پر کاربردترین نوع مواد نانومتلخلخل می‌باشد که در سیستم جذب انرژی نانوسیالی بسیار مورد استفاده قرار گرفته است.

در کارهای تجربی مختلفی که سیستم جذب انرژی نانوسیالی بررسی شده است، معمولاً مخلوط مایع-ذرات نانومتلخلخل در یک مخزن مشکل از یک سیلندر-پیستون قرار می‌گیرد. در این سیستم، از طریق یک حرکت رفت و برگشتی پیستون، یک سیکل بارگذاری-باربرداری اعمال می‌شود [4]. در طی این آزمایش، آب درون نانوسوپاخ‌ها نفوذ کرده است ولی بعد از پایان فرایند باربرداری مولکول‌های آب از نانوسوپاخ‌ها خارج نمی‌شوند و سیکل بارگذاری-باربرداری قابل تکرار نمی‌باشد. دمای سیستم در طی فرایند نفوذ تغییر نمی‌کند و بنابراین فرایند نفوذ گرمایزا نیست. هان و همکارانش [5] از طریق یک اندازه‌گیری کالریمتريک، مشخصات تولید گرما در سیستم جذب انرژی نانوسیالی را بررسی کردند. نتایج نشان داد که تغییرات دما درون سیستم با افزایش جرم مواد نانومتلخلخل و نرخ بارگذاری افزایش می‌یابد و تغییرات دما شامل یک قسمت برگشت‌پذیر و یک قسمت برگشت‌ناپذیر می‌باشد. اما ماکریم افزایش دما در سیستم در حدود 1.6°C می‌باشد و تغییرات دمای باقی‌مانده در سیستم در حدود 30 تا 60 درصد بیشینه افزایش دمای سیستم است. برای بهبود عملکرد سیستم جذب انرژی نانوسیالی از محلول آبدار کلرید سدیم نیز استفاده شده است [6]. افزایش غلظت کلرید سدیم در اولین سیکل بارگذاری-باربرداری فقط باعث مقدار کمی افزایش در فشار نفوذ و راندمان جذب انرژی می‌شود. اما با افزایش غلظت کلرید سدیم از صفر تا 25.9 درصد وزنی، قابلیت استفاده مجدد از سیستم در سیکل‌های بعدی حدود سه برابر افزایش می‌یابد. همچنین عملکرد سیستم جذب انرژی نانوسیالی تحت بار ضربه‌ای بررسی شده است [7]. در بارگذاری دینامیکی نسبت به بارگذاری شباهستاتیکی راندمان جذب انرژی سیستم بسیار بیشتر است.

علاوه بر کارهای تجربی، در کارهای مختلفی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سیستم جذب انرژی نانوسیالی بررسی شده است. در اکثر کارهای شبیه‌سازی از نانولوله‌کربنی به عنوان یک نانوسوپاخ⁶ استفاده شده است. اثر دو پارامتر دما و قطر نانولوله‌کربنی بر سیستم جذب انرژی نانوسیالی

¹ Infiltration pressure² Damping³ Car bumper⁴ Body armor⁵ Nanoporous carbon nanotube⁶ Nanopore⁷ Carbon nanocone

شده است. برای بررسی اثر طول نانولوله‌کربنی بر سیستم جذب انرژی نانوسیالی شش طول مختلف ۵، ۶، ۷، ۸، ۹ و ۱۰ nm برای هر چهار نانولوله‌کربنی انتخاب شده است. ابعاد مخزن $3.443 \times 3.479 \text{ nm}^2 \times 2.497 \text{ nm}$ است. یک هزار مولکول آب درون مخزن قرار گرفته است تا چگالی مولکول‌های آب درون مخزن 1 g/cm^3 باشد و با چگالی توده آب در فشار ۱ atm و دمای K 300 یکسان باشد.

2- روش حل

برای مدل‌سازی برهمنکنش‌های غیرپیووندی بین مولکولی واندروالس و الکترواستاتیکی به ترتیب از پتانسیل‌های لنارد-جونز و کولن استفاده شده است [19]:

$$V(r_{ij}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left(4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{4\pi \epsilon_0 r_{ij}} \right) \quad (1)$$

که در آن r_{ij} فاصله میان دو اتم i و j بار الکتریکی اتم i و j به ترتیب پارامترهای انرژی و فاصله در پتانسیل لنارد-جونز می‌باشند. برهمنکنش‌های درون مولکولی کشش پیووندی^۲ و خمش زاویه‌ای^۳ در مولکول‌های آب توسط پتانسیل‌های هارمونیک مدل شده‌اند [19]:

$$V(\vec{r}) = \sum_{\text{bonds}} \frac{k_i}{2} (l_i - l_{i,0}) + \sum_{\text{angles}} \frac{k'_i}{2} (\theta_i - \theta_{i,0}) \quad (2)$$

که در آن k_i و k'_i به ترتیب ضرایب پتانسیل‌های کشش پیووندی و خمش زاویه‌ای می‌باشند. $l_{i,0}$ طول اولیه پیووند O-H و $\theta_{i,0}$ مقدار اولیه H-O-H در مولکول آب می‌باشند. از آنجایی که انعطاف‌پذیری نانولوله‌کربنی تأثیر چندانی بر مشخصات سیستم جذب انرژی نانوسیالی ندارد [20]. نانولوله‌کربنی به صورت صلب فرض شده است، بنابراین از برهمنکنش‌های درون مولکولی میان اتم‌های کربن در نانولوله‌کربنی صرف نظر شده است. مولکول آب توسط پتانسیل بین مولکولی انتقال‌پذیر سه نقطه‌ای^۴ (TIP3P) مدل شده است. پارامترهای برهمنکش کربن-آب و کربن-کربن به ترتیب و سیستم به مدت ps 50 ثابت نگه داشته شده است، پیسیون مطابق یک روش گام به گام تعداد می‌رسد. بعد از به تعادل رسیدن سیستم، پیسیون به مدت ps 50 ثابت نگه داشته می‌شود تا سیستم به حالت تعادل برسد. مقدار جابه‌جایی پیسیون در هر گام ۰.۰۱ nm و مقدار نهایی جابه‌جایی پیسیون ۱.۰ nm می‌باشد. بعد از رسیدن پیسیون به جابه‌جایی نهایی، با همان شیوه به مکان اولیه خود بازمی‌گردد تا بر سیستم یک سیکل بارگذاری-بارگردانی اعمال شود.

با استفاده از روش دینامیک مولکولی مدل محاسباتی در نظر گرفته شده برای سیستم جذب انرژی نانوسیالی شیوه‌سازی شده است [21]. برای شیوه‌سازی دینامیک مولکولی از کد لمپس^۵ [22] استفاده شده است. در همه

خالص به گلیسروول خالص تغییر می‌کند، چگالی جذب انرژی بیشتر از سه برابر افزایش می‌یابد. کائو و همکارانش [15] هر دو نوع بارگذاری شبه‌استاتیکی و دینامیکی را بررسی کردند. در بارگذاری شبه‌استاتیکی، فرایند نفوذ توسط اختلاف انرژی آزاد میان مولکولهای آب درون و بیرون نانولوله‌کربنی موجود می‌آید، در حالی که در بارگذاری دینامیکی، نفوذ مولکولهای آب در نانولوله‌کربنی توسط کار خارجی صورت می‌گیرد.

لیو و همکارانش [16] اثر بارهای الکتریکی را بر نفوذ آب در یک نانولوله‌کربنی بررسی کردند. آنها دوازده بار الکتریکی به مقدار e ۲ در یک حلقه متصل به قسمت پائینی نانولوله‌کربنی به فاصله شعاعی 0.8 \AA از مرز نانولوله‌کربنی قرار دادند. علامت بارهای الکتریکی کار هم مخالف در نظر گرفته شد تا سیستم از لحاظ الکتریکی خنثی باشد. مشاهده شد با بکارگیری بارهای الکتریکی، درجه آب‌گریزی نانولوله‌کربنی افزایش می‌یابد و در نتیجه راندمان سیستم جذب انرژی بهبود می‌یابد. ژو و همکارانش [17] اثر یک میدان الکتریکی را بر سیستم جذب انرژی نانوسیالی بررسی کردند. مشاهده شد که آب‌گریزی موثر یک نانولوله‌کربنی با افزایش شدت میدان الکتریکی کاهش می‌یابد و در نتیجه با افزایش شدت میدان الکتریکی فشار نفوذ کاهش می‌شود. همچنین رفتار سیستم نسبت به جهت میدان الکتریکی منفی است بیشتر از زمانی است که جهت میدان الکتریکی مثبت می‌باشد.

در کار قبلی نویسندها، اثر پارامترهای برهمنکنش کربن-آب (پارامترهای انرژی (e) و فاصله (d) در پتانسیل لنارد-جونز) بر سیستم جذب انرژی نانوسیالی بررسی شده است [18]. این پارامترها قدرت برهمنکنش‌ها میان مولکول‌های آب و نانولوله‌کربنی را نشان می‌دهند. شش مقدار براي هر یک از پارامترها انتخاب شده است تا بطور سیستماتیک اثر این پارامترها بر سیستم جذب انرژی نانوسیالی بررسی شود. شدت آب‌گریزی نانولوله‌کربنی با افزایش هر یک از پارامترها کاهش می‌یابد. زمانی که سطح نانولوله‌کربنی آب‌گریز می‌باشد، زاویه تماس، فشار نفوذ و چگالی انرژی جذب شده با افزایش هریک از پارامترهای برهمنکنش، کاهش می‌یابد.

در کارهای تجربی و شیوه‌سازی، تأثیر عوامل مختلفی مانند دما، اندازه (قطر) نانولوله‌کربنی، نوع بارگذاری، نوع سیال، میدان الکتریکی و غیره بر سیستم جذب انرژی نانوسیالی بررسی شده است. اما بر اساس مرور تحقیقات پیشین، تاکنون اثر طول نانولوله‌کربنی بر سیستم جذب انرژی نانوسیالی بررسی نشده است. بنابراین در این کار اثر طول نانولوله‌کربنی در قطرهای مختلف آن بر مشخصه‌های عملکرد یک سیستم جذب انرژی نانوسیالی مانند فشار نفوذ، بروفاپیل چگالی شعاعی، چگالی و راندمان جذب انرژی بررسی می‌شود.

2- مدل و روش حل

2-1- مدل محاسباتی

مدل محاسباتی شامل یک قطعه صلب از یک نانولوله‌کربنی یک جداره و یک مخزن مستطیل شکل است (شکل ۱). مخزن توسط دو صفحه صلب گرافن در بالا و پائین محدود شده است. صفحه صلب بالایی ثابت و صفحه صلب پائینی قابل حرکت است تا شبیه به یک پیسیون عمل کند. نانولوله‌کربنی به صفحه صلب بالایی متصل است و انتهای آن توسط یک دریوش گرافنی بسته شده است. چهار نانولوله‌کربنی صندلی (۸,۸)، (۱۰,۱۰)، (۱۲,۱۲) و (۱۴,۱۴) با قطرهای به ترتیب ۰.۰۸۵، ۰.۱۳۵۶، ۰.۱۶۲۷ و ۰.۱۸۹۸ nm در نظر گرفته

¹ Lennard-Jones potential

² Bond stretching

³ Angle bending

⁴ Transferable Intermolecular Potential 3 Points (TIP3P)

⁵ Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)

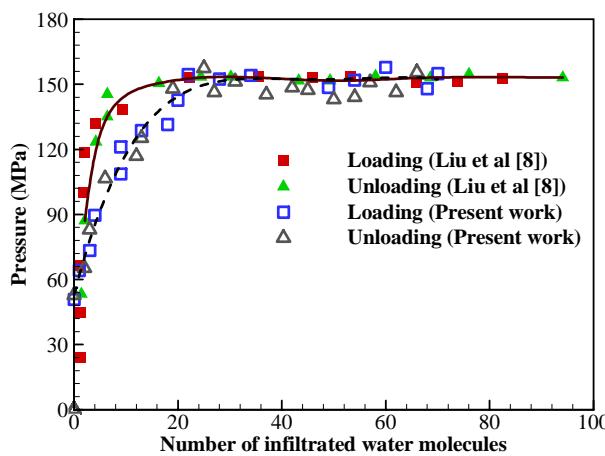


Fig. 2 Comparison of the infiltration curve obtained from the present work with that of Liu et al [8]

شکل 2 مقایسه منحنی نفوذ بدست آمده از کار حاضر با نتایج حاصل از مرجع [8]

شکل 24 شبیه‌سازی با قطر و طول‌های مختلف نانولوله کربنی انجام شده است که در آنها تعداد و موقعیت اولیه مولکول‌های آب، تابع‌های انرژی پتانسیل و شرایط اولیه محیطی (دمای 300 K و فشار 1 atm) یکسان است. در ادامه اثر طول نانولوله کربنی در قطراهای مختلف آن بر فشار نفوذ، پروفایل چگالی شعاعی، چگالی و راندمان جذب انرژی بررسی می‌شود.

3- نتایج

در شکل 3 منحنی نفوذ برای یک نانولوله کربنی (10,10) به طول 5 nm نشان داده شده است.

فرایند بارگذاری در منحنی نفوذ شامل سه قسمت می‌باشد: در ابتدا مولکول‌های آب درون مخزن فشرده می‌شوند که در قسمت اولیه منحنی نفوذ مشاهده می‌شود. بعد از اینکه فشار درون مخزن به یک فشار استانه می‌رسد مولکول‌های آب وارد نانولوله کربنی می‌شوند. به این فشار استانه، فشار نفوذ گفته می‌شود. مولکول‌های آب درون نانولوله کربنی نفوذ می‌کنند تا اینکه به انتهای نانولوله کربنی برسند. این مرحله که در قسمت میانی منحنی نفوذ ظاهر می‌شود، فلات نفوذ⁴ نامیده می‌شود. قسمت نهایی فرایند نفوذ، فشرده

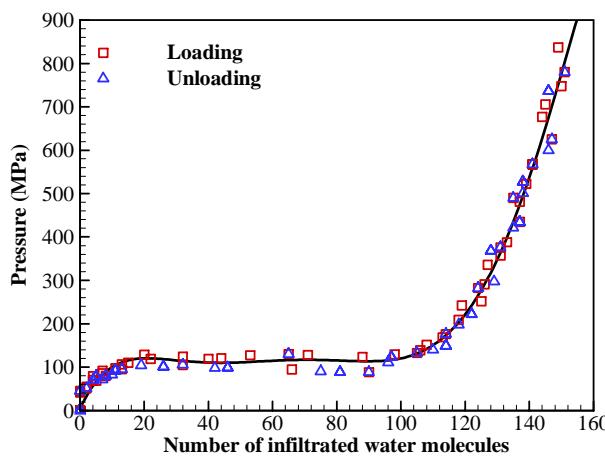


Fig. 3 Infiltration curve in carbon nanotube (10,10) with a length of 5 nm

شکل 3 منحنی نفوذ در نانولوله کربنی (10,10) به طول 5 nm

⁴ Infiltration plateau

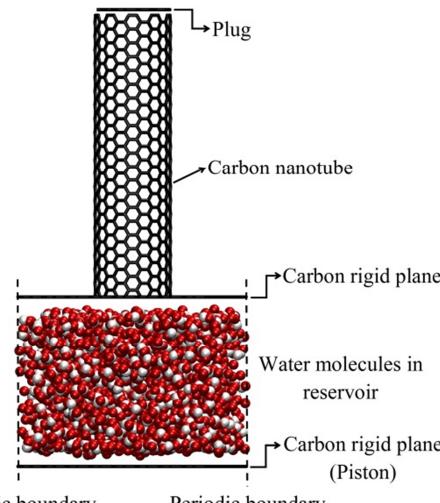


Fig. 1 Computational cell: rectangular reservoir and carbon nanotube
شکل 1 سلو محساستی: یک مخزن مستطیلی و یک نانولوله کربنی

شبیه‌سازی‌ها از هنگرد کاتونی (NVT) و برای ثابت نگه داشتن دمای سیستم در 300 K از ترمومتر نوز-هوور¹ استفاده شده است. شعاع قطع برای پتانسیل لنارد-جونز برابر 10 \AA در نظر گرفته و از روش ذره-ذره-شبکه² با دقت 10^{-4} برای برهم‌کنش‌های برد بلند کوئنی استفاده شده است. گام زمانی برای همه شبیه‌سازی‌ها 1 fs است.

فشار مولکول‌های آب درون مخزن با استفاده از معادله حالت بر حسب چگالی بدست می‌آید [15]:

$$P = P_0 + 298 \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{7.15} - 1 \right] \quad (3)$$

که در آن ρ چگالی، P_0 و ρ_0 به ترتیب چگالی و فشار اولیه هستند و مقادیر آنها به ترتیب 1 g/cm^3 و 0.1 MPa می‌باشد. با جابه‌جایی پیستون، حجم مخزن و تعداد مولکول‌های آب درون مخزن تغییر خواهد کرد. درنتیجه فشار درون مخزن نیز تغییر خواهد کرد.

2- اعتبارسازی شبیه‌سازی

قبل از بررسی اثر طول نانولوله کربنی بر سیستم جذب انرژی نانوسیالی یک شبیه‌سازی با داده‌های برگرفته از مرجع [8] جهت اعتبارسازی انجام شده است. در این شبیه‌سازی از نانولوله کربنی (10,10) به طول 5 nm و از مدل آب بار نقطه‌ای ساده گسترش یافته³ (SPC/E) برای ثابت‌ها و ضرایب برهم‌کنش‌ها در مولکول‌های آب استفاده شده است. مقدار جابه‌جایی پیستون در هر گام 0.005 nm است. حداکثر جابه‌جایی پیستون 0.6 nm می‌باشد. پارامترهای برهم‌کنش کربن-آب $e_{co} = 0.07471 \text{ kcal/mol}$ و $s_{co} = 3.194 \text{ \AA}$ هستند [23]. سایر مشخصات در مدل و روش حل این شبیه‌سازی با آنچه در بخش‌های 1-2 و 2-2 آورده شده است یکسان است. برای اعتبارسازی، تغییرات فشار درون مخزن بر حسب تعداد مولکول‌های آب نفوذ کرده در نانولوله کربنی (منحنی نفوذ) در هر دو کار در شکل 2 مقایسه شده‌اند. همان‌طور که از شکل 2 مشاهده می‌شود نتایج حاصل از این شبیه‌سازی با داده‌های مرجع [8] در تطابق بسیار عالی هستند. حداکثر اختلاف بین فشارهای نفوذ 0.1 درصد است.

¹ Nose-Hoover Thermostat

² Particle-Particle-Particle-Mesh (PPPM)

³ Extended Simple Point Charge (SPC/E)

می‌یابد. با افزایش قطر نانولوله کربنی، دهانه ورودی نانولوله کربنی (نانوسوراخ‌ها در نانوذرات مواد نانومتاخخل) افزایش می‌یابد و مولکول‌های آب بیشتری در ورودی نانولوله کربنی قرار می‌گیرند. همچنین با افزایش طول نانولوله کربنی، اندازه نانوذرات در مواد نانومتاخخل بیشتر می‌شود و مولکول‌های آب بیشتری در نزدیکی سطح جامد قرار می‌گیرند. در هر دو حالت تعداد بیشتری از مولکول‌های آب توانایی غلبه بر سد انرژی ناشی از کشش سطحی جامد-مایع دارند و در نتیجه بر اثر فشار نفوذ کمتری به درون نانولوله کربنی نفوذ می‌کنند.

2-3- پروفیل چگالی شعاعی

پروفیل چگالی شعاعی توسطتابع توزیع شعاعی g_r تعریف می‌شود:

$$g_r = \frac{n_r}{2\pi r \Delta r n_{in}} \quad (4)$$

که در آن n_r تعداد مولکول‌های توزیع شده در یک پوسته استوانه‌ای حلقوی به شاعر داخلی r و به ضخامت Δr می‌باشد و n_{in} تعداد کل مولکول‌های نفوذ کرده در نانولوله کربنی می‌باشد. در حقیقت تابع g_r احتمال وجود مولکول‌های آب در یک استوانه حلقوی است که برای بررسی پیکربندی مولکول‌های آب درون نانولوله کربنی استفاده می‌شود. در شکل 6 پروفیل چگالی شعاعی برای طول‌های مختلف نانولوله کربنی (10,10) نشان داده شده است. داده‌ها، زمانی که پیستون از 0.8 تا 1.0 nm جابه‌جا می‌شود، میانگین‌گیری شده است. همان‌طور که از شکل 6 مشاهده می‌شود چگالی شعاعی برخلاف توده فاز مایع، در نانولوله کربنی غیریکنواخت است و شامل دو پوسته می‌باشد: پوسته اول در نزدیکی دیوار نانولوله کربنی و پوسته دوم در نزدیکی مرکز نانولوله کربنی. مقدار چگالی شعاعی در پوسته دوم از پوسته اول بیشتر می‌باشد. دلیل آن به این خاطر است که برهم‌کنش میان مولکول‌های آب در نانولوله کربنی قوی‌تر می‌باشد. بنابراین مولکول‌های آب در نانولوله کربنی بیشتر تمایل دارند در نزدیکی مرکز نانولوله کربنی قرار بگیرند. با افزایش طول نانولوله کربنی مقدار چگالی شعاعی در فاصله میان دو پوسته با افزایش طول نانولوله کربنی مقدار چگالی شعاعی در فاصله میان دو پوسته قرار می‌گیرد. دلیل آن به خاطر اینست که با افزایش طول نانولوله کربنی تعداد مولکول آب بیشتری در نانولوله کربنی نفوذ می‌کند.

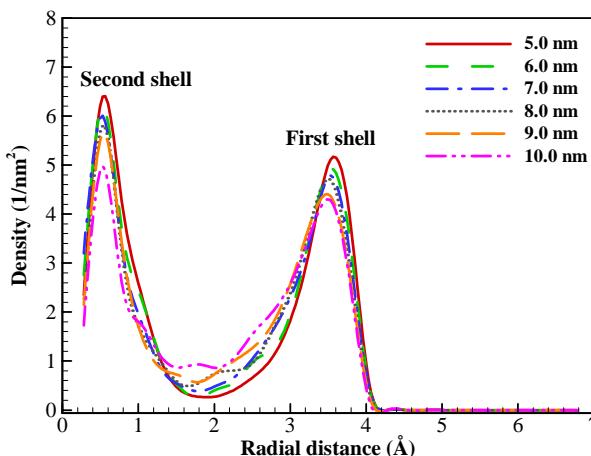


Fig. 6 Radial density profile at different lengths of the carbon nanotube (10,10)

شکل 6 پروفیل چگالی شعاعی در طول‌های مختلف نانولوله کربنی (10,10)

شدن مولکول‌های آب درون مخزن و نانولوله کربنی می‌باشد که بعد از بر شدن نانولوله کربنی از مولکول‌های آب شروع می‌شود و در بخش نهایی منحنی نفوذ نمایان می‌شود. در منحنی نفوذ فرایند باربرداری بر فرایند بارگذاری مطابق است و بعد از پیان باربرداری، مولکول‌های آب از نانولوله کربنی خارج شده‌اند. منحنی نفوذ برای سایر نانولوله‌های کربنی شبیه به شکل 3 است.

در شکل 4 موقعیت مولکول‌های آب در لحظه ورود و پر شدن در نانولوله کربنی (12,12) به طول 6 nm نشان داده شده است.

یکی از پارامترهای بسیار مهم در سیستم جذب انرژی نانوسیالی فشار نفوذ می‌باشد. در شکل 5 مقادیر فشار نفوذ در طول و قطرهای مختلف نانولوله کربنی نشان داده شده است.

همان‌طور که از شکل 5 مشخص است با افزایش طول و قطر نانولوله کربنی فشار نفوذ بطور متوسط به ترتیب 30 و 15 درصد کاهش

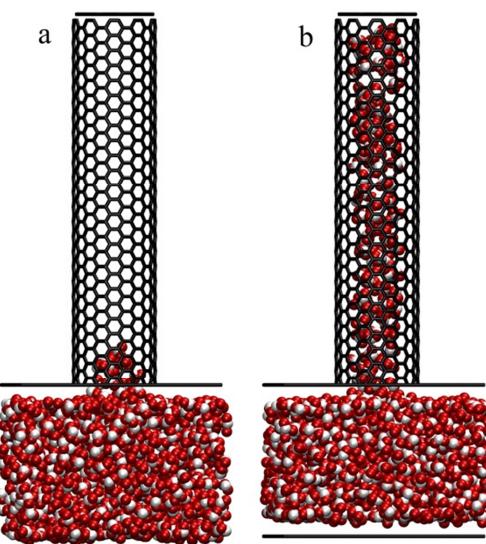


Fig. 4 Positions of water molecules at the beginning of infiltration (a) and at the end of filling (b) of carbon nanotube (12,12) with a length of 6 nm

شکل 4 موقعیت مولکول‌های آب در لحظه شروع نفوذ (a) و در پیان پر شدن (b) نانولوله کربنی (12,12) به طول 6 nm

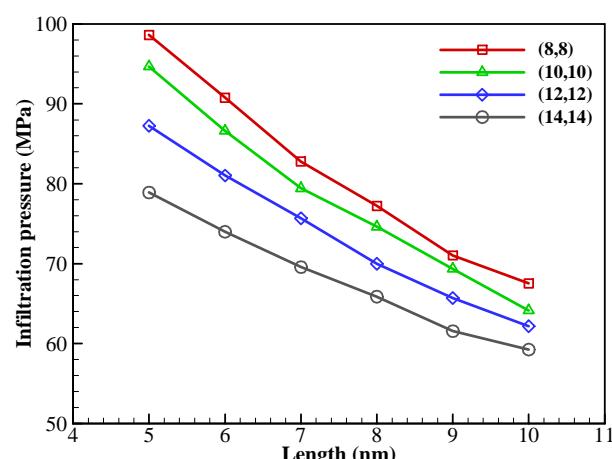


Fig. 5 Infiltration pressure at different diameters and lengths of the carbon nanotube

شکل 5 فشار نفوذ در طول و قطرهای مختلف نانولوله کربنی

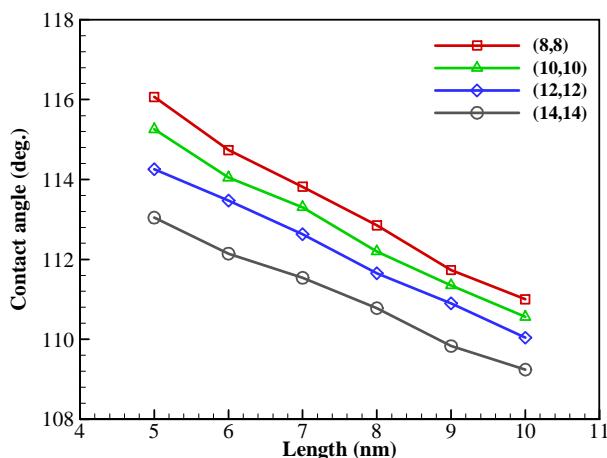


Fig. 7 Contact angle at different diameters and lengths of the carbon nanotube

شکل 7 زاویه تماس در طول و قطرهای مختلف نانولوله‌کربنی

سیستم کاهش می‌یابد.

در سیستم جذب انرژی نانوسيالی که سطح نانولوله‌کربنی آب‌گریز می‌باشد، انرژی لازم برای چسباندن مولکول‌های آب به سطح داخلی نانولوله‌کربنی بوسیله کار خارجی ناشی از حرکت پیستون تأمین می‌شود؛ از آنجایی که سطح نانولوله‌کربنی بدون اصطکاک می‌باشد، در واقع انرژی مکانیکی ناشی از حرکت پیستون به انرژی کشش سطحی تبدیل می‌شود. بنابراین A_{SL} معادل با کار مکانیکی ورودی به سیستم می‌باشد. بازده سیستم جذب انرژی نانوسيالی از رابطه (8) بدست می‌آید:

$$\eta = \frac{|\Delta\gamma|}{A_{SL}} \quad (8)$$

در شکل 9 مقادیر بازده جذب انرژی در طول و قطرهای مختلف نانولوله‌کربنی نشان داده شده است. همان‌طور که از شکل 9 مشاهده می‌شود در سیستم جذب انرژی نانوسيالی می‌توان به بازده جذب انرژی بسیار بزرگی دست یافت. با افزایش طول و قطر نانولوله‌کربنی راندمان جذب انرژی در سیستم جذب انرژی نانوسيالی کاهش می‌یابد. با افزایش قطر و طول نانولوله‌کربنی سطح دیواره نانولوله‌کربنی افزایش می‌یابد، در نتیجه انرژی بیشتری برای چسباندن مولکول‌های آب به سطح داخلی نانولوله‌کربنی نیاز است و یا به عبارتی دیگر انرژی بیشتری باید صرف شود تا فضای داخل

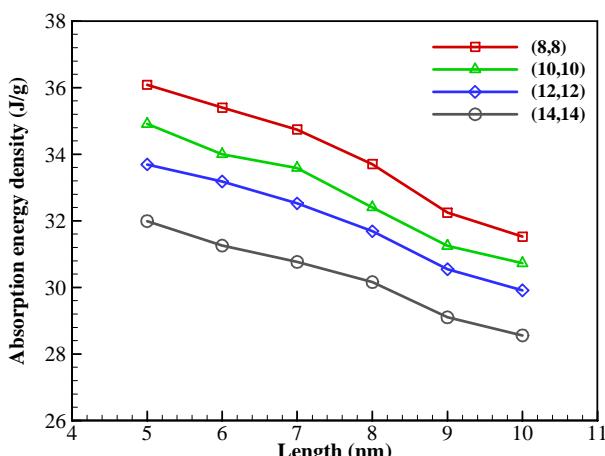


Fig. 8 Absorption energy density at different diameters and lengths of the carbon nanotube

شکل 8 چگالی جذب انرژی در طول و قطرهای مختلف نانولوله‌کربنی

3-3- تبدیل انرژی

در مرحله فلاٹ نفوذ در منحنی نفوذ، دو عامل کشش سطحی و اصطکاک بر انتقال مولکول‌های آب در نانولوله‌کربنی مقابله می‌کنند. از آنجایی که فشار در فلاٹ نفوذ در همه قطرها و طول‌های نانولوله‌کربنی، تغییر نمی‌کند؛ بنابراین در مرحله انتقال مولکول‌های آب در نانولوله‌کربنی برای غلبه بر اصطکاک افزایش فشاری ایجاد نشده است. در نتیجه در همه طول‌های نانولوله‌کربنی اصطکاک وجود ندارد. همچنین دلیل منطبق بودن فرایند باربرداری بر فرایند بارگذاری نیز عدم وجود اصطکاک در نانولوله‌کربنی است. انرژی لازم برای ایجاد یک سطح مشترک جامد-مایع در نانولوله‌کربنی از رابطه (5) بدست می‌آید:[24]

$$A_{SL} = \gamma_{SV} + \gamma_{LV} - \gamma_{SL} \quad (5)$$

که در آن γ_{SV} ، γ_{LV} و γ_{SL} به ترتیب کشش‌های سطحی جامد-بخار، مایع-بخار و جامد-مایع هستند. با استفاده از قانون یانگ معادله (5) به صورت معادله (6) ساده می‌شود:[24]

$$A_{SL} - \gamma_{LV} = \gamma_{SV} - \gamma_{SL} = \gamma_{LV} \cos \theta \quad (6)$$

که در آن θ زاویه تماس است.

کشش سطحی مایع-بخار انرژی برهمنش میان مولکول‌های آب است و چون شرایط مولکول‌های آب درون مخزن با شرایط محیطی ماکروسکوپیک آب یکسان می‌باشد، بنابراین کشش سطحی مایع-بخار مولکول‌های آب درون مخزن در دمای K 300 و فشار 1 atm برابر 0.0717 J/m^2 است [25]. مقدار A_{SL} برابر انرژی برهمنش میان اتم‌های کربن در نانولوله‌کربنی و مولکول‌های آب نفوذ کرده بر واحد سطح دیوار نانولوله‌کربنی است وقتی که نانولوله‌کربنی از مولکول‌های آب پر می‌شود. در شکل 7 زاویه تماس که معیار شدت ترشوندگی (آبدوستی یا آب‌گریزی) نانولوله‌کربنی است، در طول و قطرهای مختلف نانولوله‌کربنی نشان داده شده است. مقادیر زاویه تماس در طول و قطرهای مختلف نانولوله‌کربنی بیشتر از 90 درجه می‌باشد، بنابراین سطح نانولوله‌کربنی آب‌گریز می‌باشد، به همین خاطر تحت شرایط اولیه مولکول‌های آب وارد نانولوله‌کربنی نمی‌شوند و به یک فشار خارجی (فشار نفوذ) برای نفوذ نیاز دارند. با افزایش طول و قطر نانولوله‌کربنی زاویه تماس و در نتیجه شدت آب‌گریزی سطح نانولوله‌کربنی بطور متوسط به ترتیب 4 و 2 درصد کاهش می‌یابد. بنابراین با افزایش طول و قطر نانولوله‌کربنی فشار نفوذ کاهش می‌یابد.

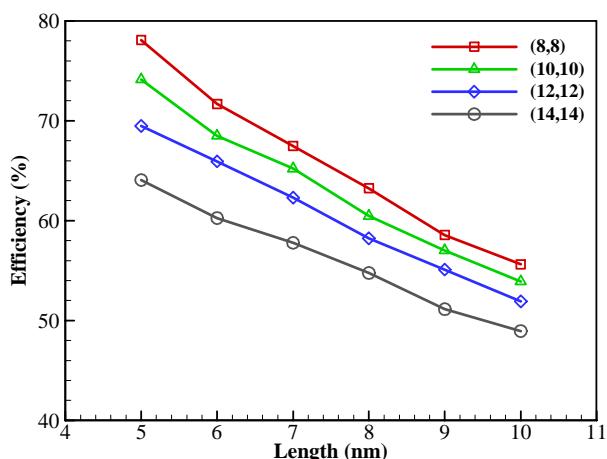
انرژی تبدیل شده در سیستم جذب انرژی نانوسيالی از رابطه (7) بدست می‌آید:

$$E = |\Delta\gamma| \times A \quad (7)$$

که در آن A سطح دیوار نانولوله‌کربنی و $\Delta\gamma = \gamma_{SV} - \gamma_{SL}$ می‌باشد. چگالی جذب انرژی (انرژی تبدیل شده بر واحد جرم اتم‌های کربن نانولوله‌کربنی) در طول و قطرهای مختلف نانولوله‌کربنی در شکل 8 نشان داده شده است. همان‌طور که از شکل 8 مشخص است، در کل، چگالی جذب انرژی در سیستم جذب انرژی نانوسيالی نسبت به سایر سیستم‌های جذب انرژی رایج (مانند کامپوزیت‌های انعطاف‌پذیر) که چگالی جذب انرژی در آنها $0.1-1 \text{ J/g}$ است) بسیار بیشتر می‌باشد. اما با افزایش طول و قطر نانولوله‌کربنی چگال جذب انرژی در سیستم کاهش می‌یابد. در واقع با افزایش قطر و طول نانولوله‌کربنی سطح دیواره نانولوله‌کربنی افزایش می‌یابد. بنابراین مطابق رابطه (7) مقدار انرژی جذب شده در سیستم افزایش می‌یابد. اما با افزایش قطر و طول نانولوله‌کربنی (نانوسوراخ‌ها در نانوذرات مواد نانومتلخلخل) جرم نانوذرات مواد نانومتلخلخل افزایش می‌یابد و در نتیجه چگالی جذب انرژی درون

۵- مراجع

- [1] M. Majumder, N. Chopra, R. Andrews, B. J. Hinds, Nanoscale hydrodynamics: Enhanced flow in carbon nanotubes, *Nature*, Vol. 438, No. 7064, pp. 44-44, 2005.
- [2] G. Hummer, J. C. Rasaiah, J. P. Noworyta, Water conduction through the hydrophobic channel of a carbon nanotube, *Nature*, Vol. 414, No. 6860, pp. 188-190, 2001.
- [3] X. Chen, B. Xu, L. Liu, Nanoscale fluid mechanics and energy conversion, *Applied Mechanics Review*, Vol. 66, No. 5, pp. 050803, 2014.
- [4] Y. Qiao, V. K. Punyamurtula, G. Xian, V. M. Karbhari, A. Han, Conversion of mechanical work to interfacial tension in a nanoporous silica gel, *Applied Physics Letters*, Vol. 92, No. 6, pp. 063109, 2008.
- [5] A. Han, V. K. Punyamurtula, Y. Qiao, Heat generation associated with pressure-induced infiltration in a nanoporous silica gel, *Journal of Materials Research*, Vol. 23, No. 7, pp. 1902-1906, 2008.
- [6] X. Kong, Y. Qiao, Improvement of recoverability of a nanoporous energy absorption system by using chemical admixture, *Applied Physics Letters*, Vol. 86, No. 15, pp. 151919, 2005.
- [7] F. B. Surani, X. Kong, D. B. Panchal, Y. Qiao, Energy absorption of a nanoporous system subjected to dynamic loadings, *Applied Physics Letters*, Vol. 87, No. 16, pp. 163111, 2005.
- [8] L. Liu, J. Zhao, P. J. Culligan, Y. Qiao, X. Chen, Thermally responsive fluid behaviors in hydrophobic nanopores, *Langmuir*, Vol. 25, No. 19, pp. 11862-11868, 2009.
- [9] L. Liu, J. Zhao, C. Y. Yin, P. J. Culligan, X. Chen, Mechanisms of water infiltration into conical hydrophobic nanopores, *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 11, No. 30, pp. 6520-6524, 2009.
- [10] H. Liu, G. Cao, Effects of impact velocity on pressure-driven nanofluid, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 139, No. 11, pp. 114701, 2013.
- [11] H. Liu, H. Cao, Interaction between mechanical wave and nanoporous energy absorption system, *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 117, No. 8, pp. 4245-4252, 2013.
- [12] G. Cao, Working mechanism of nanoporous energy absorption system under high speed loading, *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 116, No. 14, pp. 8278-8286, 2012.
- [13] J. Zhao, L. Liu, P. J. Culligan, X. Chen, Thermal effect on the dynamic infiltration of water into single-walled carbon nanotubes, *Physical Review E*, Vol. 80, No. 6, pp. 061206, 2009.
- [14] H. Liu, G. Cao, Super energy absorption system based on nanofluidic glycerol solution, *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 118, No. 43, pp. 25223-25233, 2014.
- [15] G. Cao, Y. Qiao, Q. Zhou, X. Chen, Water infiltration behaviours in carbon nanotubes under quasi-static and dynamic loading conditions, *Molecular Simulation*, Vol. 34, No. 10-15, pp. 1267-1274, 2008.
- [16] L. Liu, Y. Qiao, X. Chen, Pressure-driven water infiltration into carbon nanotube: the effect of applied charges, *Applied Physics Letters*, Vol. 92, No. 10, pp. 101927, 2008.
- [17] B. Xu, Y. Qiao, Q. Zhou, X. Chen, Effect of electric field on liquid infiltration into hydrophobic nanopores, *Langmuir*, Vol. 27, No. 10, pp. 6349-6357, 2011.
- [18] S. H. Ganjiani, A. Hossein Nezhad, Molecular dynamics simulation of the effects of the carbon-water interaction parameters on the nanofluidic energy absorption, *Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 120, No. 22, pp. 11864-11870, 2016.
- [19] A. R. Leach, *Molecular modelling, principles and applications*, Second Edition, pp. 165-247, London, Prentice hall, 2011.
- [20] B. Xu, Y. Qiao, T. Park, M. Tak, Q. Zhou, X. Chen, A conceptual thermal actuation system driven by interface tension of nanofluids, *Energy & Environmental Science*, Vol. 4, No. 9, pp. 3632-3639, 2011.
- [21] G. Karniadakis, A. Beskok, N. Aluru, *Microflows and nanoflows, fundamentals and simulation*, pp. 625-648, New York, Springer, 2005.
- [22] S. J. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *Journal of Computational Physics*, Vol. 117, No. 1, pp. 1-19, 1995.
- [23] M. J. Bojan, W. A. Steele, Interactions of diatomic molecules with graphite, *Langmuir*, Vol. 3, No. 6, pp. 1123-1127, 1987.
- [24] A. Marchand, J. H. Weijis, J. H. Snoeijer, B. Andreotti, Why is surface tension a force parallel to the interface?, *American Journal of Physics*, Vol. 79, No. 10, pp. 999-1008, 2011.
- [25] N. B. Vargaftik, B. N. Volkov, L. D. Voljak, International tables of the surface tension of water, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, Vol. 12, No. 3, pp. 817-820, 1983.



شکل ۹ راندمان جذب انرژی در طول و قطرهای مختلف نانولوله‌کربنی

نانولوله‌کربنی از مولکول‌های آب پر شود. بنابراین راندمان جذب انرژی کاهش می‌یابد.

۴- نتیجه‌گیری

با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اثر طول و قطر نانولوله‌کربنی بر یک سیستم جذب انرژی نانوسیالی بررسی شد. برای این منظور ۶ طول مختلف ۵. ۷. ۸. ۹. ۱۰ nm و ۱۰ nm برای چهار نانولوله‌کربنی (8,8), (10,10), (12,12) و (14,14) در نظر گرفته شد. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که در طول و قطرهای مختلف نانولوله‌کربنی، سطح نانولوله‌کربنی بدون اصطکاک می‌باشد که باعث می‌شود بعد از اعمال یک سیکل بارگذاری-باربرداری بر سیستم، مولکول‌های آب بطور کامل از نانولوله‌کربنی خارج شوند. با افزایش طول در هر یک از نانولوله‌های کربنی، زاویه تماس بطور متوسط ۴ درصد کاهش یافته و در نتیجه فشار نفوذ بطور متوسط ۳۰ درصد کاهش می‌یابد. در همه نانولوله‌های کربنی، با افزایش طول نانولوله‌کربنی چگالی و راندمان جذب انرژی کاهش می‌یابند. زاویه تماس و فشار نفوذ در همه طول‌های نانولوله‌کربنی با افزایش قطر نانولوله‌کربنی بطور متوسط به ترتیب ۲ و ۱۵ درصد کاهش می‌یابند. همچنین در همه طول‌های نانولوله‌کربنی، با افزایش قطر نانولوله‌کربنی چگالی و راندمان جذب انرژی کاهش می‌یابد. جرم نانولوله‌کربنی با افزایش قطر و طول نانولوله‌کربنی افزایش می‌یابد و افزایش انرژی نانوسیالی می‌شود. وقتی که قطر و طول نانولوله‌کربنی افزایش می‌یابد، فضای داخل نانولوله‌کربنی افزایش می‌یابد و در نتیجه انرژی بیشتری صرف پر شدن آن از مولکول‌های آب می‌شود و باعث کاهش راندمان جذب انرژی در سیستم جذب انرژی نانوسیالی می‌شود.