



تأثیر تغییر ثابت فنر دیوار بر توزیع سیال لنارد-جونز در نانوکanal به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

رضا ربانی¹، قاسم حیدری‌نژاد^{2*}، ابراهیم شیرانی³

1- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

2- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

3- استاد، مهندسی مکانیک، موسسه آموزش عالی صنعتی فولاد، اصفهان

* صندوق پستی 14115-143، gheidari@modares.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 02 تیر 1396

پذیرش: 02 مرداد 1396

ارائه در سایت: 17 شهریور 1396

کلید واژگان:

انتقال گرما

گاز رقیق

ثابت فنر دیوار

چکیده

به منظور شبیه‌سازی عددی فرآیند انتقال گرما از ساختار دیوار به سیال در نانوکanalها، بازه‌ی وسیعی از ثابت فنر بسته به جنس دیوار مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این مقاله تأثیر تغییر ثابت فنر دیوار بر انتقال گرما و توزیع خواص میکروسکوپی مختلف سیال بررسی شده است. به این منظور، انتقال حرارت در گاز آرگون با عدد نودسن 10 بین دو دیوار ساکن از یک نانوکanal با عرض 5.4 نانومتر با استفاده از روش دینامیک مولکولی شبیه‌سازی شده است. مقایسه‌ی نتایج نشان می‌دهد که با کاهش ثابت فنر دیوار، دامنه نوسانات اتم‌های دیوار افزایش یافته و این امر امکان نزدیک‌تر شدن اتم‌های گاز به سطح دیوار را افزایش می‌دهد که در نتیجه شار حرارتی عبوری از گاز و متناظر با آن ضریب هدایت حرارتی افزایش می‌یابد. بررسی نتایج افزایش ضریب هدایت حرارتی گاز در عرض نانوکanal از $k_s = 1100\epsilon\sigma^{-2}$ به $k_s = 100\epsilon\sigma^{-2}$ برای کاهش مقدار ثابت فنر از $k_s = 1100\epsilon\sigma^{-2}$ به $k_s = 100\epsilon\sigma^{-2}$ نشان می‌دهد. به علاوه نزدیک‌تر شدن اتم‌های گاز به سطح، پرش دمایی بر روی مرز را کاهش داده که این امر موجب افزایش هر چه بیشتر چگالی گاز در مجاورت دیوار سرد و کاهش آن در مجاورت دیوار گرم می‌گردد. مقایسه‌ی پروفیل توزیع دما، چگالی و فشار در عرض نانوکanal نشان می‌دهد که مستقل از تغییرات ثابت فنر، مقدار بیشینه‌ی کمیت‌های مذکور در فاصله $\sigma/2$ از دیواره اتفاق می‌افتد.

The wall spring constant variation effect on distribution of Lennard-Jones fluid in nanochannel by molecular dynamic simulation

Reza Rabani¹, Ghassem Heidarinejad^{1*}, Ebrahim Shirani²

1- Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

2- Department of Mechanical Engineering, Foolad Institute of Technology, Fooladshahr, Isfahan, Iran

* P.O.B. 14115-143, Tehran, Iran, gheidari@modares.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 23 June 2017

Accepted 24 July 2017

Available Online 08 September 2017

Keywords:

Heat transfer

rarefied gas

wall spring constant

ABSTRACT

In order to simulate the heat transfer process from wall to fluid in nanochannel numerically, extensive range of spring constants with regard to wall material is used. In this paper, the effect of variation in wall spring constant on the heat transfer and distribution of the macroscopic properties of fluid is investigated. In this regard, heat transfer in argon gas between two stationary walls of a 5.4 nm nanochannel with Knudsen number 10 has been simulated using the molecular dynamic method. Comparison between the results shows that by reducing the wall spring constant, the amplitude of wall atoms vibration increased, causing the gas atoms to become closer to the wall surface which results in an increase in the heat flux and thermal conductivity coefficient of the gas. Evaluating the result reveals that while the spring constant reduces from $k_s = 1100\epsilon\sigma^{-2}$ to $k_s = 100\epsilon\sigma^{-2}$, the thermal conductivity coefficient of the gas changes from $0.11 \text{ mW/m} - K$ to $0.27 \text{ mW/m} - K$. Furthermore, the reduced distance between the gas atoms and wall surface results in a decrease in the temperature jump on the wall so it increases the gas density near the cold wall while it decreases near the warm wall. Comparison between temperature, density and pressure profiles in the nanochannel height shows that regardless of the amount of spring constant variation, the maximum of these properties has occurred at $\sigma/2$ from the walls.

1- مقدمه

الکترومکانیکی¹، شناخت دقیق مکانیزم انتقال مومنتم و حرارت در گاز درون میکرو و نانوکanalها مورد توجه محققین قرار گرفته است. محصور شدن سیال در ابعاد نانو² در نانوکanal و نانوحفره‌ها، موجب افزایش قابل ملاحظه‌ی فاصله

به دلیل پیشرفت چشمگیر تکنولوژی ساخت در ابعاد میکرو و نانو در سال‌های اخیر و در نتیجه توسعه‌ی گسترده‌ی سیستم‌های میکرو/نانو

¹ Micro/Nano Electromechanical System

² Nano Confinement

Please cite this article using:

R. Rabani, Gh. Heidarinejad, E. Shirani, The wall spring constant variation effect on distribution of Lennard-Jones fluid in nanochannel by molecular dynamic simulation, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 9, pp. 185-194, 2017 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

مانند روش‌های مذکور، نیازمند مدل برخوردی از پیش مشخص شده می‌باشد. بررسی دقیق تحقیقات صورت گرفته در این زمینه، نشان می‌دهد که مطالعات فراوانی در زمینه جریان گاز و انتقال گرما در رژیم‌های جریان لغزشی، گذرا و آزاد مولکولی انجام شده است.

با استفاده از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو، جریان درون نانو کانال‌ها و میکرو/نانو پله‌ها توسط دربندی و روحی [6] در گستره‌ی وسیعی از اعداد نودسن مورد بررسی قرار گرفت و نشان داده شد که در اعداد نودس بالا پروفیل سرعت به حالت خطی در می‌آید. همچنین نشان داده شد که تغییرات خواص سیال در ناحیه‌ی میانی رژیم جریان گذرا و رژیم جریان آزاد مولکولی بسیار آرامتر از تغییر خواص در ناحیه‌ی جریان لغزشی و ناحیه‌ی ابتدای رژیم جریان گذرا می‌باشد. تأثیر زبری و فرورفتگی سطح در جریان پوازی آرگون مایع توسط بخشان و جهرمی [7] مورد بررسی قرار گرفت. بررسی نتایج نشان داد که زبری ایجاد شده بر روی دیوار پایینی تأثیر بیشتری از فرورفتگی متناظر خود بر توزیع پروفیل سرعت و چگالی سیال دارد و همچنین زبری ایجاد شده تنش برشی دیوار پایینی را افزایش داده و تنش برشی دیوار بالایی را کاهش می‌دهد. این در حالی است که فرورفتگی بر روی دیوار پایینی تنها تنش برشی دیوار پایینی را افزایش می‌دهد.

علاوه بر پیچیدگی‌های به وجود آمده به دلیل افزایش عدد نودسن، در صورت کاهش عرض کانال تأثیر نیروی دیواره بر توزیع خواص سیال قابل توجه است. با توجه به این که طول اثر نیروی عمل و عکس‌العمل وندروالس موجود بین سطح و گاز آرگون حدوداً 1nm می‌باشد (حدود سه برابر قطر مولکول آرگون)، کاملاً مشخص است که در صورت وجود کانالی به عرض $H = 5\text{nm}$ و یا $H = 10\text{nm}$ ، این نیرو به ترتیب به حدود 40% و 20% عرض کانال موثر بوده و خواص سیال را تغییر می‌دهد که این امر در تئوری رژیم آزاد مولکولی که بر مبنای تئوری انرژی جنبشی به دست آمده است، قابل پیش بینی نمی‌باشد [8]. بنابراین ارزیابی دقیق تأثیر نیروی دیوار بر سیال و مشخص کردن مقدار اختلاف با پیش‌بینی‌های مبتنی بر تئوری جنبشی، از اهمیت خاصی در نانوکanal‌ها برخوردار است. روش دینامیک مولکولی را می‌توان به منظور مشخص کردن اثر برهم‌کنش گاز/دیوار در شبیه‌سازی‌های عددی به کار برد.

بارسیک و همکاران [8] با معرفی مدل دیوار هوشمند به منظور شبیه‌سازی مولکول‌های دیوار، حل جریان کوئت در نانوکanal‌ها با عرض در حدود 5 و 10 نانومتر در اعداد نودسن بالا (رژیم آزاد مولکولی) را انجام داده و خصوصیات هیدرودینامیکی جریان تحت اثر نیروی دیواره را مورد مطالعه قرار دادند. در این مدل به جای مدل کردن تمامی مولکول‌های دیواره، تنها تعدادی از آن‌ها که مولکول گاز در آن نقطه به نزدیکی دیوار رسیده است، در هر لحظه مدل می‌شوند. بنابراین تعداد مولکول‌های به کار رفته در مدل‌سازی دیواره‌ها به شدت کاهش یافته و در نتیجه زمان محاسبات به شکل قابل توجهی کاهش می‌یابد. نتایج این تحقیق نشان داد که حل معادله بولتزمن در ناحیه تأثیر نیروی دیوار، نتایج دقیقی ارائه نکرده و برای حل دقیق پروفیل سرعت و ... باید الزاماً از روش دینامیک مولکولی استفاده شود.

به منظور بررسی تأثیر نیروی دیوار بر توزیع تنش برشی درون سیال، بارسیک و بسکوک [9] اثر نیروی دیواره را بر توزیع تنش برشی درون سیال بررسی نمودند. در این تحقیق نشان داده شد که تنش ذره-ذره^{۱۴} بین مولکول‌های گاز با افزایش چگالی، افزایش می‌یابد. از طرف دیگر بین

پویش آزاد مولکولی در مقایسه با طول مشخصه میدان شده که این امر موجب از بین رفتن فرضیه‌ی پیوستگی^۲ و تعادل ترمودینامیکی می‌شود و در نتیجه رفتار سیال با تئوری‌های متداول به درستی قابل پیش‌بینی نمی‌باشد.

برای توصیف سیال در این شرایط از عدد بی‌بعد نودسن^۳ (نسبت فاصله پویش آزاد مولکولی گاز به طول مشخصه جریان) استفاده می‌شود. رژیم‌های جریان در ابعاد میکرو/نانو بر اساس این عدد طبقه‌بندی شده است [1]:

• جریان پیوسته^۴ ($Kn \leq 0.001$): فرضیات پیوستگی سیال و تعادل ترمودینامیکی برقرار هستند و معادلات ناویر-استوکس و شرط مرزی عدم لغزش در آن معتبر است. گاد-ال-هاک [2] نشان داد که فرض تعادل ترمودینامیکی در نودسن‌های بالاتر از 0.001 برقرار نیست، پس بهتر است مرز این ناحیه در عدد نودسن 0.001 باشد.

• جریان‌های لغزشی^۵ ($0.001 \leq Kn \leq 0.1$): معادلات ناویراستوکس را می‌توان همچنان برای توده‌ی سیال مورد استفاده قرار داد، اما هنگامی که به مرز جامد نزدیک می‌شویم، سیال رفتار متفاوتی از خود نشان می‌دهد و شرایط تعادل در نزدیک مرز برقرار نیست. با این حال کماکان امکان استفاده از معادلات ناویر-استوکس به همراه شرط مرزی سرعت لغزشی و پرش دمایی وجود دارد [3].

• جریان‌های گذرا^۶: اثر رقیق شدن در جریان غالب شده و فرضیات پیوستگی سیال و تعادل ترمودینامیکی به طور کامل از بین می‌روند. در این ناحیه رابطه بین تنش و کرنش درون لایه نودسن غیر خطی می‌باشد و معادلات ناویر-استوکس اعتبار خود را از دست داده و باید از معادله بولتزمن و یا برنت استفاده نمود [4]. معادله برنت^۷ فرم تعمیم یافته معادلات ناویر-استوکس است که با در نظر گرفتن جملات مرتبه دوم عدد نودسن در تابع توزیع احتمال ذرات بدست می‌آیند [3].

• جریان‌های آزاد مولکولی^۸: برخوردهای بین مولکولی در مقابل برخورد مولکول‌ها با دیواره جامد بسیاری ناچیز بوده و معادله حاکم، معادله بولتزمن غیر برخوردی^۹ می‌باشد.

در این دسته‌بندی از فرضیه "تشابه دینامیکی"^{۱۰} بین جریان گاز در محیط‌های کم فشار و فضاها با ابعاد کوچک استفاده شده است بنابراین تا وقتی که اثر نیروی دیواره بر کل میدان حل قابل اغماض باشد، می‌توان از آن استفاده کرد. افزایش عدد نودسن چالش‌های فراوانی را بر فرمول‌بندی و اعمال شرایط مرزی در مدل‌های پیوسته‌ی مرتبه بالا^{۱۱} ایجاد می‌کند. جریان گاز در ابعاد میکرو و نانو به طور متداول با استفاده از تئوری جنبشی^{۱۲} بر مبنای معادله بولتزمن، مدل می‌گردد. حل عددی و تحلیلی معادله بولتزمن به دلیل پیچیدگی‌های بوجود آمده برای حل جمله‌ی برخورد و چند بعدی بودن معادله، بسیار چالش برانگیز است. علاوه بر روش‌های مذکور، می‌توان از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو^{۱۳} ارائه شده توسط برد [5] برای شبیه‌سازی جریان در رژیم‌های لغزشی، گذرا و آزاد مولکولی استفاده کرد که این روش به

¹ Nano pores

² Continuum assumption

³ Knudsen Number

⁴ Continuum

⁵ Slip

⁶ Transition

⁷ Burnett Equation

⁸ Free Molecular

⁹ Collisionless Boltzmann Equation

¹⁰ Dynamic Similarity

¹¹ High Order Continuum Method

¹² Kinetic Theory

¹³ Direct Simulation Monte Carlo Method (DSMC)

¹⁴ Particle-Particle Virial

گرما از سیال به دیواره‌ها با در نظر گرفتن اثر نیروی دیواره بر آن در اعداد نودسن بالا، با استفاده از مدل دیوار گرمایی تعاملی⁶ برداشته شده است. پس از صحت‌سنجی کد عددی مورد استفاده با مقایسه با نتایج جریان کوئت در ابعاد نانو، نتایج حل دو بعدی و سه بعدی در تحقیق مذکور مقایسه شد و نشان داده شد که به منظور شبیه‌سازی دقیق حل گرمایی، نیاز به حل سه بعدی می‌باشد. همچنین با مقایسه نتایج به دست آمده نشان داده شد که ابعاد شبکه در راستاهای تناوبی می‌بایست حداقل به اندازه فاصله پویس آزاد مولکولی باشد تا جریان سیال به درستی توسعه یابد. همچنین با مقایسه سه گام زمانی مختلف نشان داده شد که حداکثر گام زمانی مجاز در شرایط مذکور 4fs می‌باشد. بررسی نتایج نشان داد که مستقل از اختلاف دمای اعمال شده بین دو دیوار، پروفیل دما و چگالی در فاصله یک نانومتر از سطح دیوار به شدت تغییر می‌کند و افزایش اختلاف دمای دو دیوار به مقادیر بالاتر از 20 درجه، تغییر چگالی قابل ملاحظه‌ای را نسبت به پروفیل مذکور در حالت همدمای ایجاد می‌کند که این امر می‌بایست در تعیین ضریب انتقال حرارت هدایتی گاز مورد توجه قرار گیرد. در واقع اعمال اختلاف دمای بالاتر تا 20 درجه بین دو دیوار می‌تواند مقدار ضریب هدایت حرارتی محاسبه شده را تا 50 درصد نسبت به مقدار واقعی آن در دمای مذکور افزایش دهد.

در مطالعه مذکور و به منظور شبیه‌سازی دقیق انتقال گرما از دیواره از مدل دیوار گرمایی تعاملی، ارائه شده توسط کیم و همکاران [14] استفاده شده و مقدار ثابت فنر برابر با $k_s = 500\epsilon\sigma^{-2}$ در نظر گرفته شده است. در این مدل مطابق با شکل 1، بر تک‌تک ردیف اتم‌های به کار رفته در شبیه‌سازی دیوار ترموستات اعمال می‌شود و مولکول‌ها در دیوار با فنر به هم مرتبط بوده و ارتعاش می‌کنند. همچنین ترموستات اعمال شده بر روی دیواره‌ها با استفاده از روش مقیاس کردن سرعت‌ها عمل می‌کند. ترکیب این ارتعاش و ترموستات‌ها، دمای دقیق مورد نظر را برای دیوار تولید می‌کنند. ارتعاشات گرمایی مولکول‌های دیواره به وسیله مکانیزم برخورد، انرژی و مومنتم را از سیال جذب کرده و یا به آن انتقال می‌دهند. در این مدل دیواره‌ها به عنوان حمام گرمایی عمل کرده و تعادل گرمایی سیال را به همراه دارند. در نتیجه نیاز به اعمال هیچ‌گونه ترموستاتی بر روی معادلات حرکت مولکول‌های سیال به منظور جلوگیری از افزایش و یا کاهش درجه حرارت در طی فرآیند حل وجود ندارد. بررسی مطالعات پیشین نشان می‌دهد که در جریان‌های گازی در میکرو/نانوکanal‌ها، مقدار ضریب مذکور بسته به ماده‌ی انتخابی در ساختار دیوار وابسته، ضریب ثابت فنی معادل در محدوده‌ی اعداد $k_s = 100\epsilon\sigma^{-2}$ تا $k_s = 1200\epsilon\sigma^{-2}$ را دارا می‌باشند [15,14]. این محدوده دقیقاً معادل با ماده‌ی است که برای ساخت دیواره‌ها در تجهیزات میکرو/نانو سیالی⁷ از آن استفاده می‌شود.

با در نظر گرفتن مطالب بیان شده و مرور دقیق ادبیات فن، در این مقاله تأثیر تغییر ثابت فنر معادل با انتخاب مواد مختلف جهت شبیه‌سازی دیواره بر توزیع خواص سیال نظیر پروفیل دما، چگالی، فشار، شار گرمایی عبوری از سیال و ضریب هدایت حرارتی سیال تحت تأثیر نیروی دیواره مورد بررسی قرار خواهد گرفت. لازم به ذکر است که برای محاسبه‌ی فشار سیال و شار هدایتی حرارتی عبوری از سیال از رابطه‌ی ایروینگ-کِرک‌وود⁸ استفاده شده است. در مقاله‌ی حاضر ابتدا جزئیات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بیان می‌گردد. پس از آن مراحل حل به روش مذکور و پارامترهای در نظر گرفته شده

مولکول‌های دیوار و مولکول‌های گاز نزدیک به آن، در مجاورت دیواره تنش تحت عنوان تنش سطح-ذره¹ بوجود می‌آید که در نهایت موجب غیرهمگنی توزیع تنش عمودی در عرض نانوکanal‌ها می‌شود.

بررسی نتایج جریان کوئت گاز آرگون در رژیم گذرا و آزاد مولکولی درون نانوکanal‌ها توسط باریسیک و بسکوک [10] نشان می‌دهد که در تمامی موارد، مقدار عددی ضریب تطابق تماسی بین گاز و دیوار مستقل از عدد نودسن و خصوصیات سیال می‌باشد. در ادامه جریان پوازی گاز آرگون درون نانوکanal‌ها در حالت سه بعدی به وسیله روش دینامیک مولکولی بررسی شده و مقایسه نتایج به دست آمده با نتایج حاصل از تئوری جنبشی نشان داد که برای مقادیر محدود² نسبت طول نفوذ نیروی دیوار به عرض کانال، "تشابه دینامیکی" بین جریان گاز در شرایط کم فشار و فضاها با ابعاد کوچک از بین می‌رود و این در حالی است که با کاهش این مقدار به سمت صفر، فرضیه تشابه مولکولی برقرار و حل مبتنی بر روش تئوری جنبشی مقادیر صحیحی را برای شرایط مذکور ارائه می‌کند [11].

مقایسه نتایج حل کامل دینامیک مولکولی با حل مبتنی بر توزیع ماکسول نشان می‌دهد که این توزیع علی‌رغم توانایی در محاسبه اثرات رقیق‌شدگی و غیرتعادلی، قادر به شبیه‌سازی اثرات ناشی از محصور شدن سیال در ابعاد نانو مثل تأثیر نیروی دیواره و جذب سطحی³ نیست. جمع‌بندی نتایج حاصل از شبیه‌سازی هیدرو-دینامیکی جریان تحت تأثیر نیروی دیواره نشان می‌دهد که در ناحیه نزدیک دیوار، تغییرات شدیدی در چگالی و سرعت گاز وجود دارد و توزیع تنش برشی و عمودی به صورت غیریکنواخت می‌باشد و جذب سطحی مولکول‌های گاز را می‌توان به‌عنوان تابعی از پارامترهای تعاملی گاز-جامد در نظر گرفت. به علاوه مقایسه‌ی پروفیل سرعت به دست آمده از دینامیک مولکولی با حل صورت گرفته بر روی معادله خطی شده بولتزمن نشان از تطابق کامل این پروفیل در قسمت‌های میانی کانال دارد و این در حالی است که در نزدیکی دیواره، به دلیل وجود نیروی دیواره و افزایش زمان حضور مولکول‌های گاز در مجاورت آن، عدم تطابق وجود داشته و سرعت گاز در این ناحیه به سرعت دیوار نزدیک‌تر می‌گردد [12]. در تحقیقات مذکور و با توجه به استفاده از مدل دیوار هوشمند، دمای دیوار و سیال یکسان در نظر گرفته شده و گرمای تولیدی در سیال به دلیل پدیده‌ی اتلافات لزجی، به وسیله ترموستات از آن خارج شده است. از طرفی حرارت تولیدی به دلیل وجود پدیده اتلافات لزجی⁴ در جریان همدمای⁵ درون میکرو و نانوکanal‌ها، بسیار قابل توجه است و باید به درستی در محاسبات در نظر گرفته شود تا اثر آن بر سایر پارامترهای جریان به طور دقیق مدل گردد. در مسئله فیزیکی در شرایط واقعی، گرمای تولیدی به دیواره‌ها منتقل شده و قسمتی از آن توسط دیواره‌ها دفع و قسمت دیگر آن صرف افزایش دمای گاز می‌گردد و این نشان می‌دهد که روش استفاده از ترموستات بر روی گاز تنها تقریبی از حل اصلی مسئله است. به علاوه در بسیاری از کاربردها، دمای بین دو دیوار در نانوکanal متفاوت است و انتقال گرما بین سیال و دیواره‌ها وجود دارد. همانگونه که مشاهده می‌گردد و با توجه به کاربردهای مختلف بررسی تأثیر نیروی دیواره بر توزیع دما و پارامترهای انتقال گرما از اهمیت خاصی برخوردار است.

در مطالعه‌ی پیشین [13] گام‌های ابتدایی در شبیه‌سازی دقیق تر انتقال

¹ Surface-Particle Virial

² Finite Value

³ Surface Adsorption

⁴ Viscous Dissipation

⁵ Isothermal

⁶ Interactive Thermal Wall Model

⁷ Micro/Nano fluidic

⁸ Irving-Kirkwood

$$V(r) = \begin{cases} 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right) - V(r_c), & r \leq r_c \\ 0, & r > r_c \end{cases} \quad (1)$$

برای این رابطه قطر مولکول $\sigma = 0.3405 \text{ nm}$ ، عمق چاه پتانسیل¹ $\epsilon = 119.8 \times k_b$ ، ثابت بولتزمن $k_b = 1.3806 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ ، فاصله بین مولکولی r_{ij} و شعاع قطع $r_c = 1.08 \text{ nm}$ می‌باشد. در روند حل دینامیک مولکولی و از آنجایی که تابع پتانسیل لنارد جونز در مقادیر فواصل بین مولکولی بزرگ بسیار ناچیز می‌گردد، تنها اثر متقابل آن‌ها با مولکول‌هایی که در یک شعاع مشخص (شعاع قطع) قرار دارند محاسبه می‌گردد. در نتیجه نیروی بین مولکولی در شعاع قطع برش خورده و به مقدار صفر می‌رسد.

بررسی‌ها نشان می‌دهد که افزایش شعاع قطع با ضریب M ، زمان محاسباتی را به مقدار M^6 افزایش می‌دهد زیرا هزینه محاسباتی در روش دینامیک مولکولی متناسب با مربع تعداد مولکول‌های موجود در سلول است [9]. جرم هر اتم آرگون برابر با $m = 6.63 \times 10^{-26} \text{ kg}$ در نظر گرفته شده و در تمامی شبیه‌سازی‌ها دمای اولیه گاز برابر با 298 K و چگالی گاز برابر با $\rho = 1.896 \text{ kg/m}^3$ می‌باشد. به منظور ساده‌سازی فرضیات حل، برای دیوار نیز مولکول‌هایی به جرم $(m_{\text{wall}} = m_{\text{Ar}})$ و قطر معادل با مولکول‌های آرگون $(\sigma_{\text{wall}} = \sigma_{\text{Ar}})$ در ساختار FCC² در نظر گرفته شده است. همچنین قدرت پتانسیل³ نیروی بین مولکولی بین مولکول‌های دیوار-گاز برابر با قدرت پتانسیل مولکول‌های گاز-گاز $(\epsilon_{\text{wall-Ar}} = \epsilon_{\text{Ar-Ar}})$ در نظر گرفته شده است. در تمامی شبیه‌سازی‌های صورت گرفته، اختلاف دمای مورد نظر به صورت متقارن نسبت به دمای گاز در نظر گرفته و بر روی دیواره‌ها اعمال شده است. در طی فرآیند حل، بر روی هر یک از دیواره‌ها ترموستات قرار داده شده است و پارامترهای ترموستات مذکور به گونه‌ای تنظیم گردیده‌اند که دمای دیوار در دمای مورد نظر ثابت باشد. به دلیل اینکه شعاع قطع در تابع پتانسیل لنارد - جونز برابر با $r_c = 1.08 \text{ nm}$ می‌باشد، به منظور شبیه‌سازی دقیق هر یک از دیواره‌ها از دو لایه ساختار FCC برای مدل کردن هر دیوار استفاده شده است [8]. همان‌گونه که پیشتر بیان شد، در حل هیدرودینامیکی از مدل دیوار هوشمند استفاده شده است که این مدل علی رغم سرعت بخشیدن به حل هیدرودینامیکی جریان، جزء مدل‌های دیوار سرد⁴ محسوب شده که در آن مولکول‌ها در مکان خود به صورت صلب حضور داشته و امکان ارتعاش را ندارند. بنابراین این مدل قابلیت شبیه‌سازی انتقال گرما از دیواره‌ها را ندارد [10] و به همین دلیل در کار حاضر از مدل دیوار گرمایی تعاملی به جهت شبیه‌سازی انتقال حرارت صورت گرفته از دیواره‌ها استفاده شده است.

به طور کلی در الگوریتم کلی حل به روش دینامیک مولکولی، ابتدا با استفاده از شرایط اولیه، مکان و سرعت هر ذره مشخص می‌شود. سپس نیروی وارد بر هر ذره با مشتق گیری از تابع پتانسیل لنارد جونز محاسبه می‌شود و

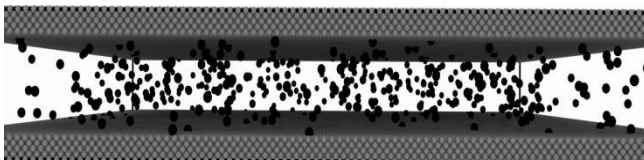


Fig. 2 The view of the simulation domain in Knudsen number 10

شکل 2 نمای از میدان حل در عدد نودسن 10

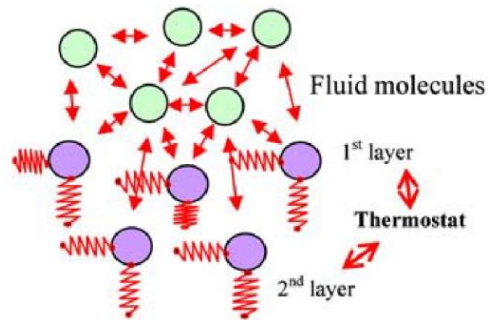


Fig. 1 Schematic figure of thermal wall model [14]

شکل 1 شکل شماتیکی از مدل دیوار حرارتی [14]

برای ابعاد جریان و خواص فیزیکی سیال و دیوار بیان شده و سپس صحت سنجی کد عددی مورد استفاده با مقایسه‌ی نتایج به دست آمده با داده‌های ارائه توسط سایر محققین بررسی می‌شود. در ادامه تأثیر همزمان تغییر ثابت فنر و نیروی دیواره بر سیال و توزیع پارامترهای مختلف در آن بررسی شده و تأثیر همزمان این دو پارامتر بر توزیع دما، فشار، چگالی، شارحرارتی عبوری از گاز و ضریب هدایت حرارتی گاز آرگون مورد بررسی قرار گرفته است. بر مبنای بررسی‌های انجام شده توسط نویسندگان در ادبیات فن، تاکنون تأثیر همزمان پارامترهای ثابت فنر و نیروی دیوار بر توزیع خواص در گاز آرگون در اعداد نودسن بالا مورد بررسی قرار نگرفته است و در واقع کار حاضر برای اولین بار انجام شده و نتایج آن در این مقاله ارائه شده است. پروفیل دما، چگالی و فشار ارائه شده می‌تواند در تعیین ضریب تطابق انرژی سیال و دیوار مورد استفاده قرار گیرد. در نهایت ضریب انتقال حرارت هدایتی سیال با محاسبه شار حرارتی عبوری از گاز و در نظر گرفتن تغییرات پروفیل دما با استفاده از قانون فوریه محاسبه شده و برای ثابت فنر مختلف ارائه گردیده و جمع‌بندی مطالب مذکور بیان شده است.

2- شبیه‌سازی سه‌بعدی دینامیک مولکولی

در کار حاضر گاز آرگون بین دو صفحه موازی که با یکدیگر $H = 5.4 \text{ nm}$ فاصله دارند، مطابق شکل 2 قرار گرفته است. بر طبق مشاهدات صورت گرفته در پژوهش‌های پیشین، در فاصله یک نانومتر از هر سطح تأثیر نیروی دیوار بر توزیع دما و چگالی در سیال قابل ملاحظه است و انتظار می‌رود که توزیع سایر خواص سیال نظیر فشار و ... در این ناحیه تحت تأثیر نیروی دیواره قرار گیرد. با عبور از این دو ناحیه و نزدیک شدن به مرکز کانال، تأثیر نیروی دیواره بر توزیع خواص مختلف سیال کاهش می‌یابد. در تمامی شبیه‌سازی‌ها دیوار بالایی، دیوار گرم و دیوار پایینی، دیوار سرد در نظر گرفته شده است. لازم به ذکر است که در جهت‌های محوری (x) و جانبی (z) شرایط مرزی تناوبی اعمال شده است و طول کانال در این راستاها به اندازه‌ی فاصله آزاد مولکولی (54nm) در نظر گرفته شده است. به منظور شبیه‌سازی نیروهای وندروالی موجود بین مولکول‌های گاز-گاز و گاز-دیوار از تابع پتانسیل برش خورده‌ی لنارد- جونز 6-12 (L-J) استفاده شده است. تابع پتانسیل لنارد- جونز، نیروی وان‌دروالس موجود بین مولکول‌ها را شبیه‌سازی می‌کند و این تابع برای شرایطی که در آن با گاز تک اتمی غیر باردار همانند آرگون سروکار داریم، تقریب بسیار دقیقی از نیروی وان‌دروالس موجود بین مولکول‌ها ارائه می‌کند. تابع پتانسیل لنارد جونز که به طور گسترده توسط سایر محققین [8-12] نیز برای شبیه‌سازی گاز آرگون مورد استفاده قرار گرفته است، به صورت رابطه (1) بیان می‌گردد:

¹ Depth of Potential Well

² Face-Centered Cubic

³ Potential Strength

⁴ Cold Wall Model

شده است. در حل مذکور سرعت مشخصه جریان کوئت $U_w = 64 \text{ m/s}$ و عرض کانال برابر با $H = 5.4 \text{ nm}$ در نظر گرفته شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، پروفیل سرعت در نزدیکی دیوار برای هر سه حالت ترموستات، دقیقاً با نتایج حل انجام شده توسط باریسیک و همکاران [10] تطابق دارد. همان‌گونه که بررسی شکل‌ها نشان می‌دهد، مشخص است که در نزدیکی دیواره و مطابق انتظار پروفیل سرعت و چگالی از توزیع خود در ناحیه میانی کانال دور شده‌اند. بررسی نتایج نشان می‌دهد که روش مورد استفاده در این تحقیق به خوبی قادر به نشان دادن اثرات نیروی دیواره است و بنابراین می‌توان از این روش در ادامه کار استفاده کرد.

4- نتایج

در تمامی حل‌های صورت گرفته در این مقاله و به منظور امکان مشاهده تأثیر ثابت فنر بر توزیع سیال و همچنین امکان محاسبه ضریب انتقال حرارت هدایتی در دمای مورد نظر، دمای ابتدایی گاز برابر 298K در نظر گرفته شده است و به منظور اعمال اختلاف دمای 20K بین دو دیوار، دمای دیوار بالایی (دیوار گرم) برابر با 308K و دمای دیوار پایینی (دیوار سرد) برابر با 288K در

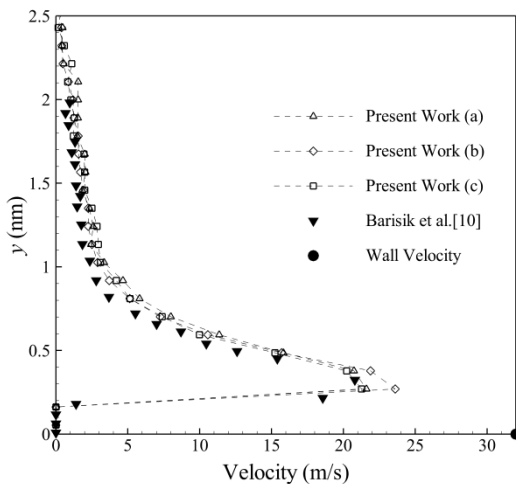


Fig. 3 Comparison of the present work's velocity profile in channel width with Ref.[10]

شکل 3 مقایسه پروفیل سرعت نتایج حاضر با نتایج مرجع [10]

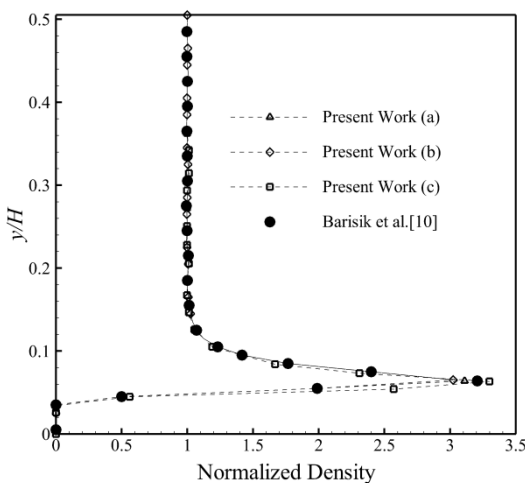


Fig. 4 Comparison of the present work's normalized density profile with Ref.[10]

شکل 4 مقایسه پروفیل چگالی بی‌بعد نتایج حاضر با نتایج مرجع [10]

با استفاده از نیروی به دست آمده و با توجه به جرم هر مولکول، شتاب حرکت هر ذره مشخص می‌گردد. در ادامه و با استفاده از الگوریتم سرعت ورله¹، مکان و سرعت هر ذره در انتهای گام زمانی بعد محاسبه شده و اگر هنوز به زمان مورد نظر نرسیده‌ایم، مراحل دو و سه تکرار می‌شود. در نهایت پس از اتمام حل اولیه و رسیدن به شرایط پایا، بر روی نتایج مولکولی میانگین‌گیری انجام می‌شود تا خواص میکروسکوپی سیال به دست آید. شبیه‌سازی‌ها از توزیع سرعت ماکسول-بولتزمن² در دمای مورد نظر برای مولکول‌های گاز آغاز می‌شود. برای تمامی مقادیر ضریب فنر در نظر گرفته شده به منظور شبیه‌سازی دیوار، اختلاف دمای 20K بین دو دیوار اعمال شده است تا بتوان علاوه بر مشاهده تغییرات خواص مختلف سیال تحت تأثیر تغییر ثابت فنر، مقدار ضریب انتقال حرارت هدایتی را نیز برای دمای 298K محاسبه کرد.

در اختلاف دمای مذکور بین دو دیوار، گام زمانی نیز برابر با 4fs در نظر گرفته شده است و برای هر حل، تعداد 25 میلیون گام زمانی برای سپری شدن حالت گذرای اولیه و رسیدن به شرایط پایا³ انجام شده است و سپس تعداد 100 میلیون گام زمانی جهت میانگین‌گیری از نتایج مولکولی و به دست آوردن توصیف میکروسکوپی از سیال نظیر پروفیل دما، چگالی و ... در نظر گرفته شده است. لازم به ذکر است که در هر حالت و به منظور اطمینان از صحت نتایج، میانگین‌گیری برای گام‌های زمانی بیشتری نیز انجام شده و توزیع دما و چگالی با مقادیر مربوط به اعداد ذکر شده مقایسه گشته و نشان داده شده است که با افزایش میانگین‌گیری به مقادیر بیشتر، دقت نتایج افزایش نخواهد یافت. برای میانگین‌گیری و به دست آوردن توزیع پارامترهای میکروسکوپی معادل در گاز از روی نتایج میکروسکوپی، عرض کانال به 100 باریکه⁴ مساوی تقسیم شده است که عرض هر باریکه تقریباً معادل با $\sigma/10$ می‌باشد. عرض بسیار کم برای میانگین‌گیری در این حل در هر کدام از باریکه‌ها، به منظور شبیه‌سازی دقیق رفتار سیال در نزدیکی دیواره مورد نیاز است. عرض کانال از مرکز اولین ردیف اتم دیوار مربوط به دیوار بالایی تا مرکز اولین ردیف اتم دیوار در دیوار پایینی در نظر گرفته می‌شود. با توجه به اینکه نمایش تمامی 100 نقطه در عرض کانال به منظور بیان توزیع پروفیل دما و چگالی و ... برای چندین ثابت فنر مختلف، نمودار را تا حدی غیر قابل فهم می‌نماید، تنها تعدادی از این نقاط برای هر ثابت فنر به نمایش در آمده است.

3- صحت‌سنجی حل

از آنجا که در این پژوهش از کد عددی متن باز⁵ با زه لمپس⁶ به منظور شبیه‌سازی مسائل مورد نظر استفاده شده است، در این گام نتایج حاصل از کد عددی مذکور با نتایج موجود در پژوهش‌های پیشین مقایسه شده و صحت استفاده از کد عددی لمپس در این گونه مسائل بررسی خواهد شد.

به منظور صحت‌سنجی حل هیدرودینامیکی کد لمپس برای شرایط مذکور، پروفیل سرعت و چگالی در نیمه پایینی کانال برای سه تنظیم متفاوت از پارامترهای ترموستات در جریان کوئت بدون انتقال گرما از دیواره‌ها، به ترتیب در شکل 3 و شکل 4 با شرایط مشابه مرجع [10] مقایسه

¹ Velocity Verlet Algorithm

² Maxwell-Boltzmann Velocity Distribution

³ Steady State Condition

⁴ Slab

⁵ Open Source

⁶ LAMMPS(Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)

افزایش می‌یابد. بر طبق شکل 8 بیشینه اختلاف دمای تجربه شده توسط گاز برای $k_s = 1100\epsilon\sigma^{-2}$ برابر با 8.54K است که با کاهش ضریب فنر به $k_s = 100\epsilon\sigma^{-2}$ ، این مقدار به 11.96K می‌رسد. در واقع افزایش دامنه و کاهش فرکانس نوسانات بیشینه اختلاف دمای تجربه شده توسط گاز را در حدود 40% افزایش داده است.

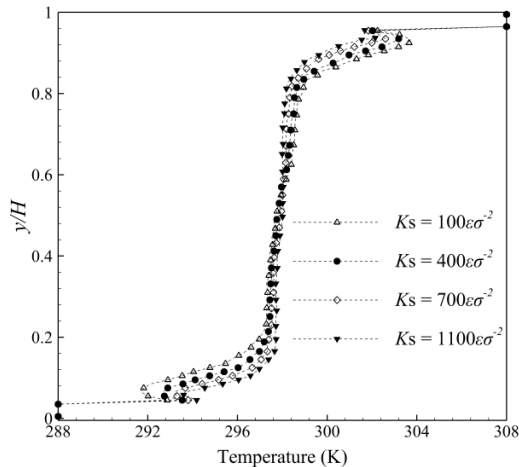


Fig. 5 Distribution of temperature profile for different spring constant
شکل 5 توزیع پروفیل دما برای ضرایب فنر متفاوت

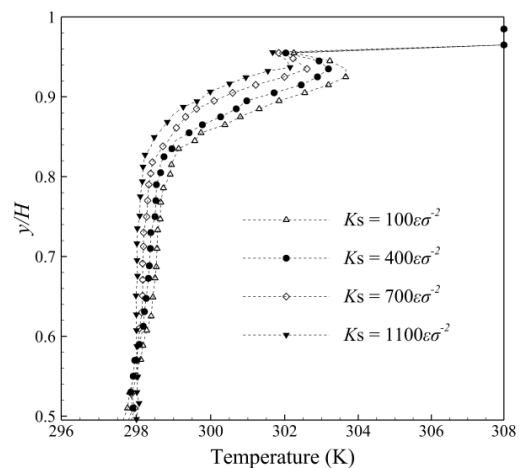


Fig. 6 Distribution of temperature profile in upper channel's half
شکل 6 توزیع پروفیل دما در نیمه بالایی کانال

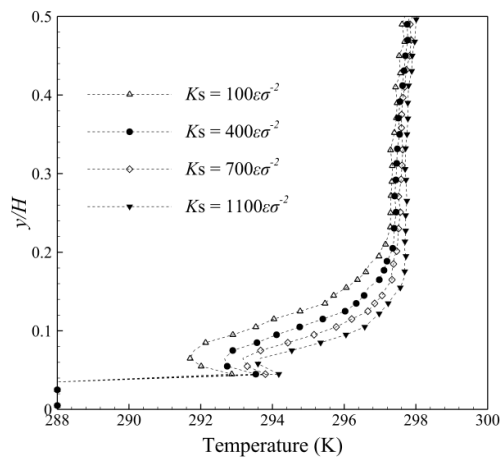


Fig. 7 Distribution of temperature profile in upper channel's half
شکل 7 توزیع پروفیل دما در نیمه پایینی کانال

نظر گرفته شده است. بدیهی است که در صورت افزایش اختلاف درجه حرارت بین دیواره‌ها، دمای بسیار بالا یا بسیار پایین در نزدیکی دیواره خود موجب تغییر توزیع سیال در مجاورت دیواره شده و در آن صورت امکان مشاهده تأثیر تغییر ثابت فنر بر توزیع خواص سیال به تنهایی وجود ندارد پس در این شرایط می‌بایست از اختلاف دماهای کم استفاده نمود تا تأثیر پارامتر مورد نظر به تنهایی لحاظ گردد.

1-4- توزیع دما

نمودار توزیع دما در عرض کانال برای مقادیر گوناگونی از ثابت فنر به کار رفته در شبیه‌سازی دیوار در شکل 5 ارائه شده است. همانگونه که ملاحظه می‌شود برای تمامی مقادیر این ضریب، در فاصله 1nm از هر دیوار پروفیل دما از توزیع خطی موجود در ناحیه میانی کانال¹ فاصله گرفته و به دمای دیوار نزدیک‌تر می‌شود. همچنین مطابق این شکل، رفتار پروفیل دما در ناحیه میانی کانال مستقل از ضریب فنر اعمالی بر روی دیوار است. مقایسه میزان تغییرات دما در ناحیه میانی کانال و نزدیک دیواره‌ها برای تمامی ضرایب فنر استفاده شده نشان می‌دهد که قسمت عمده تغییرات دما در عرض کانال در نزدیکی دیواره‌ها رخ می‌دهد و در قسمت میانی کانال تغییرات دمای بسیار کمتری مشاهده می‌گردد. این امر نشان می‌دهد که در نانوکanalها با ارتفاعی در مرتبه 5nm تا 20nm که نیروی دیواره سهم قابل توجهی از کانال را پوشش می‌دهد، تأثیر نیروی دیواره بر انتقال حرارت بسیار بیشتر از پدیده‌ی رقیق شدگی (عدد نودسن) می‌باشد و به همین علت می‌بایست به دقت مورد بررسی قرار گیرد.

در شکل 6 و شکل 7، توزیع دما در مجاورت دیوار بالایی و پایینی به ترتیب نشان داده شده است. همانگونه که مشاهده می‌گردد مستقل از ضریب فنر به کار رفته برای مدل‌سازی دیواره، بیشینه دما در نزدیکی هر دیوار در فاصله $\sigma/2$ از دیواره روی می‌دهد. در واقع با افزایش فاصله از سطح دیوار، رفته رفته تأثیر نیروی دیواره بر پروفیل دما کاهش یافته و در فاصله 1nm از هر دیوار تأثیر نیروی دیواره بر توزیع دما تا حد زیادی از بین می‌رود. به علاوه ملاحظه می‌گردد که در نزدیکی هر دو دیوار سرد و گرم، کاهش ضریب فنر به کار رفته در شبیه‌سازی دیوار موجب نزدیک‌تر شدن دمای گاز به دمای دیوار می‌شود.

در واقع در مدل دیوار گرمایی تعادلی به کار گرفته شده در شبیه‌سازی‌ها، اتم‌های دیواره حول نقطه تعادل خود² ارتعاش می‌کنند. برای ثابت‌های فنر کوچکتر، دامنه³ نوسانات اتم‌ها افزایش یافته و فرکانس⁴ نوسانات کاهش می‌یابد [15]. این امر موجب شده است که مولکول‌های گاز بتوانند تا مسافت بیشتری به اتم‌های دیوار نزدیک شوند و در نتیجه انتقال حرارت بیشتری بین آن‌ها صورت پذیرد و دمای گاز به دمای دیواره نزدیک‌تر گردد. برخلاف مطالب بیان شده با افزایش ثابت فنر، فرکانس نوسانات بیشتر شده و در نتیجه امکان نزدیک‌تر شدن بیشتر مولکول‌های گاز به دیواره وجود ندارد در نتیجه دمای گاز نمی‌تواند به دمای دیواره نزدیک گردد.

در شکل 8 تغییرات بیشینه دمای گاز در مجاورت دیواره بر حسب ثابت فنر به کار رفته در شبیه‌سازی آن به نمایش درآمده است. همانگونه که بیان شد با کاهش ثابت فنر، دمای گاز به دمای هر دو دیوار نزدیک‌تر شده و مطابق این شکل بیشینه اختلاف دمای تجربه شده توسط گاز در کانال

¹ Bulk Region

² Equilibrium Position

³ Amplitude

⁴ Frequency

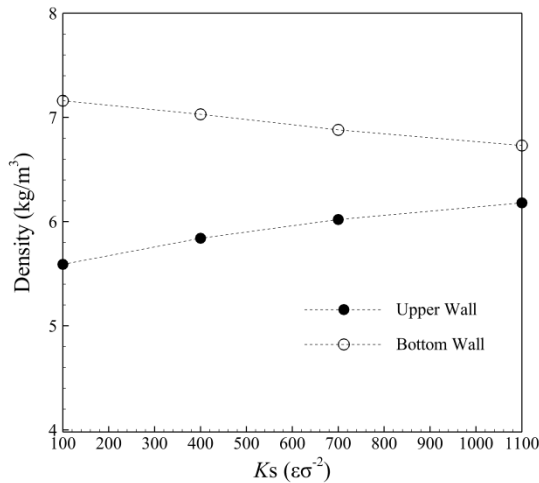


Fig. 10 maximum density of gas near upper and bottom wall

شکل 10 بیشینه چگالی گاز در مجاورت دیوار بالایی و پایینی

روابط 2 و 3 آورده شده است [16]:

$$S_{kl} = \frac{1}{Vol} \left(\sum_i m^i (V_i^l - \bar{V}_k^l) (V_i^l - \bar{V}_l^l) + W_{kl} \right) \quad (2)$$

$$W_{kl} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} (r_k^j - r_l^j) f_l^{i,j} \quad (3)$$

که در رابطه‌ی 2، W_{kl} مولفه غیرجنبشی تنش و \bar{V}_k^i بیانگر سرعت متوسط در باریکه i ام در جهت k است. همچنین در رابطه‌ی 3، $f_l^{i,j}$ مولفه نیرو در جهت k است که توسط ذره j ام به ذره i ام وارد می‌شود.

پس از محاسبه‌ی تک‌تک جملات تنش از رابطه‌ی (3)، در نهایت برای فشار خواهیم داشت:

$$P = \frac{S_{xx} + S_{yy} + S_{zz}}{3} \quad (4)$$

در شکل 11 نمودار توزیع فشار در عرض نانوکanal برای مقادیر مختلف از ثابت فنر آورده شده است. مطابق این شکل فشار کلی سیال در مجاورت دیوار بالایی از فشار سیال در نزدیکی دیوار پایینی کمتر است که دلیل آن افزایش فشار سیال در نزدیکی دیوار سرد (دیوار پایینی) به دلیل چگالی بیشتر سیال در ناحیه مذکور است. علاوه بر آن مشاهده می‌شود که در ناحیه میانی کانال فشار سیال ثابت است و این در حالی است که در نزدیکی دیوار و به دلیل وجود نیروی دیواره مقدار آن در فاصله $\sigma/2$ از دیواره به مقدار بیشینه خود

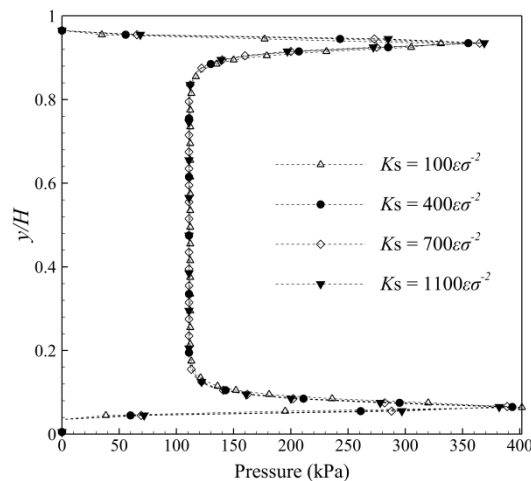


Fig. 11 Distribution of pressure profile for different spring constant

شکل 11 توزیع پروفیل فشار برای ضرایب فنر متفاوت

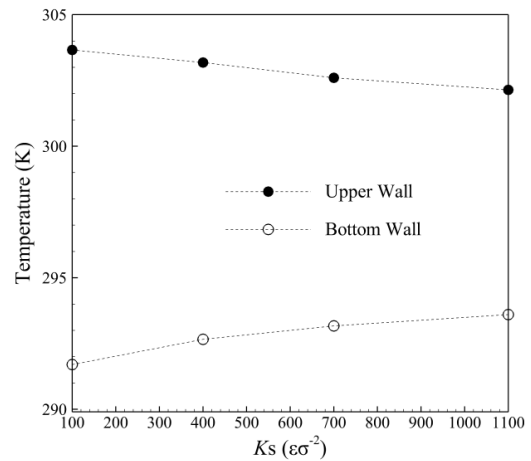


Fig. 8 maximum temperature of gas near upper and bottom wall

شکل 8 بیشینه دمای گاز در مجاورت دیوار بالایی و پایینی

2-4- توزیع چگالی

نمودار توزیع چگالی در عرض کانال برای مقادیر گوناگونی از ثابت فنر در شکل 9 ارائه شده است. ملاحظه می‌شود که برای تمامی مقادیر این ضریب، در فاصله 1nm از هر دیوار پروفیل چگالی از توزیع یکنواخت موجود در ناحیه میانی کانال فاصله گرفته و در فاصله $\sigma/2$ از دیواره، به حداکثر مقدار خود می‌رسد. همچنین مشاهده می‌گردد که به دلیل کاهش سرعت اتم‌ها حین برخورد با دیوار سرد، چگالی گاز در مجاورت دیوار پایینی (دیوار سرد) از چگالی گاز در مجاورت دیوار بالایی (دیوار گرم) بیشتر است. در شکل 10 تغییرات بیشینه چگالی گاز در مجاورت دیواره بر حسب ثابت فنر به کار رفته در شبیه‌سازی آن به نمایش درآمده است. همانگونه که بیان شد با کاهش ثابت فنر و در نتیجه افزایش دامنه و کاهش فرکانس نوسانات، اتم‌ها بیشتر می‌توانند به اتم دیوار نزدیک گردند و در نتیجه چگالی گاز در این ناحیه افزایش می‌یابد. مطابق شکل 10 بیشینه اختلاف چگالی تجربه شده توسط گاز در کانال برای $k_s = 1100\epsilon\sigma^{-2}$ برابر با 0.55 kg/m^3 است که با کاهش ضریب فنر به $k_s = 100\epsilon\sigma^{-2}$ ، این مقدار به 1.57 kg/m^3 می‌رسد.

3-4- توزیع فشار

رابطه ایروینگ-کرک‌وود برای محاسبه‌ی مولفه‌های تانسور تنش مطابق با

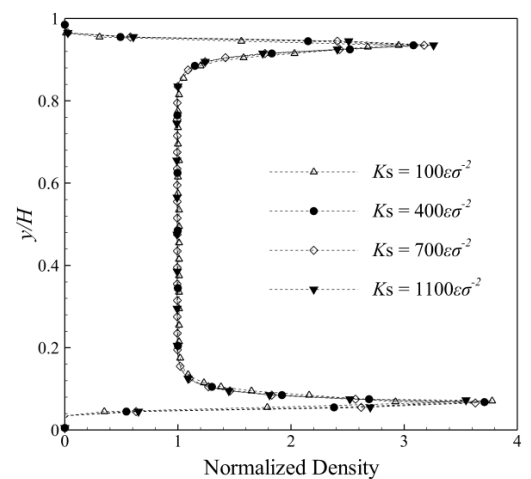


Fig. 9 Distribution of Density profile for different spring constant

شکل 9 توزیع پروفیل چگالی برای ضرایب فنر متفاوت

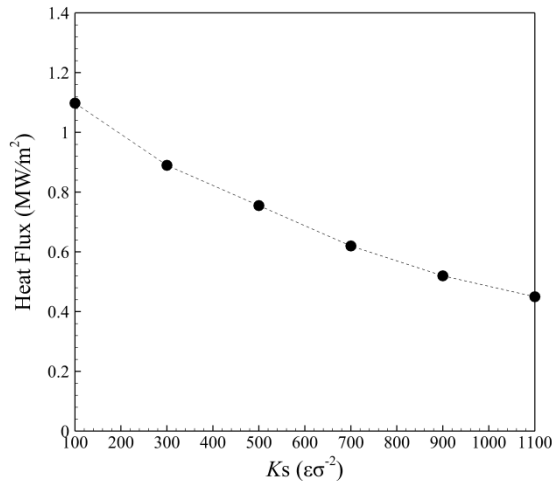


Fig. 13 Variation of heat flux through the gas with variation of the spring constant of the walls

شکل 13 تغییر توزیع شار حرارتی درون گاز با تغییر ثابت فنر دیوار

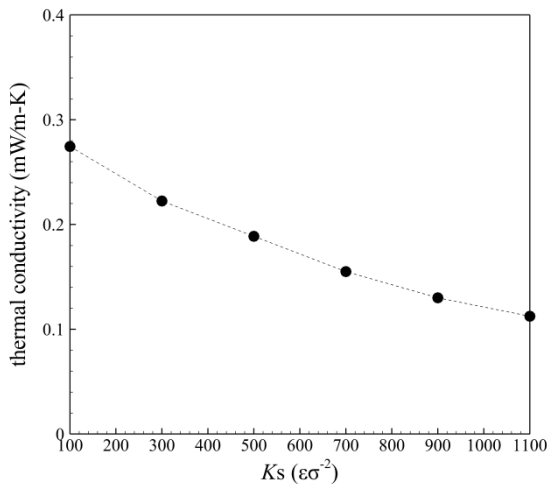


Fig. 14 Variation of thermal conductivity through the gas with variation of the spring constant of the walls

شکل 14 توزیع ضریب هدایت حرارتی گاز با تغییر ثابت فنر دیوار

هدایت حرارتی را از 0.11 mW/m-K به 0.27 mW/m-K افزایش می‌دهد.

ژانگ رابطه‌ی (7) را به منظور بیان تغییرات ضریب هدایت حرارتی بر حسب عدد نودسن ارائه داد [17].

$$K_{\text{eff}} = \frac{K}{\left(1 + \text{Kn} \frac{(2-\alpha_T)(9\gamma-5)}{\alpha_T(\gamma+1)}\right)} \quad (7)$$

که در این رابطه و برای گاز آرگون $\gamma = 1.67$ و ضریب هدایت گرمایی α_T بسته به نوع سطح متغییر خواهد بود. مطابق رابطه‌ی (7) در $k = 10$ مقدار ضریب هدایت حرارتی موثر برای $\alpha_T = 1$ برابر با 0.52 mW/m-K است که این مقدار به 0.06 mW/m-K برای $\alpha_T = 0.02$ تغییر می‌یابد. همانگونه که مشاهده می‌شود، ضریب هدایت حرارتی برای ثابت‌های فنر مختلف در شکل 14 در بازه‌ای بین اعداد ارائه شده توسط ژانگ برای ضرایب هدایت گرمایی مختلف قرار دارد که این امر بیانگر صحت محاسبات انجام شده می‌باشد.

5- جمع‌بندی نتایج

به منظور شبیه‌سازی انتقال حرارت از دیواره به سیال در روش دینامیک مولکولی، مدل دیوار گرمایی تعاملی به طور گسترده توسط پژوهشگران مورد

می‌رسد. در شکل 12 تغییرات بیشینه فشار گاز در مجاورت دیواره بر حسب ثابت فنر به کار رفته در شبیه‌سازی آن به نمایش در آمده و مشاهده می‌شود که با کاهش ثابت فنر اختلاف فشار موجود بین دو ناحیه نزدیک دیواره به مرور افزایش می‌یابد. مطابق این شکل بیشینه اختلاف فشار تجربه شده توسط گاز در کانال برای $k_s = 1100 \varepsilon \sigma^{-2}$ برابر با 13 kPa است که با کاهش ضریب فنر به $k_s = 100 \varepsilon \sigma^{-2}$ ، این مقدار به 71 kPa می‌رسد.

4-4- شار عبوری و ضریب انتقال حرارت هدایتی سیال

اعمال ثابت‌های فنر متفاوت برای شبیه‌سازی دیواره‌ها موجب ایجاد گرادیان و در نتیجه شار گرمایی مختلف بین دو دیوار می‌گردد. بردار شار گرمایی با استفاده از عبارت ایروینگ-کرکود مطابق روابط (5) و (6) محاسبه می‌گردد [16]:

$$J_l = \frac{1}{V_{\text{ol}}} \left(\sum_i V_i^l E_{\text{tot}}^i + \frac{1}{2} \sum_{ij} r_{ij}^{ij} (f^{ij} V^i) \right) \quad (5)$$

$$E_{\text{tot}}^i = \frac{1}{2} m^i \left((V_x^i)^2 + (V_y^i)^2 + (V_z^i)^2 \right) + \phi^i \quad (6)$$

که در آن علامت جمع بر روی تمام اتم‌های گاز آرگون انجام شده است. با در نظر گرفتن l به عنوان محور مختصات کارتزین، در روابط فوق V_i^l بیانگر مولفه سرعت ذره i در جهت l می‌باشد. به علاوه E_{tot}^i و ϕ^i به ترتیب انرژی کل و پتانسیل ذره i می‌باشند و r_{ij}^{ij} بردار فاصله ذره i از j می‌باشد. همچنین f^{ij} بردار نیروی بین ذره‌ای اعمالی بر ذره i از ذره j بوده و V^i بردار سرعت ذره i می‌باشد. مولفه‌ی عمودی شار گرمایی در راستای عمود بر دیواره‌ها (J_y)، در شکل 13 به نمایش در آمده است. همچنین گرادیان دمای بوجود آمده در سیال را می‌توان از روی پروفیل دمای ارائه شده در شکل 12 برای اختلاف دماهای متفاوت محاسبه نمود. با در نظر گرفتن شار گرمایی در جهت عمود بر دیواره و گرادیان دمای بوجود آمده در عرض کانال، ضریب انتقال حرارت هدایتی سیال از رابطه فوریه محاسبه شده و در شکل 14 به نمایش در آمده است. همانگونه که ملاحظه می‌شود، ضریب انتقال حرارت هدایتی گاز آرگون با کاهش ثابت فنر اعمالی به دیوار افزایش می‌یابد. کاهش ضریب فنر به کار رفته در شبیه‌سازی دیوار با افزایش دامنه نوسانات اتم‌های دیوار، امکان حضور اتم گاز در ناحیه‌ای نزدیکتر به دیوار را ایجاد می‌کند و در نتیجه قابلیت انتقال حرارت گاز افزایش می‌یابد. همانطور که مشاهده می‌شود، کاهش مقدار ثابت فنر از $k_s = 1100 \varepsilon \sigma^{-2}$ به $k_s = 100 \varepsilon \sigma^{-2}$ ، ضریب

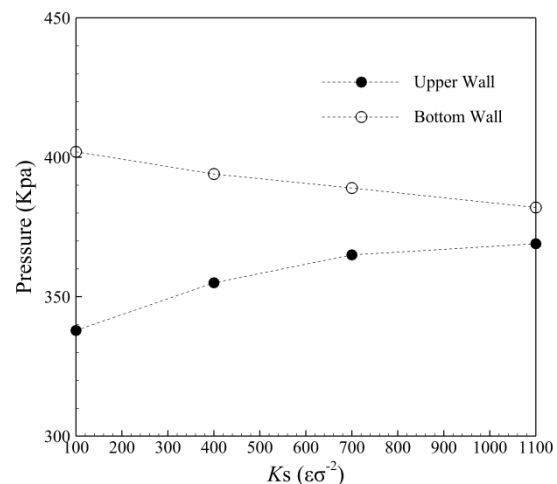


Fig. 12 maximum pressure of gas near upper and bottom wall

شکل 12 بیشینه فشار گاز در مجاورت دیوار بالایی و پایینی

ΔT	اختلاف دمای دو دیوار (K)	استفاده قرار می‌گیرد. با توجه به استفاده از فنر برای اتصال اتم‌های دیوار در
2D	حل دوبعدی	این روش می‌بایست ضریب فنر معادل با ماده‌ی مورد نظر در ساخت دیوار در
3D	حل سه‌بعدی	شبیه‌سازی‌ها در نظر گرفته شود. در این مقاله با تغییر ضریب فنر به کار رفته
	علائم یونانی	در شبیه‌سازی دیوار در بازه‌ی وسیعی از مقادیر مورد استفاده در ساخت
α	ضریب تطابق	دیوارها در میکرو/نانوکanalها، اثر تغییر پارامتر مذکور را در شرایطی که
γ	ضریب گرمایی	نیروی دیواره فضای قابل توجهی از نانوکanal را اشغال می‌نماید مورد بررسی
ε	عمق چاه پتانسیل (J/K)	قرار گرفته است. با کاهش ضریب فنر دیواره، دامنه ارتعاش اتم‌های دیوار
λ	فاصله پویش آزاد مولکولی (nm)	افزایش یافته بنابراین امکان نزدیکتر شدن اتم گاز به اتم دیواره وجود داشته و
ρ	چگالی (kgm^{-3})	این امر انتقال حرارت بین سیال و دیوار را افزایش می‌دهد. با افزایش ثابت
σ	قطر مولکول (nm)	فنر و کاهش دامنه ارتعاش اتم‌های دیوار، فاصله نفوذ اتم گاز به نزدیکی
ϕ	تابع پتانسیل	دیواره کاهش یافته و این امر انتقال حرارت را به شدت کاهش می‌دهد. در
	زیرنویس‌ها	واقع کاهش مقدار ثابت فنر از $k_s = 1100\varepsilon\sigma^{-2}$ به $k_s = 100\varepsilon\sigma^{-2}$ علاوه بر
Ar	آرگون	افزایش شار عبوری از سیال از 0.450 MW/m^2 به 1.045 MW/m^2 . ضریب
Ar – Ar	آرگون-آرگون	هدایت حرارتی میانگین گاز در عرض نانوکanal را نیز از $0.11 \text{ mW/m} - \text{K}$
k	جهت محور مختصات	به $0.27 \text{ mW/m} - \text{K}$ افزایش می‌دهد. بررسی پروفیل توزیع دما در عرض
l	جهت محور مختصات	نانوکanal نشان می‌دهد که افزایش انتقال حرارت مذکور، موجب نزدیک‌تر
T	گرمایی	شدن دمای گاز به دمای دیوار شده و در واقع پرش دمایی موجود بر روی مرز
Tot	کل (مجموع انرژی جنبشی و پتانسیل)	کاهش می‌یابد. با نزدیکتر شدن دمای گاز به دمای دیوار، چگالی گاز در
Wall	دیوار	مجاورت دیوار سرد افزایش و در مجاورت دیوار گرم کاهش می‌یابد. در واقع
Wall – Ar	دیوار-آرگون	بیشینه اختلاف چگالی تجربه شده توسط گاز در $k_s = 1100\varepsilon\sigma^{-2}$ برابر با
X	جهت محور مختصات	0.55 kg/m^3 است که با کاهش ضریب فنر به $k_s = 100\varepsilon\sigma^{-2}$ این مقدار به
Y	جهت محور مختصات	1.57 kg/m^3 افزایش می‌یابد. بررسی نتایج نشان می‌دهد که برای تمامی
Z	جهت محور مختصات	ثابت‌های فنر به کار رفته در شبیه‌سازی و مطابق انتظار، توزیع پروفیل فشار
	بالانویس‌ها	در عرض نانوکanal رفتاری مشابه با توزیع پروفیل چگالی از خود نشان می‌دهد
i	شمارنده ذره	و در آن بیشینه اختلاف فشار تجربه شده توسط گاز بین دیوار سرد و گرم در
j	شمارنده ذره	$k_s = 100\varepsilon\sigma^{-2}$ و معادل با 71 kPa می‌باشد.
i, j	وارد شده بر ذره i از طرف ذره j	

6- فهرست علائم

E	انرژی (J)
f	نیروی بین مولکولی (N)
F_s	فمتو ثانیه
H	ارتفاع کانال (nm)
J	بردار شار گرمایی (MW/m^2)
K	ضریب انتقال حرارت هدایتی ($\text{mW/m} - \text{K}$)
k_b	ثابت بولتزمن (J/K)
Kn	عدد نودسن
K_s	ثابت فنر (N/m)
m	جرم (kg)
r_c	شعاع قطع (nm)
r_{ij}	فاصله اتم‌ها از یکدیگر (nm)
S	تنش (N/m^2)
T	دما (K)
V	سرعت (m/Sec)
\bar{V}	سرعت متوسط (m/Sec)
W	مولفه غیرجنبشی تنش (N/m^2)

7- مراجع

- [1] S. Colin, Rarefaction and compressibility effects on steady and transient gas flows in microchannels, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 1, No. 3, pp. 268–279, 2005.
- [2] M. Gad-el-hak, The fluid mechanics of microdevices — the freeman scholar lecture, *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 121, No. 1, pp. 5–33, 1999.
- [3] G. Karniadakis, A. Beskok, A. Narayan, *Microflows and Nanoflows*, pp. 1-41, New York: Springer-Verlag, 2005.
- [4] R. W. Barber, D. R. Emerson, challenges in modeling gas-phase flow in microchannels: from slip to transition, *Heat Transfer Engineering*, Vol. 27, No. 4, pp. 3–12, 2006.
- [5] G. A. Bird, Recent advances and current challenges for DSMC, *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 35, No. 1–2, pp. 1–14, 1998.
- [6] M. Darbandi, E. Roohi, DSMC simulation of subsonic flow through nanochannels and micro/nano backward-facing steps, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Vol. 38, No. 10, pp. 1443–1448, 2011.
- [7] Y. Bakhshan, A. Shadloo Jahromi, Molecular dynamic simulation of surface specific effects on the nanoscale fluid flow, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 5, pp. 176-184, 2015. (in Persian)
- [8] M. Barisik, B. Kim, A. Beskok, Smart wall model for molecular dynamics simulations of nanoscale gas flows, *Communications in Computational Physics*, Vol. 7, No. 5, pp. 977–993, 2010.
- [9] M. Barisik, A. Beskok, Equilibrium molecular dynamics studies on nanoscale-confined fluids, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 11, No. 3, pp. 269–282, 2011.

- [14] B. H. Kim, A. Beskok, T. Cagin, Thermal interactions in nanoscale fluid flow: Molecular dynamics simulations with solid-liquid interfaces, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 5, No. 4, pp. 551–559, 2008.
- [15] N. Asproulis, D. Drikakis, Boundary slip dependency on surface stiffness, *Physical Review E*, Vol. 81, No. 6, pp. 1–5, 2010.
- [16] J. H. Irving, J. G. Kirkwood, The statistical mechanical theory of transport processes. iv. the equations of hydrodynamics, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 18, No. 6, pp. 817–829, 1950.
- [17] G. Zhang, *Nano/microscale Heat Transfer*, Vol. 1, pp. 130-131, New York: McGraw-Hill, 2007.
- [10] M. Barisik, A. Beskok, Molecular dynamics simulations of shear-driven gas flows in nano-channels, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 11, No. 5, pp. 611–622, 2011.
- [11] M. Barisik, A. Beskok, Scale effects in gas nano flows, *Physics of Fluids*, Vol. 26, No. 5, pp. 52003, 2014.
- [12] M. Barisik, A. Beskok, Law of the nano-wall in nano-channel gas flows, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 20, No. 3, pp. 1–9, 2016.
- [13] Gh. Heidarinejad, R. Rabani, E. Shirani, The effect of wall force field on temperature distribution in nanochannel containing Lennard-Jones fluid by molecular dynamic simulation, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 6, pp. 23-31, 2017. (in Persian)