مجله مهندسی مکانیک مدرس، دی 1394، دوره 15، شماره 10، ص‌ص 320-328

ماهنامه علمی پژوهشی

مهندسی مکانیک مدرس

mme.modares.ac.ir

تحلیل مقاومت جریان آب در نانوکانال‌ها با استفاده از شبیه‌سازی غیر تعادلی دینامیک مولکولی

یونس بخشان[1*]، علیرضا شادلو جهرمی[2]

1- دانشیار گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه هرمزگان، بندرعباس

2- دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه هرمزگان، بندرعباس

* بندرعباس، صندوق پستی 3995، bakhshan@hormozgan.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 27 تیر 1394

پذیرش: 10 شهریور 1394

ارائه در سایت: 31 شهریور 1394

کلید واژگان:

دینامیک مولکولی

نانوکانال

مولکول آب

اصطکاک

چکیده

در این مقاله، از شبیه‌سازی غیر تعادلی دینامیک مولکولی جهت مطالعه تأثیرات خواص سطح و دمای سیستم بر رفتار هیدرودینامیکی و انتقال حرارتی مولکول‌های آب در نانو کانال استفاده شده است. در این مطالعه که بر اساس شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است از پتانسیل الکتریکی و پتانسیل لنارد- جونز برای مدل کردن برهم‌کنش‌های بین ذرات استفاده شده است. نیروهای خارجی به مرکز جرم هر یک از مولکول‌های آب در جهت محور xاعمال شده‌اند تا جریان برقرار شود و سپس رفتار مولکول‌های آب تحلیل شده است. برای ساخت مدل دیواره، از دو صفحه جامد سیلیسیم استفاده شده است و برای ثابت نگه‌داشتن دمای سیستم از ترموستات نوز- هوور استفاده شده است. شدت برهم‌کنش (ε_{Si-W}) بین اتم‌های دیواره و اتم اکسیژن آب، جهت نشان دادن میزان مختلف خیس شوندگی سطح تنظیم شده است و مقادیر بیشتر (ε_{Si-W}) باعث ایجاد سطحی آب دوست‌تر می‌شود. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که دمای سیستم و شدت برهم‌کنش ε_{Si-W} در تعیین مشخصات نانو کانال‌ها و مقاومت جریان آب محبوس شده مهم است. دراگ مقاومتی در سطح سیال و دیواره با افزایش میزان خیس شوندگی دیواره (ε_{Si-W})، افزایش خواهد یافت. همچنین اتلاف حرارتی سیستم با افزایش دراگ مقاومتی در سطح مشترک سیال و دیواره، افزایش می‌یابد و درنهایت شار حرارتی سیستم کاهش خواهد یافت.

Flow Resistance Analysis of Water flow in the nanochannels by using Non-equilibrium Molecular Dynamics Simulation

Younes Bakhshan*, Alireza Shadloo Jahromi

Department of Mechanical Engineering, Hormozgan University, Bandar Abbas, iran
* P.O.B. 3995 Bandar Abbas, bakhshan@hormozgan.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 18 July 2015
Accepted 01 September 2015
Available Online 22 September 2015

Keywords:
Molecular Dynamics
Nano-Channel
Water Molecule
Friction
Non-Equilibrium

ABSTRACT

In this paper, non-equilibrium molecular dynamic simulation has been employed to study the effect of wall interfacial properties and temperature of system on the hydrodynamics and heat transfer of water molecules in a nanochannel. The charges and Lennard-Jones potential are used to model the interactions between particles. The external forces are applied to the mass center of every water molecule in the x direction to create its flow and the thermal and hydrodynamics behavior of the water molecules was then analyzed. To construct the wall pore model, two silicon solid surfaces were used and the temperature of system was controlled by utilizing Nose-Hoover thermostat. The interaction strength (ε_{Si-W}) between wall atoms and water's oxygen atoms were adjusted to indicate different surface wettability or wall–fluid interaction. The higher value of (ε_{Si-W}) causes the higher hydrophilic wall interface. The simulation results showed that the interaction strength (ε_{Si-W}) and temperature of system are important in determining the nanorheology of the nanochannel and flow resistance of the confined water. The drag resistance at the solid–fluid interface will increase with increasing the hydrophilicity of walls (ε_{Si-W}). Also, the heat dissipation of system will increase with increasing the drag resistance at the solid–fluid interface and as a result, the heat flux of system will decrease.

1- مقدمه

در دهه‌های گذشته، رفتار جریان سیال در سیستم‌های نانو الکترو- مکانیکی توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است. طراحی نانوکانال‌ها[1] ازجمله ملزومات سیستم_های نانو الکترو-مکانیکی هستند که بیشتر برای خنک‌سازی این سیستم‌ها استفاده می‌شوند. با پیشرفت دستاوردهای مهندسی در زمینه‌های گوناگون، همواره مهندسان با چالش‌های جدیدی روبرو شده‌اند و به‌ناچار به دنبال روش‌های نوین برای برطرف کردن این مشکلات پرداخته‌اند. یکی از این موارد یافتن راهی برای مقابله با گرمای تولیدی در قطعات مختلف است. پیشرفت سریع علم در سال‌های اخیر باعث شده است که سرعت عملکرد

1- Nanochannels

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

Please cite this article using:

Y. Bakhshan, A.R. Shadloo Jahromi, Flow Resistance Analysis of Water flow in the nanochannels by using Non-equilibrium Molecular Dynamics Simulation, *Modares Mechanical Engineering,* Vol. 15, No. 10, pp. 320-328, 2015 (In Persian)

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]

[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.10.24.8]

دستگاه‌های مختلف به‌خصوص درزمینه‌ی الکترونیک و کامپیوتر به‌شدت افزایش یابد. این افزایش سرعت عملکرد، در مرحله‌ی نخست نیازمند مصرف انرژی بالاتر است. نتیجه این امر تلفات بالای انرژی را که معمولاً به‌صورت گرما در این قطعات ظاهر می‌شود، به دنبال دارد. از طرف دیگر این قطعات الکترونیکی و کامپیوتری به‌مرور زمان برای استفاده بهتر و راحت‌تر کاربران از آن‌ها، کوچک و کوچک‌تر شده‌اند. این در حالی است که با افزایش توان و درنتیجه سرعت این قطعات الکترونیکی کوچک، مقدار انرژی مصرفی توسط آن‌ها افزایش یافته است. بنابراین ضمن ریز شدن این قطعات مقدار گرمای تولیدشده توسط آن‌ها افزایش یافته است. روش‌های متعددی در سال‌های اخیر برای خنک کاری ارائه شده است که برخی از این موارد دیگر کاربرد چندانی ندارند. به‌عنوان مثال برای خنک کاری پردازشگرهای الکترونیکی در ابتدا از روش‌های مانند افزایش سطح انتقال حرارت با استفاده از پره‌ها استفاده می‌کردند که این روش با توجه به افزایش شار بالای تلفات انرژی و البته ریزتر شدن تراشه‌های الکترونیکی، دیگر در پردازشگرهای امروزی کاربردی ندارد. یکی دیگر از روش‌ها، استفاده از جابجایی اجباری توسط جریان هوای ایجادشده توسط فن‌ها است. که این روش نیز با توجه به تحقیقات انجام شده به بیشینه‌ی قابلیت خود رسیده است و با توجه به نیازهای جدید، دیگر پاسخگوی پردازشگرهای جدید نیست. ازجمله روش‌های که می‌تواند جایگزین این روش قدیمی شود استفاده از میکرو یا نانو کانال‌ها است. امید است که پژوهش‌هایی از این قبیل توسعه دهنده‌ی راهی جهت رفع این نیاز مهم باشد.

اگرچه مدل محیط پیوسته به‌صورت گسترده برای توصیف جریان بسیار مفید و پرکاربرد است، این روش قابلیت بررسی و تجزیه و تحلیل کلیه موارد و فاکتورهای دخیل در مقیاس مولکولی جریان را ندارد. به‌عنوان مثال این روش تأثیرات چرخش و تغییر شکل مولکول‌ها، اثرات الکتروکینتیکی که در شرایط مرزی دیواره-سیال دیده می‌شود را نادیده می‌گیرد. این عوامل در صورت بررسی پدیده‌ها در مقیاس مولکولی باعث عدم هماهنگی بین نتایج حاصل از نتایج آزمایشگاهی و نتایج حاصل از مدل محیط‌های پیوسته می‌شود. داده‌های آزمایشگاهی [1-6] به‌طور شفاف نشان می‌دهد که رفتار جریان سیال در نانو کانال‌ها کاملاً با جریان سیال در ابعاد ماکرو متفاوت است و معادلات کلاسیک ناویه- استوکس قادر به توصیف جریان و پیش‌بینی انواع مختلف پدیده‌های جریان نیست. در جریان در ابعاد نانو ساختار مولکول‌های سیال و تقابل و برهم‌کنش[1] بین مولکول‌های سیال و دیواره نقش بسیار اساسی را ایفا می‌کند. بنابراین به‌کارگیری روش‌هایی عددی که مبتنی بر روش مولکولی هستند برای تحلیل انواع مسائل مهندسی در این ابعاد بسیار مناسب و دقیق است. از این بین روش دینامیک مولکولی، روش کارآمد و مناسبی برای تحلیل رفتار فیزیکی جریان در این مقیاس است [7-9]. شبیه سازی دینامیک مولکولی ازجمله روش‌های لاگرانژی است که در برخی مسائل نسبت به روش‌های دیگر برتری دارد. پیشرفت‌های اخیر که در حل جریان سیال در ابعاد نانو و میکرو به روش دینامیک مولکولی به‌دست آمده است، در مرجع [10،11] آمده است.

روش‌های عددی، روش‌هایی هستند که مسائل را از محیط پیوسته به محیط گسسته منتقل می‌کنند .کارایی بالای روش‌های عددی در کنار هزینه بسیار پایین استفاده از آن‌ها، به رشد روزافزون و نفوذ غیرقابل انکار این روش‌ها در علوم مختلف امروزی منجر شده است .مزیت دیگر آن کاهش زمان انجام محاسبات نسبت به انجام آزمایش درون آزمایشگاه است. البته دراین‌بین نباید از نقش پررنگ رایانه‌ها نیز غافل شد. امروزه با رشد چشمگیر رایانه‌ها، محققان از طریق شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای امکان آن را یافته‌اند که مسائل مختلفی را با دقت بیشتری موردمطالعه قرار دهند. مسائلی که ممکن است با روش‌های دیگر قابل حل نباشند و یا فقط بتوان آن‌ها را با روش‌های تقریبی حل کرد.

پژوهش‌های گذشته بیشتر بر روی مولکول‌های ساده و تک اتمی آرگون بوده است. اغلب این پژوهش‌ها جهت تخمین طول لغزش و سرعت لغزش اتم‌های آرگون بر روی مرز دیواره یا بررسی تأثیرات زبری یا فرورفتگی بر روی پارامتر لغزش مولکول‌ها بوده است.

به‌عنوان مثال، یانگ [12]، کمالی و خوارزمی [13]، و ناگایاما و چنگ [14] به مطالعه تأثیرات زبری‌های سطح و برهم‌کنش بین مولکول‌های سیال و دیواره بر جریان سیال پرداخته‌اند. آن‌ها نشان داده‌اند که میزان لغزش ذرات سیال با حضور زبری‌های دیواره جامد کاهش می‌یابد و این موضوع برای هردو نوع دیواره آب‌دوست و غیر آب‌دوست صادق است.

مدل‌های ارائه‌شده جهت اندازه‌گیری پارامتر لغزش ذرات توسط ژانگ و همکاران خلاصه و جمع‌آوری شده‌است [15].

امین فر و رزم‌آرا [16]، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و اعمال توابع پتانسیل مختلف لنارد- جونز، جریان پوآزی آرگون مایع را در یک نانوکانال باریک شبیه‌سازی کرده‌اند. آن‌ها از پتانسیل لنارد- جونز 6-12، لنارد- جونز 6-9 و لنارد- جونز هموار برای به دست آوردن پروفیل‌های چگالی، سرعت و انرژی سیستم استفاده کرده‌اند.

بینگ کو و همکاران [17] به انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای پی بردن به تأثیرات زبری سطح بر روی جریان گاز آرگون در میکرو کانال با جنس پلاتینیم پرداختند. در کار آن‌ها هندسه‌های زبری سطح، به ترتیب برای حالت مثلثی، مستطیلی، سینوسی و موج مثلثی مدل‌سازی شده است. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که شرط مرزی لغزشی سرعت، شامل لغزش، عدم لغزش و لغزش منفی نه‌تنها به عدد نادسن بلکه به زبری سطح نیز بستگی دارد.

رحمتی‌پور و عظیمیان [18] به‌منظور بررسی تغییرات سرعت سیال و لغزش سیال در جریان کوئت پایدار تأثیر عوامل مختلفی چون سرعت دیواره، ارتفاع کانال، چگالی دیواره، برهم-کنش بین ذرات سیال -دیوار و همچنین تغییر هندسه زبری سطح ازجمله زبری مستطیلی و مثلثی در ابعاد و اندازه‌های مختلف برای گاز آرگون بررسی کرده‌اند.

رضایی و همکاران [19] جریان الکترواسموتیک در یک محلول الکترولیت و در مجاورت دو دیواره باردار موازی را شبیه‌سازی کرده‌اند. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهند که جریان الکترواسموتیک به‌صورت یک جریان یکنواخت با شرط عدم لغزش بر روی دیواره‌ها عمل می‌کند، یعنی سرعت جریان از مقدار صفر بر روی دو دیواره شروع شده و در ناحیه دوگانه الکتریکی با شیب نسبتاً زیادی افزایش می‌یابد تا به یک مقدار ثابت در توده سیال برسد.

بخشان و شادلو جهرمی [20] به بررسی تأثیرات همزمان زبری‌ها و فرورفتگی‌های دیواره بر روی تنش برشی دیواره و هیدرودینامیک جریان و برسی تأثیرات طول و ارتفاع این زبری‌ها به‌طور دقیق و جداگانه بر جریان سیال و تنش برشی دیواره پرداختند.

در این میان مطالعات نیز بر روی مولکول‌های آب انجام شده است. به عنوان مثال کوکابا و والنتا [21] به بررسی تأثیرات جنس دیواره بر روی جریان مولکول‌های آب در نانوکانال‌ها پرداخته‌اند. بدین منظور دیواره‌های نانوکانال را از جنس کوارتز[2] و مس[3] در نظر گرفته_اند. بدین منظور برای حالتی که دیواره از جنس کوارتز است یک نیروی الکترواستاتیک را بین

1- Interaction

2- Quartz
3- Cooper

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.10.24.8]

مولکول‌های دیواره و مولکول‌های آب اعمال کردند. نتایج شبیه‌سازی آن‌ها نشان داد که به خاطر حضور نیروی الکترواستاتیک بین مولکول‌های دیواره و سیال، مولکول‌های آب تمایل بیشتری به جذب شدن به دیواره دارند. در حالی که برای دیواره از جنس مس این تمایل جذب شدن به خاطر عدم حضور نیروی الکترواستاتیک کمتر دیده می‌شود.

کالرا و همکاران [22] خاصیت نفوذ و حلول مولکول‌های آب را در تماس با غشا نانولوله‌های کربنی مطالعه کرده‌اند. آن‌ها برای ایجاد جریان از گرادیان غلظت استفاده کردند.

آلن و همکاران مطالعاتی بر روی چگالی آب، یون‌ها و گرایش دوقطبی مولکول‌های آب در حضور منفذهای استوانه‌ای، انجام داده‌اند. برای این کار آن‌ها با تغییر خواص سطح و اندازه منفذها، تأثیرات سطوح آب‌دوست و غیر آب‌دوست را در حضور زبری استوانه‌ای شکل، با یکدیگر مقایسه کرده‌اند [23].

هارنیگ و همکاران به تخمین ساختار و دینامیک آب محبوس شده در منفذهای استوانه‌ای شکل پرداخته‌اند. در این مطالعه آن‌ها از حضور نقاط باردار جهت مدل کردن گروه‌های عامل قطبی بر روی صفحه منفذ دار استفاده کردند. نتایج آن‌ها نشان داد که انتقال آب در منفذهای نانو قطبی سریع‌تر اتفاق می‌افتد [24].

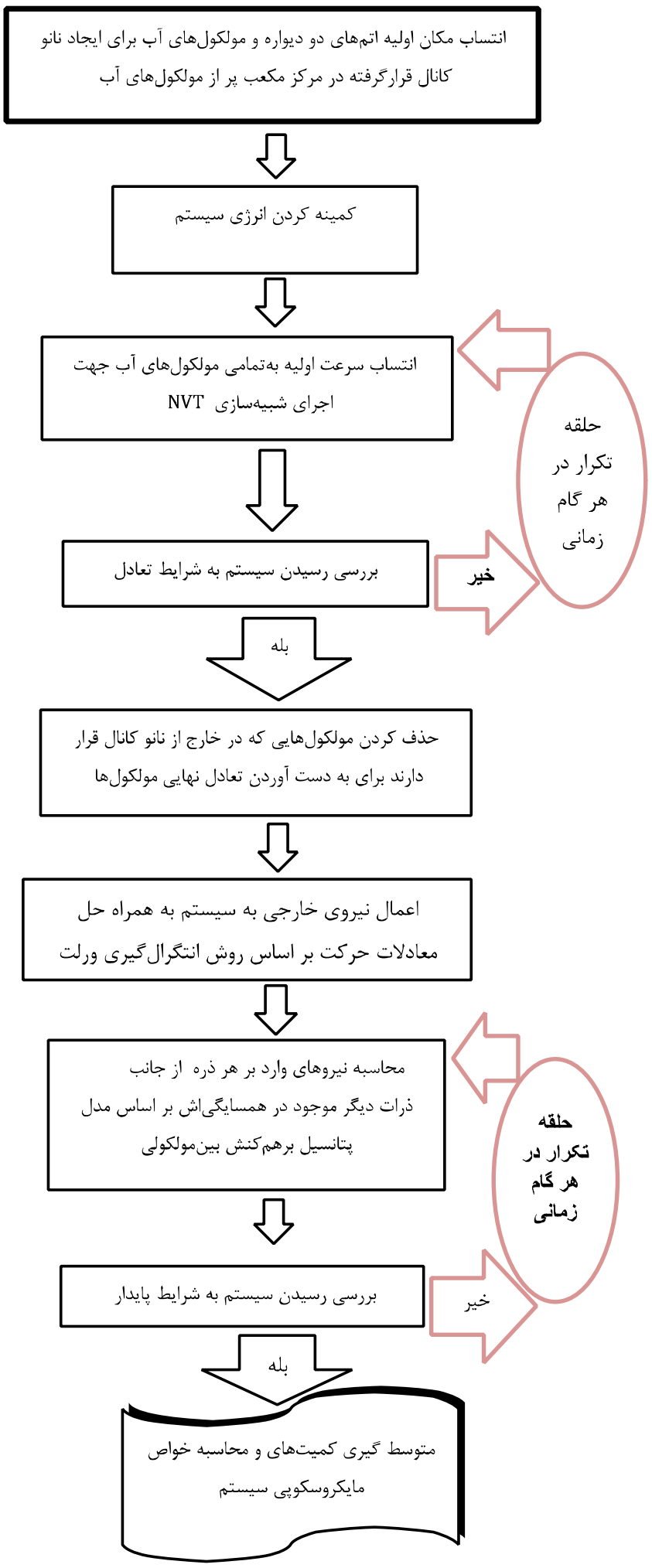
در این مطالعه با بهره‌گیری از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، به مطالعه مولکول‌های آب که در نانو کانالی با دیواره‌هایی از جنس سیلیسیم قرار داده شده‌اند پرداخته‌ایم. مطالعه تأثیرات برهم‌کنش سیال و دیواره بر پارامترهای هیدرودینامیکی و حرارتی مولکول‌های آب و بررسی تأثیرات برهم‌کنش مولکول‌های آب با یکدیگر ازجمله اهداف مقاله اخیر است. همچنین بررسی تأثیرات تغییرات دمای سیستم بر هیدرودینامیک جریان سیال ازجمله اهداف دیگر این پژوهش است. همان‌طور که گفته شد بیشتر مطالعات قبلی بر روی مولکول‌های تک اتمی آرگون جهت شناسایی پارامترهای هیدرودینامیکی جریان صورت گرفته‌است. درحالی که مطالعه حاضر، بر روی مولکول‌های سه اتمی آب جهت تحلیل پارامترهای هیدرودینامیکی و حرارتی صورت گرفته است که این موضوع مؤید نوآوری در این پژوهش است.

2- روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، یک ابزار قدرتمند در بررسی جریان سیالات درون نانو کانال‌ها است. مبنای اصلی این روش، حل معادلات نیوتن با در نظر گرفتن پتانسیل بر هم‌کنش بین مولکول‌ها و عوامی مؤثر خارجی است. استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، در مقایسه با دیگر روش‌های مدل‌سازی در مقیاس نانو، یک روش مؤثر و دقیق در مطالعه رفتارهای جریانی و انتقال حرارتی نانو سیالات درون میکرو و نانو کانال‌ها است. در ادامه با نواع پتانسیل‌های مولکول‌های آب و روش حل آشنا خواهیم شد.

بحث تعداد مولکول‌های آب در نانو کانال موردنظر، موضوع بسیار مهمی است که در نتایج نهایی می‌تواند تأثیرگذار باشد. برای به دست آوردن تعداد مولکول‌های آب در شرایط محیطی موردعلاقه ما، مکعبی به ابعاد (9nm × 8nm × 8nm) متشکل از تعداد زیادی مولکول‌های آب (تعداد 15000 مولکول آب) را به‌وجود آورده‌ایم و سپس نانو کانال را در مرکز این مکعب قرار داده‌ایم. با حل مسئله در شرایط تعادلی، و حرکت مولکول‌ها در این فضا، تعداد مولکول‌های آب محبوس شده در کانال، متناسب با میزان برهم‌کنش دیواره- سیال به دست خواهد آمد. بنابراین می‌توانیم با حذف کردن مولکول-های آب در خارج از نانو کانال نه‌تنها تعداد مولکول‌های آب را در نانو کانال به دست آوریم، بلکه موقعیت اولیه مولکول‌ها را قبل از شرایط غیر تعادلی به دست آوریم. بنابراین موقعیت نهایی مولکول‌ها بعد از حل تعادلی، به‌عنوان موقعیت اولیه مولکول‌ها برای حل غیر تعادلی دینامیک مولکولی[1] استفاده خواهد شد. در این مقاله برهم‌کنش بین مولکول‌های آب و دیواره به ترتیب 1 Kcal/mol، 2 Kcal/mol[2] و 3.5 Kcal/mol انتخاب شده است. برای هر کدام از این حالت‌ها مسئله تکرار شده‌است و تعداد مولکول‌های آب برای این حالت‌ها به‌ترتیب 935، 954 و 987 به دست آمده است.

در شکل 1 روند شبیه سازی دینامیک مولکولی نشان داده شده است:



شکل 1 روند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

1- Non Equilibrium Molecular Dynamics
2- Case- 2

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.10.24.8]

مطابق این شکل، بعد از انجام قسمت اول شبیه‌سازی یعنی به دست آمدن تعداد و موقعیت اولیه مولکول‌های آب، مکان و سرعت اولیه ذرات تعیین می‌شود. بعد از محاسبه نیروهای بین‌مولکولی برحسب تابع پتانسیل و اعمال شرایط شبیه‌سازی، معادلات حرکت انتگرال‌گیری شده و مکان و سرعت جدید ذرات در هرلحظه ثبت می‌شود. این حلقه مدام تکرار می‌شود تا زمانی که سیستم به حالت پایدار دست یابد و درنهایت مقادیر متوسط کمیت‌های ترمودینامیکی و خروجی‌های شبیه‌سازی بررسی می‌شود. سیستم شبیه‌سازی در حجم ثابت و دمای ثابت نگه‌داشته شده است. انرژی سیستم کمینه[1] شده و در حالت تعادل دینامیکی به مدت5ns با گام زمانی 1fs سیستم شبیه‌سازی شده است. شرایط مرزی تناوبی[2] همان‌طور که در مرجع [25] توصیف شده است، در جهت جریان اعمال می‌شود یعنی هر ذره که به سیستم وارد می‌شود، ذره‌ای دقیقاً یکسان از سمت دیگر از سیستم خارج می‌شود؛ بنابراین تعداد کل اتم‌ها در یک سیستم تا پایان شبیه‌سازی ثابت می‌ماند که به آن مجموع آماری میکروکانونی می‌گویند.

این شبیه‌سازی توسط کد منبع باز لمپس[3] [26] در محیط لینوکس انجام گرفته است. الگوریتم انتگرال‌گیری و روش خروجی گیری در مسئله مورد بررسی، منطبق با پژوهش قبلی‌ای است که از نویسندگان همین نوشتار منتشر شده است [20].

همان‌طور که گفته شد اعمال پتانسیل‌های بین مولکولی مناسب از جمله موارد اساسی در روش حل دینامیک مولکولی است. در این پژوهش حاضر برای مولکول‌های سیال و دیواره از پتانسیل لنارد- جونز برای محاسبه کردن نیروهای بین مولکولی استفاده شده است. پتانسیل لنارد- جونز در رابطه (1) برای برهم‌کنش بین مولکول‌های آب به صورت زیر تعریف می‌شود [28،27]:

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon_{\mathrm{W}}\left[\left(\frac{\sigma_{\mathrm{W}}}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{\mathrm{W}}}{r_{ij}}\right)^{6}\right] + K_e \sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\frac{q_{i\alpha}q_{j\beta}}{r_{i\alpha,j\beta}} \qquad (1)$$

که اندیس W نشان دهنده مولکول آب و r_{ij} نشان دهنده فاصله بین مولکول‌های iام و jام آب است و ε_{W} و σ_{W} به ترتیب نشان دهنده پارامترهای انرژی و طول مشخصه مولکول‌های آب هستند. $q_{i\alpha}$ و $q_{j\beta}$ بار الکتریکی توزیع شده حول مولکول‌های آب هستند. مقدار بار الکتریکی توزیع شده بر روی اتم اکسیژن $(-q_0)$، منفی و مقدار بار الکتریکی در نظر گرفته شده بر روی اتم هیدروژن $(+q_{\mathrm{H}})$، مثبت در نظر گرفته شده است. K_e ثابت کولمب و مقدار آن برابر با 8.99×10^9 است. پارامترهای α و β نشان دهنده تعداد اتم‌های مولکول آب هستند. از آنجایی که هر مولکول آب از دو اتم هیدروژن و یک اتم اکسیژن تشکیل شده است، بنابراین $\beta = \alpha = 3$ خواهد بود.

برای افزایش کیفیت محاسبات، نیروهای برهم‌کنش بین مولکولی در شعاع قطع $r_c = 2.5\sigma$ صفر می‌شوند شعاع قطع، فاصله‌ای است که در بیشتر از آن، نیروی پتانسیل بین اتم‌ها صفر در نظر گرفته می‌شود.

یکی از مهمترین برهم‌کنش‌های موجود در این شبیه‌سازی که باید به درستی اعمال شود برهمکنش بین مولکول‌های آب و اتم‌های دیواره است. برای مدل کردن این برهم‌کنش بسیار مهم از پتانسیل اصلاح شده لنارد- جونز استفاده شده است که به‌صورت رابطه (2) معرفی می‌شود [28]:

$$U_{si-w} = 4\varepsilon_{\mathrm{si-w}}\sum_{k=1}^{N_{\mathrm{W}}}\sum_{l=1}^{N_{\mathrm{Si}}}\left[\left(\frac{\sigma_{\mathrm{si-W}}}{r_{kl}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{\mathrm{si-W}}}{r_{kl}}\right)^{6}\right] \qquad (2)$$

که در آن Si بیانگر اتم‌های سیلیسیم و W بیانگر مولکول‌های آب هستند. N_{W} و N_{Si} بترتیب نشان دهنده تعداد مولکول‌های آب و تعداد اتم‌های سیلیسیم هستند. $\varepsilon_{\mathrm{si-w}}$ و $\sigma_{\mathrm{si-W}}$ که بیانگر انرژی پیوندی و طول پیوندی سطح مشترک مولکول‌های آب و اتم‌های سیلیسیم هستند از قانون اختلاط لورنتز- برتولت[4] [28] که در روابط (3) و (4) آمده‌اند، محاسبه می‌شوند:

$$\varepsilon_{\mathrm{si}-M} = \sqrt{\varepsilon_{\mathrm{si}}\,\varepsilon_{\mathrm{W}}} \qquad (3)$$

$$\sigma_{\mathrm{si}-M} = \frac{\sigma_{\mathrm{si}} + \sigma_{\mathrm{W}}}{2} \qquad (4)$$

با توجه به اینکه هر مولکول آب شامل دو پیوند O-H است. برای مدل کردن پیوند O-H از رابطه (5) که معرف قانون هوک است استفاده شده است:

$$U_l = \frac{k_b}{2}(l - l_{0\mathrm{H}})^2 \qquad (5)$$

که در آن انرژی با مربع جابجایی از طول پیوند مرجع L_0 تغییر می کند و K_b ثابت نیروی پتانسیل پیوندی است.

با حضور دو پیوند O-H در هر کدام از مولکول‌های آب شاهد به‌وجود آمدن زاویه ای بین این دو پیوند هستیم که برای انحراف زاویه‌ها از مقدار مرجعشان نیز باید با استفاده پتانسیل قانون هوک که در رابطه (6) آمده‌است، توصیف شوند:

$$U_\theta = \frac{k_\theta}{2}(\theta - \theta_0)^2 \qquad (6)$$

که در آن انرژی با مربع جابجایی از مقدار زاویه مرجع θ_0 تغییر می کند و k_θ ثابت نیروی پتانسیل زاویه است.

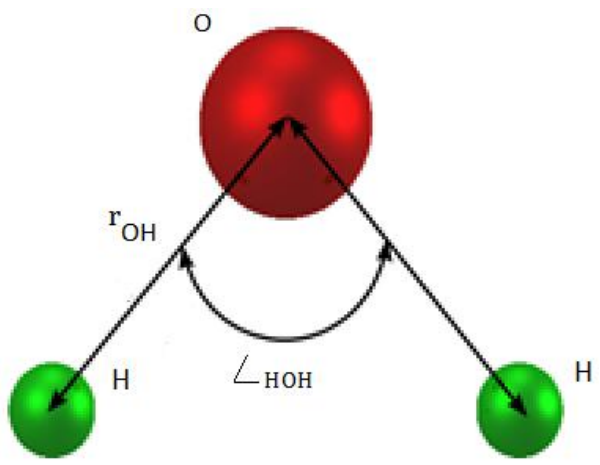
در کار حاضر از مدل SPC/E مولکول‌های آب استفاده کرده‌ایم که شکل شماتیک آن در شکل 2 نمایش داده شده است. مقادیر مختلف پارامترهای انرژی پتانسیل استفاده شده در این شبیه‌سازی، در جدول 1 آماده است [29-27]:

شار حرارتی سیستم از نوسانات انرژی جنبشی، انرژی پتانسیل و تانسور تنش هر یک از ذرات بدست می‌آید. رابطه (7) نحوه بدست آوردن شار حرارتی سیستم مورد نظر ما را نشان می‌دهد.

$$J = \frac{1}{V}\left[\sum_i e_i V_i - \sum_i S_i V_i\right] \qquad (7)$$

جدول 1 مقادیر مختلف پارامترهای انرژی پتانسیل استفاده شده در شبیه‌سازی

پارامتر	واحد	مقدار	پارامتر	واحد	مقدار
ε_{o}	$\frac{\text{K cal}}{\text{mol}}$	0/1533	ε_{H}	$\frac{\text{K cal}}{\text{mol}}$	0
σ_{o}	Å	3/166	σ_{H}	Å	2/058
q_o	e	-0/8476	q_{H}	e	0/4238
k_b	$\frac{\text{K cal}}{\text{mol.Å}^2}$	1000	k_θ	$\frac{\text{K cal}}{\text{mol.Å}^2}$	1000
l_0^{OH}	Å	1	θ_0^{HOH}	deg	109/47
m_{o}	$\frac{\text{gram}}{\text{mol}}$	15/9994	m_{H}	$\frac{\text{gram}}{\text{mol}}$	1/008
$\varepsilon_{\mathrm{si}}$	$\frac{\text{K cal}}{\text{mol}}$	0/23	σ_{si}	$\frac{\text{K cal}}{\text{mol}}$	3/8264

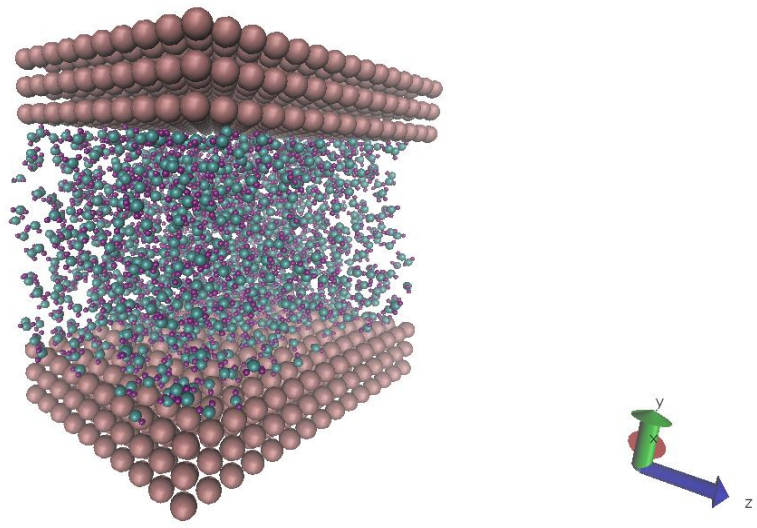


شکل 2 نمایش شماتیکی مولکول آب

1- minimization
2- Periodic Boundary Condition
3- LAMMPS

4- Lorentz–Berthlot

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.10.24.8]



شکل 3 تصویری از جریان مولکول‌های آب در نانوکانال‌ها

در این رابطه e_i مجموع انرژی جنبشی و پتانسیل هر یک از ذرات سیال است و S_i بیانگر تانسور تنش هر یک از ذرات سیال است. V_i ماتریس ضرب شونده 3 × 3 است که عبارات بالا را به صورت برداری نشان می‌دهد. بنابراین شار حرارتی بدست آمده از فرمول بالا به صورت برداری است که دارای 6 مولفه است که 3 مولفه اول آن بیانگر مولفه‌های x، y و z است(J_x,J_y,J_z). از جمله کاربردهای شار حرارتی جهت تخمین ضریب حرارت هدایتی[1] سیال است. رابطه (8) که به فرمول گرین - کوبو[2] معروف است این ارتباط را بیان می‌کند:

$$K = \frac{V}{3K_bT^2}\int_0^{\infty}\langle J(0).J(t)\rangle\, dt \qquad (8)$$

مدل کردن دیواره از جمله مهمترین قسمت‌های مساله حاضر است. علت مهم بودن این موضوع، اهمیت برهم‌کنش بین مولکول‌های سیال و دیواره است که از جمله مهم‌ترین اهداف مقاله حاضر است. ساده ترین مدل دیواره ی اتمی مدل دیواره لتیس[3] ثابت است. در این مدل اتم های دیواره در محل کریستال خود ثابت اند. این بدان معنی است که اتم های دیواره کاملا صلب و ثابت بوده و همواره شکل کریستالی خود را حفظ می کند. همچنین بر هم کنش بین سیال و دیواره از طریق نیروی بین اتمی موجود بین اتم های هر دو ناحیه انجام می‌پذیرد از مزیت‌های این روش این است که با عوض کردن مکان اتم های دیواره می توان به راحتی نیروی برشی بر روی دیواره را مدل کرد. از آنجایی که این مدل باعث می شود انرژی ناخواسته به سیستم تحمیل شود (زیرا اتم های دیواره در جای خو ثابت‌اند) نیاز است که با اعمال ترموستات، گرمای اضافی تولید شده به علت نیروی برشی، از بین برود [30]. بنابراین به جای آنکه اتم‌ها در جای خود ثابت باشند می توان با تخصیص جرم بسیار زیاد به آن‌ها به طور مثال $\text{mass}_{\text{wall}} = 10^{10} \times \text{mass}_{\text{fluid}}$، به طور ضمنی آن‌ها را در جای خود ثابت کرد. در این صورت اتم‌های دیواره اجازه‌ی حرکت طی برهم کنش بین مولکول های سیال و دیواره را می‌یابند و در عین حال همواره شکل جامد دیواره حفظ شده و انرژی کل سیستم نیز پایسته خواهد ماند [13]. بنابراین اتم‌های دیواره در جای خود به طور ضمنی ثابت هستند و در برهم‌کنش بین سیال و دیواره اجازه حرکت دارند. در مدل نوع سوم، اتم-های دیواره به محل بلور کریستال خود توسط یک سری فنرهای هارمونیک متصل می‌شوند. این مدل باعث می‌شود تا اتم‌های دیواره اجازه‌ی ارتعاش داشته باشند تا بدین وسیله درحالی‌که حالت جامد خود را حفظ می‌کنند، حرکت ارتعاشی کریستال جامد نیز مدل کنند [31]. در این پژوهش از مدل دوم برای مدل کردن دیواره استفاده شده است.

معیار تحلیل جریان پیوسته و مولکولی، درون نانو کانال‌ها عدد نادسن[4] است. عدد نادسن به‌صورت نسبت مسافت آزاد میانگین مولکولی به بعد مشخصه سیستم تعریف می‌شود؛ که در مسئله حاضر ابعاد و چگالی عددی (تعداد مولکول‌های آب) طوری انتخاب شده‌اند که تحلیل جریان مولکولی صادق باشد.

شکل 3 تصویری از سیستم شبیه‌سازی شده برای مولکول‌های آب را در نانوکانالی تحت شرایط تعادل دینامیک مولکولی نشان می‌دهد. این تصویر در حالت تعادل و بدون اعمال نیروی خارجی به مولکول‌ها بدست آمده است. مولکول‌های آب بین دو دیواره جامد از جنس سیلیسیم محبوس شده‌اند. در مختصات کارتزین، مولکول‌های آب در جهت محور x و در بین دو دیواره جامد که محور Y بر آن‌ها عمود شده است جریان دارند. جریان مولکول‌های آب بر اثر اعمال نیروی خارجی در جهت مثبت محور x به مرکز جرم هر یک از مولکول‌های آب به‌وجود می‌آید. هر کدام از دیواره‌های بالایی و پایینی که از جنس سیلیسیم هستند دارای سه لایه اتم و 450 اتم هستند. فاصله‌ی بین اولین لایه دیواره $L_y = 3\,nm$ و ابعاد جانبی آن $L_x \times L_z = 52.5\text{ nm} \times 3\text{ nm}$ است.

همان‌طور که گفته شد با استفاده از نیروی خارجی F_{ext} شبیه‌سازی غیر تعادلی را از سر گرفته‌ایم. گرمای تولید شده ناشی از نیروی خارجی $F_{\text{ext}} = 0.1\,\text{Kcal/mol}$ باعث بالا رفتن دمای سیستم می‌شود که برای ثابت نگه‌داشتن دمای سیستم از ترموستات استفاده می‌کنیم. این ترموستات از نوع مقیاس بندی سرعت بوده و در هر مرحله با مقیاس بندی سرعت‌ها و دمای لحظه‌ای که بر اساس تئوری انرژی جنبشی مدل می‌شود، دمای سیستم را ثابت نگه می‌دارد؛ بنابراین می‌توان دمای سیستم را از رابطه‌های (9) و (10) به دست آورد.

$$\frac{3}{2}NK_bT = KE(T) \qquad (9)$$

$$KE(T) = \frac{1}{2}\sum_{1}^{N} m_i {v_i}^2 \qquad (10)$$

3- بحث و نتایج

برای محاسبه کردن رفتار هیدرودینامیکی جریان سیال در حالت پایا از میانگین پروفیل سرعت و میانگین پروفیل چگالی استفاده شده است. دامنه محاسبات به قفسه‌هایی[5] با عرض Δy در امتداد y تقسیم شده اند .سرعت متوسط میانگین در یک y مشخص با رابطه $u_x(y) = m_iu_i/\sum_{i\in y} m_i$ بدست می‌آید؛ که m_i و u_i جرم و سرعت اتم iام در y است و $\sum_{i\in y} m_i$ نشانگر جمع اتم‌های اشغال شده درy است. به طور مشابه میانگین پروفیل چگالی سیال به‌وسیله $\rho(y) = N_{\text{bin}}(y)/V_y$ که $N_{\text{bin}}(y)$ تعداد اتم‌های سیال اشغال شده درقفسه‌ای به حجم V_y است. در این پژوهش $\Delta y = 0.5\text{Å}$ انتخاب شده است [12] و [20].

3-1- پروفیل سرعت

شکل 4 متوسط پروفیل سرعت در امتداد محور yدر حالت‌های مختلف دمایی، را نمایش می‌دهد. پژوهش‌های قبلی نشان می‌دهد که عواملی همچون میزان نیروی خارجی اعمالی در تشکیل صحیح پروفیل‌های سرعت مؤثر هستند [13،12]. شکل 4 نشان می‌دهد که با افزایش دما، پروفیل‌های سرعت رشد قابل ملاحظه‌ای خواهند داشت و ماکزیمم مقدار سرعت در نانو کانال افزایش پیدا می‌کند. این موضوع با توجه به فرمول شماره (10) کاملاً توجیه-پذیر است چراکه افزایش دما باعث بالا رفتن انرژی جنبشی و جنب‌وجوش

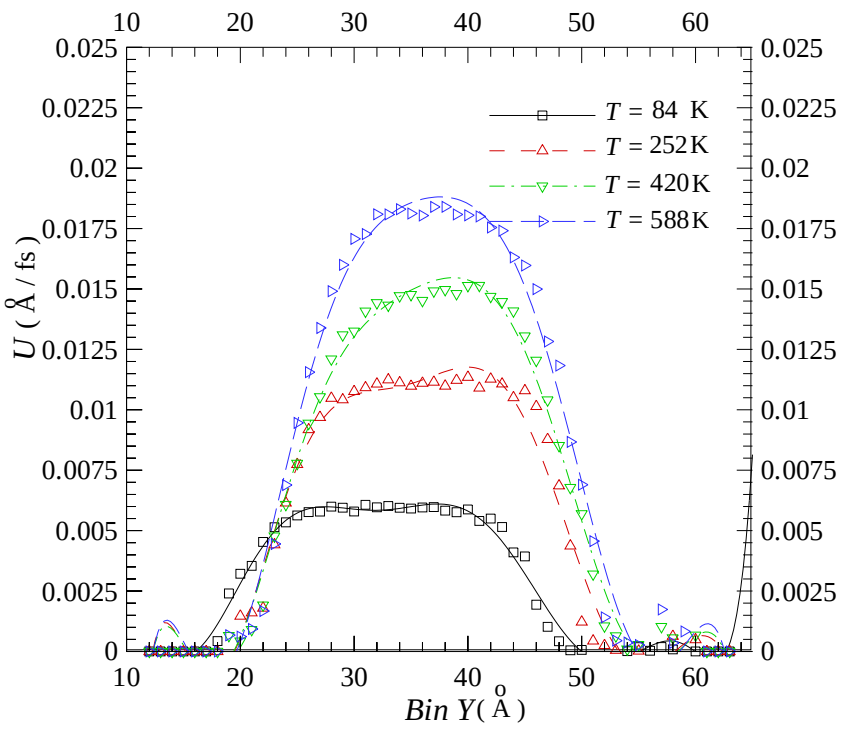
1- Thermal conductivity (K)
2- Green- kubo
3- lattice
4- Knudsen number
5- Bin

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.10.24.8]

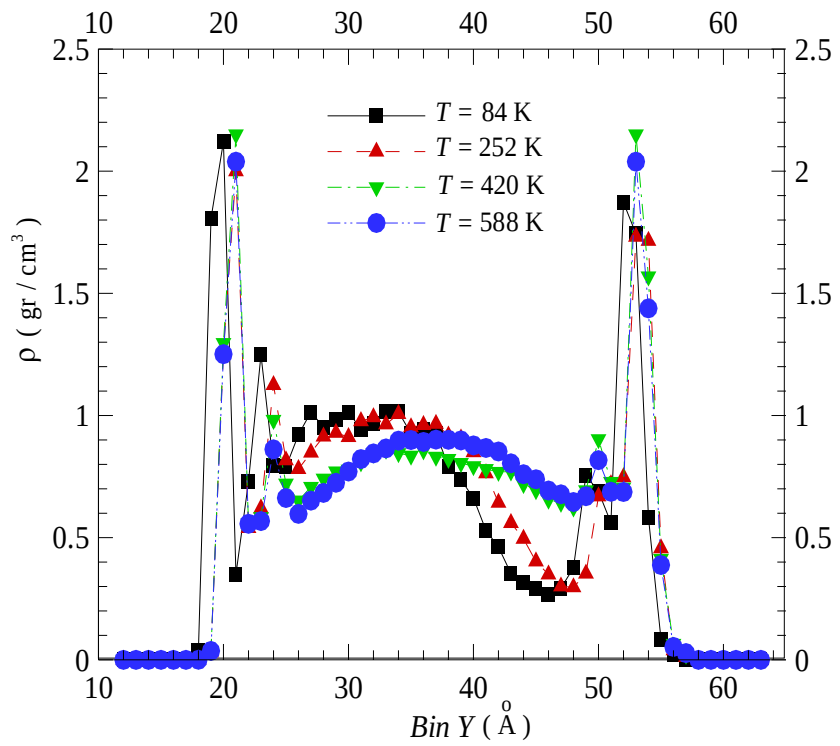
مولکول‌های سیستم می‌شود که این افزایش انرژی جنبشی باعث افزایش پروفیل سرعت در نانوکانال خواهد شد. در همه حالت‌های دمایی، پروفیل‌های سرعت شکل سهموی و سنتی خود را حفظ می‌کند ولی با این حال بالا رفتن دمای سیستم به تشکیل پروفیل‌های منظم‌تر سهموی شکل کمک کرده است. به‌نظر می‌رسد که در دماهای پایین مولکول‌های آب توزیع متقارنی ندارند و مولکول‌های آب به یک سمت دیواره بیشتر جذب می‌شوند که در این شبیه‌سازی مولکول‌های آب به دیواره پایینی نزدیکی بیشتری دارند. تصاویر به‌دست آمده از حرکت مولکول-های آب نیز این ادعا را اثبات می‌کند. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که پروفیل‌های سهموی شکل سرعت، از دمای سیستم نیز متأثر می‌شوند.

3-2- پروفیل چگالی

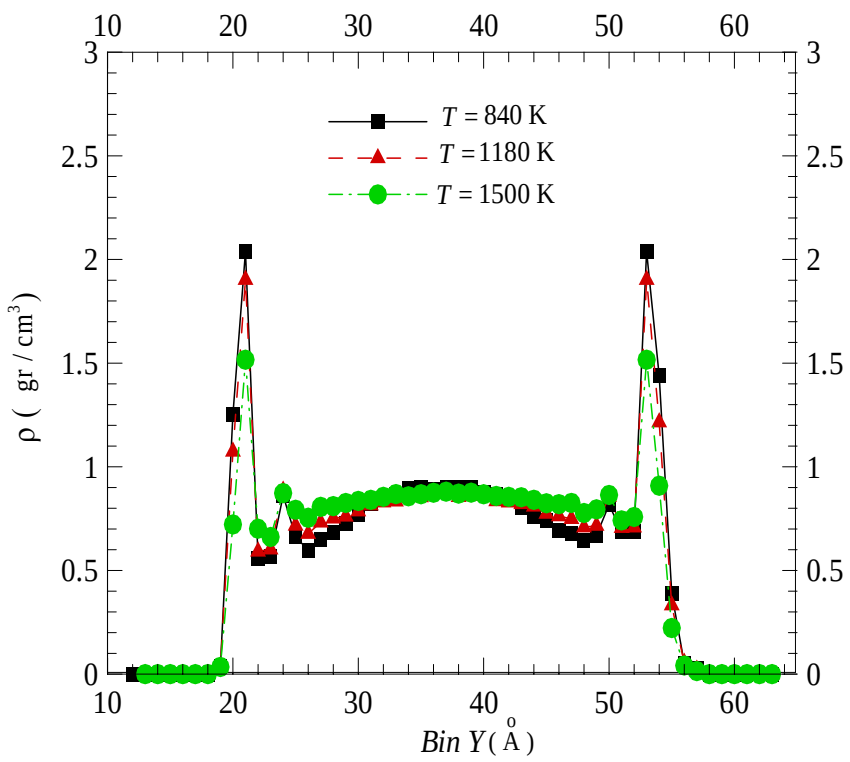
شکل‌های 5 و 6 متوسط پروفیل چگالی در امتداد محور y در حالت‌های مختلف دمایی سیستم، را نمایش می‌دهد. با توجه به شکل‌های به‌دست آمده می‌توان فهمید که ساختار مولکول‌های آب بین دو صفحه در همه حالت‌ها بسیار نامنظم است و دارای نوسانات بسیاری در عرض کانال است. این موضوع در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اتم‌های آرگون در نانو کانال‌ها نیز گزارش‌شده است [12-14].



شکل 4 نمودار تغییرات سرعت در نانوکانال بر حسب دمای مولکول‌های آب



شکل 5 نمودار تغییرات چگالی در نانوکانال برحسب دمای مولکول‌های آب



شکل 6 نمودار تغییرات چگالی در نانوکانال برحسب دمای مولکول‌های آب

بااین‌حال نوسانات در ناحیه نزدیک به دیواره بسیار بزرگ‌تر است. مقدار چگالی در نزدیک به هر دو دیواره بالایی و پایینی افزایش می‌یابد درحالی‌که مقدار پروفیل چگالی در مرکز نانوکانال به‌آرامی یکنواخت می‌شود. با توجه به شکل 5 می‌توان فهمید که مقدار دمای مولکول‌ها در پراکندگی آن‌ها در نانوکانال از اهمیت بالایی برخوردار است. به‌عنوان مثال برای دماهای 84k و 252k ساختار مولکول‌های آب بسیار متفاوت‌تر از دماهای دیگر است. برای این دماها همان‌طور که دیده می‌شود مولکول‌های آب بیشتر در نزدیکی دیواره‌ی پایینی قرار دارند و توزیع فضایی مولکول‌ها متقارن نیست. با افزایش دما ساختار و پراکندگی مولکول‌ها در نانوکانال منظم‌تر و متقارن است. این موضوع در پروفیل‌های سرعت به‌دست آمده نیز مشهود بود. باید دقت کرد که در مباحث مولکولی به خصوص زمانی که حجم و تعداد مولکول‌های سیستم ثابت در نظر گرفته شده باشد، به طور کلی این تعداد مولکول‌های سیال است که تعیین کننده افزایش یا کاهش چگالی کل سیستم خواهد بود. چرا که با افزایش تعداد مولکول‌های سیال، چگالی عددی سیستم افزایش می‌یابد. البته مابقی شرایط محیطی ، همان‌طور که در این نوشتار نشان داده خواهد شد، از قبیل دمای سیستم و برهم کنش سیال و دیواره، می‌تواند تاثیراتی بر نحوه توزیع هندسی مولکول‌های آب داشته باشد.

شکل 6 نشان می‌دهد که با افزایش دما پروفیل چگالی در اواسط نانوکانال تخت‌تر و یکنواخت‌تر می‌شود. البته از مجموع شکل‌های 5 و 6 می-توان فهمید که افزایش دمای مولکول‌های آب باعث کاهش لایه‌های چگالی نزدیک به دیواره می‌شود به این صورت که با افزایش دما، مولکول‌های آب بیشتر به وسط کانال متمایل می‌شوند و از حجم مولکول‌ها در نزدیکی دیواره کاسته می‌شود.

برای درک بهتر از برهم‌کنش بین مولکول‌های آب با یکدیگر و البته برهم‌کنش بین مولکول‌های آب و دیواره جامد، پروفیل‌های چگالی برای سه حالت مختلف رسم شده است. این سه حالت مختلف با تغییر برهم‌کنش بین مولکول‌های آب و دیواره به‌وجود آمده‌اند. در این مطالعه برهم‌کنش بین مولکول‌های آب و دیواره به ترتیب 1 Kcal/mol، 2 Kcal/mol و 3.5 Kcal/mol انتخاب شده است. شکل 7 گویای این نکته است که با افزایش میزان خیس‌شوندگی دیواره، لایه‌های چگالی نزدیک به دیواره بزرگ‌تر می‌شوند. بیشترین مقدار چگالی حالت اول 1/15 و برای حالت دوم و سوم به-ترتیب 1/51 و 2/3 است. بنابراین هرچقدر که برهم‌کنش بین سیال و دیواره

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.10.24.8]

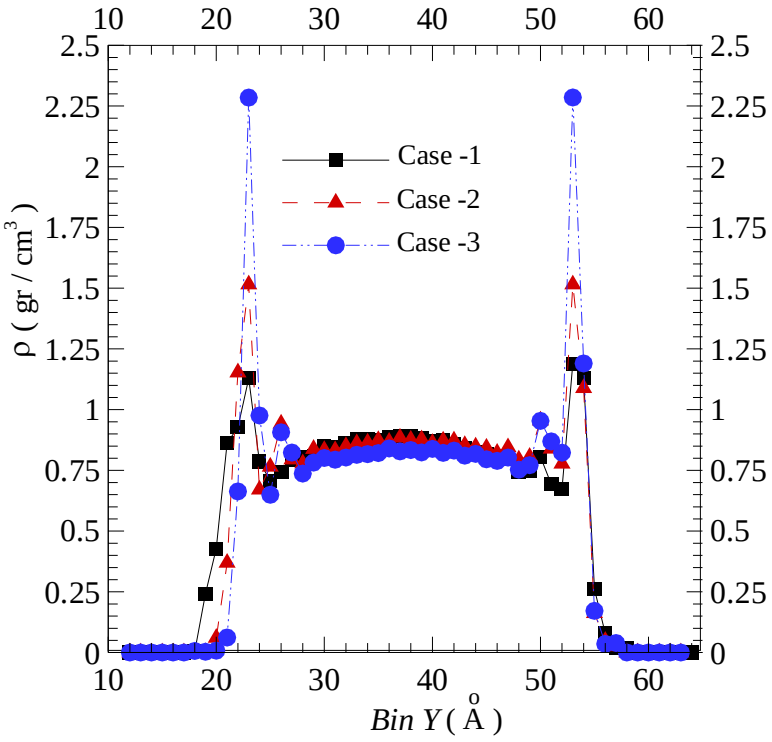
بیشتر شود تمایل مولکول‌های آب به نزدیک شدن به دیواره بیشتر می‌شود. شکل 7 نشان می‌دهد که به طول 0.3 nm حباب‌های خالی از مولکول‌های آب در مجاورت دو دیواره وجود دارد. برای جریان کوئت حل شده در مرجع [28] این مقدار 0.25 nm گزارش شده است که تطابق بسیار خوبی را نشان می‌دهد. ماکزیمم مقدار چگالی در فاصله 0.55 nm از دیواره به‌وجود می‌آید.

هدف دیگر از این مطالعه، پی بردن به برهم‌کنش‌های بین مولکول‌های آب با یکدیگر بر اثر تغییرات در برهم‌کنش بین مولکول آب و دیواره است؛ این درحالی است که مطالعات انجام شده قبلی به بررسی برهم‌کنش بین مولکول‌های آب و دیواره جامد پرداخته‌اند [5] و [12-14]. با دقت در نمودارهای شکل 5، 6 و 7 می‌توان فهمید که در هرکدام از حالت‌ها، پروفیل-های چگالی دارای پنج نقطه بیشینه در عرض نانوکانال هستند که با تقارن قابل‌قبول در عرض کانال توزیع شده‌اند. البته این موضوع هر دو نقطه بیشینه در نزدیکی دیواره اتفاق افتاده است که مقدار آن در هر دو طرف دیواره یکسان است و دو نقطه بیشینه دوم که مقدار آن به‌مراتب کمتر است، در نواحی داخلی‌تر کانال و درست بعد از مقدار بیشینه اول اتفاق می‌افتد. در ادامه مقدار لایه‌های چگالی دوباره رشد کرده و در وسط نانوکانال مقدار بیشینه پنجم نیز حاصل می‌شود. البته نقطه بیشینه پنجم برای دماهای K 588 در شکل 5 و 840K در شکل 6، بیشتر به چشم می‌خورد. دلیل این موضوع همان‌طور که قبلا گفته شد این است که، با افزایش دما پروفیل چگالی در اواسط نانوکانال تخت‌تر و یکنواخت‌تر می‌شود. البته باید دقت کرد که افزایش میزان خیس‌شوندگی دیواره و دمای سیستم در شکل 7 باعث می‌شود که پروفیل چگالی در اواسط کانال کاملاً تخت شود و دیگر شاهد نقطه بیشینه پنجم در وسط کانال نباشیم. بنابراین این چهار نقطه نشان می-دهند که جریان آب در کانال‌های به‌صورت لایه‌ای است. بحث لایه_ای بودن جریان مولکول‌های آب در نانوکانال‌ها توسط ژو و همکاران [28] نیز بررسی شده است. البته باید دقت کرد که دیگر شرایط محیطی سیستم شبیه‌سازی، ازجمله دمای سیستم در تشکیل جریان لایه‌ای آب در نانوکانال بسیار مهم است. این موضوع از شکل‌های 5 و 6 کاملاً قابل استنتاج است.

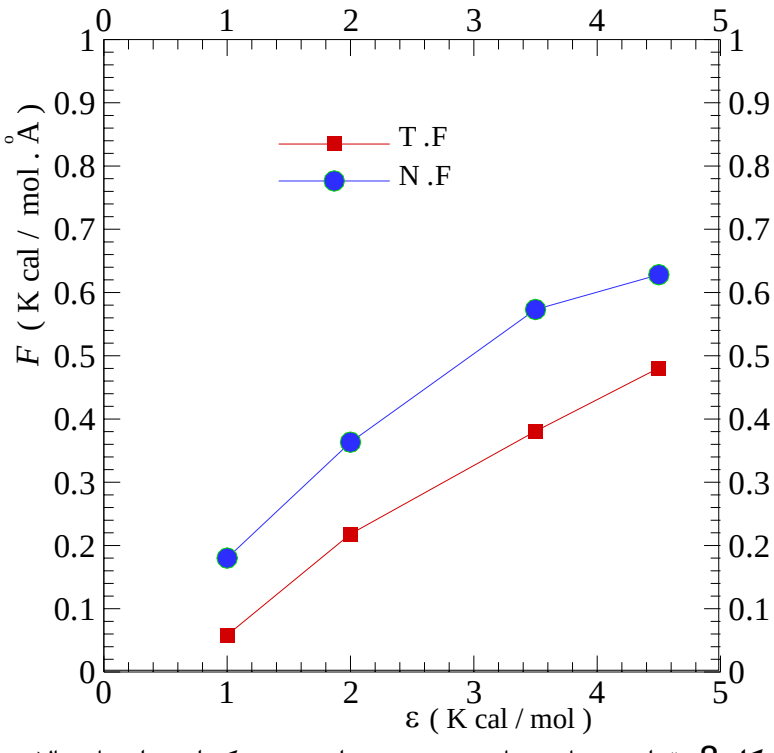
در نمودار شکل 7 با افزایش میزان خیس‌شوندگی پروفیل چگالی در اواسط کانال هموارتر و تخت‌تر شده است که نشان می‌دهد افزایش میزان خیس شوندگی دیواره در برهم‌کنش بین مولکول‌های آب تا اواسط کانال تأثیرگذار خواهد بود و مقدار چگالی به $1\ gr/cm^3$ نزدیک می‌شوند که این مقدار درواقع همان چگالی توده‌ای سیال آب ($1000\ Kg/m^3$) است. بنابراین مولکول‌های آب در اواسط کانال رفتاری شبیه به حالت پیوسته پیدا می‌کنند.

3-3- اصطکاک جریان مولکول‌های آب در نانوکانال

برای محاسبه مقاومت جریان مولکول‌های آب در کانال شبیه‌سازی شده، به‌ویژه اصطکاک جریان بین مولکول‌های آب و دیواره، نیروی مماسی[1] و عمودی[2] وارد شده به هرکدام از دیواره‌های بالایی یا پایینی را برای حالت‌های مختلف به دست آورده‌ایم. در این مطالعه برهم‌کنش بین مولکول‌های آب و دیواره را تا 4.5 Kcal/mol، افزایش داده شده است. نیروی مماسی حاصل از جمع تمامی نیروهای اعمال‌شده به دیواره بالایی یا پایینی در جهت مماس بر دیواره (جهت مثبت محور x) است درحالی‌که نیروی عمودی حاصل از جمع تمامی نیروهای وارد بر دیواره در جهت عمود (جهت مثبت محور y) است. همان‌طور که در شکل 8 مشاهده می‌شود با افزایش برهم‌کنش بین مولکول‌های آب و دیواره، مقدار نیروی افقی و عمودی اعمال‌شده به دیواره افزایش یافته است.



شکل 7 نمودار تغییرات چگالی در نانوکانال برحسب میزان خیس‌شوندگی دیواره در دمای T = 1500K



شکل 8 مقدار نیروهای مماسی و عمودی وارد بر هر یک از دیواره‌های بالایی یا پایینی در حالت‌های مختلف خیس‌شوندگی سطح

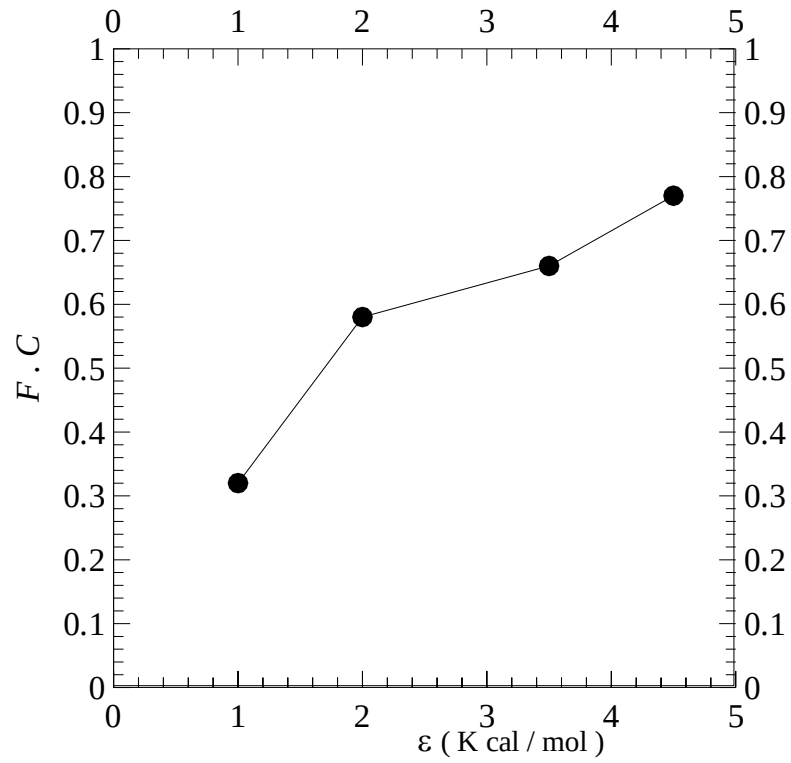
مقدار متوسط نیروی مماسی وارد بر دیواره برای چهار حالت، 0/058، 0/218، 0/38، 0/48 و مقدار متوسط نیروی عمودی، 0/18، 0/363، 0/573، 0/628 به‌دست آمده است. ضریب اصطکاک[3] در نانوکانال‌ها به‌صورت نسبت نیروی افقی به نیروی عمودی وارد بر دیواره تعریف می‌شود [32]. ازآنجایی‌که سرعت افزایش نیروی افقی بیشتر از نیروی عمودی است، ضریب اصطکاک افزایش خواهد یافت. شکل 9 نحوه تغییرات ضریب اصطکاک را برحسب مقادیر مختلف برهم‌کنش سیال و دیواره نشان می‌دهد. بنابراین در این مقاله این موضوع مفهوم شد که برای مولکول‌های آب، افزایش لایه‌های چگالی باعث افزایش ضریب اصطکاک می‌شود. به عبارت دیگر افزایش مقدار ε_{si-M}، باعث افزایش اصطکاک بین دیواره زبر و مولکول‌های آبی می‌شود.

این نتایج بدین معنی است که افزایش میزان خیس‌شوندگی دیواره باعث افزایش دراگ اصطکاکی و احتمالاً اتلاف حرارتی سیستم می‌شود. برای بررسی این موضوع، شار حرارتی عبوری از سیستم در جهت محور x در

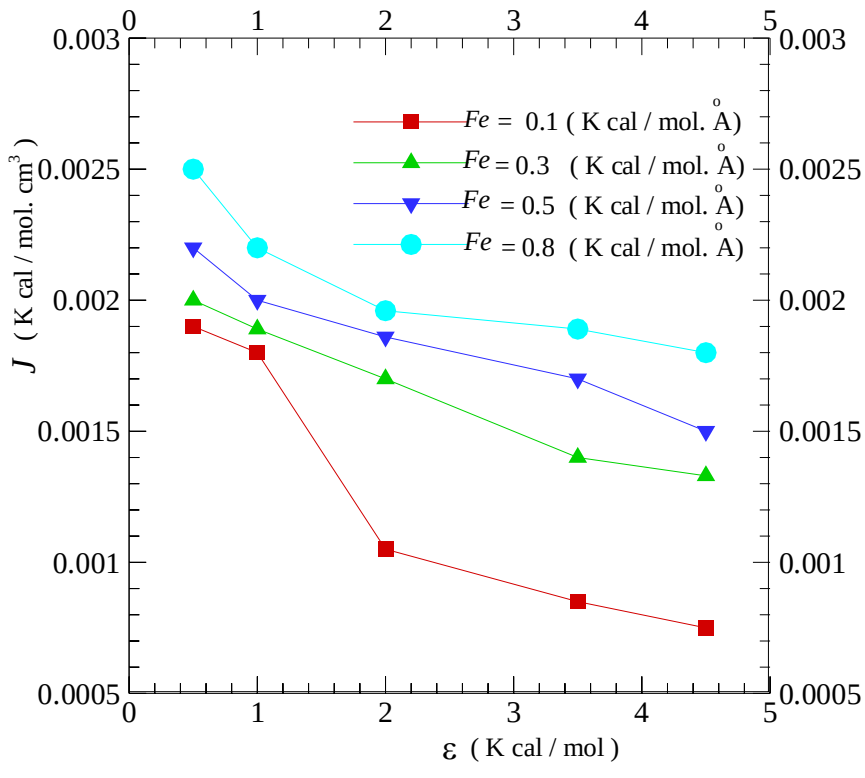
1- Tangential Force (T.F)
2- Normal Force (N.F)
3- Friction Coefficient (F.C)

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.10.24.8]

حالت‌های متفاوت خیس‌شوندگی سطح و نیروی خارجی اعمالی در دمای T = 300K محاسبه نموده‌ایم.



شکل 9 ضریب اصطکاک محاسبه شده برحسب مقادیر مختلف برهم‌کنش سیال و دیواره



شکل 10 نمایش شار حرارتی سیستم در حالت‌های مختلف خیس‌شوندگی سطح و نیروی خارجی اعمالی

همان‌طور که در شکل 10 دیده می‌شود با افزایش برهم‌کنش بین مولکول-های سیال و افزایش دراگ اصطکاکی در سطح مشترک سیال و دیواره و درنتیجه افزایش اتلاف حرارتی سیستم، شار حرارتی عبوری در جهت محور x کاهش می‌یابد. درحالی‌که افزایش نیروی خارجی باعث افزایش شار حرارتی جریان در نانوکانال شده است.

4- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی تأثیرات دمایی سیستم و برهم‌کنش سیال و دیواره بر جریان مولکول‌های آب که در نانوکانال محبوس شده‌اند پرداخته شده است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که دمای سیستم در تشکیل پروفیل‌های سرعت و چگالی سیال مهم است. از دستاوردهای بسیار مهم این پژوهش بررسی تأثیرات خیس شوندگی دیواره بر شار حرارتی، برهم‌کنش بین مولکول‌های آب و دیواره و مولکول‌های آب با یکدیگر و همچنین اثبات لایه‌ای بودن جریان مولکول‌های آب است. نتایج نشان داد که با افزایش میزان خیس شوندگی پروفیل‌های چگالی در اواسط کانال مسطح‌تر می‌شوند و به حالت جریان پیوسته نزدیک می‌شوند. با افزایش میزان خیس شوندگی و تجمع بیشتر مولکول‌ها در مجارت دیواره، مقدار دراگ اصطکاکی بر روی دیواره افزایش می‌یابد که باعث افزایش در مقدار نیروی افقی و عمودی اعمال‌شده بر دیواره می‌شود. شار حرارتی به‌دست‌آمده در سیستم به ازای مقادیر خیس شوندگی متفاوت دیواره، نشان می‌دهد که افزایش میزان خیس شوندگی دیواره، باعث کاهش شار حرارتی سیستم می‌شود.

5- مراجع

[1] V. S. Craig, C. Neto, and D. R. Williams, Shear-dependent boundary slip in an aqueous Newtonian liquid, *Phys. Rev. Lett,* Vol. 87, No. 5, p. 054504, 2001.

[2] M. Gad-el-hak, The Fluid Mechanics of Microdevices — The Freeman Scholar Lecture, *J. Fluids Eng,* Vol. 121, No. March, pp. 5 – 33, 1999.

[3] R. Pit, H. Hervet, and L. Léger, Direct experimental evidence of slip in hexadecane: solid interfaces, *Phys. Rev. Lett,* Vol. 85, No. 5, pp. 980–983, 2000.

[4] T. R. Bewley, K. V Sharp, R. J. Adrian, J. G. Santiago, M. Gad-el-hak, W. N. Sharpe, F. Kreith, and J. F. Kreider, *The MEMS Handbook,* Vol. 55, No. 6, 2002.

[5] J. L. Barrat and L. Bocquet, Large slip effect at a nonwetting fluid-solid interface, *Phys. Rev. Lett.,* Vol. 82, No. 23, pp. 4671–4674, 1999.

[6] K. P. Travis, K. E. Gubbins, N. Carolina, Poiseuille flow of Lennard-Jones fluids in narrow slit pores, *J. Chem. Phys,* Vol. 112, No. 4, pp. 1984–1994, 2000.

[7] N. V. Priezjev, A. A. Darhuber, and S. M. Troian, Slip behavior in liquid films on surfaces of patterned wettability: Comparison between continuum and molecular dynamics simulations, *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys,* Vol. 71, No. 4, 2005.

[8] G. Karniadakis, A. Beskok, and N. Aluru, Microflows and Nanoflows Fundamentals and Simulation, *Interdiscip. Appl. Math.,* Vol. 29, 2005.

[9] M. Cieplak, J. Koplik, and J. R. Banavar, Applications of statistical mechanics in subcontinuum fluid dynamics, *Phys. A Stat. Mech. its Appl,* Vol. 274, No. 1, pp. 281–293, 1999.

[10] J. Koplik, J.R. Banavar,Continuum Deductions from Molecular Hydrodynamics, *Annu. Rev. Fluid Mech,* Vol. 27, pp. 257-292, 1995

[11] D. J. Evans and W. G. Hoover, Flow far from Equilibrium via Molecular Dynamics, Ann Rev. Fluid Mech, pp. 243–264, 1986.

[12] S. C. Yang, Effects of surface roughness and interface wettability on nanoscale flow in a nanochannel, *Microfluid Nanofluidd,* pp. 501–511, 2006.

[13] R. Kamali and A. Kharazmi, International Journal of Thermal Sciences Molecular dynamics simulation of surface roughness effects on nanoscale fl ows, *Int. J. Therm. Sci.,* Vol. 50, No. 3, pp. 226–232, 2011.

[14] G. Nagayama and P. Cheng, Effects of interface wettability on microscale flow by molecular dynamics simulation, *Int. J. Heat Mass Transf.,* Vol. 47, no. 3, pp. 501–513, 2004.

[15] W. M. Zhang, G. Meng, and X. Wei, A review on slip models for gas microflows, *Microfluid. Nanofluidics,* Vol. 13, No. 6, pp. 845–882, 2012.

[16] H. Aminfar, N. Razmara, Molecular Molecular dynamics simulation of liquid argon flow in nanochannels using different potential functions, *Modares Mechanical Engineerin*, Vol. 13, No. 6, pp. 114-125, 2013 (In Persian)

[17] B. Cao, M. Chen, Z. Guo, Effect of surface roughness on gas flow in microchannels by molecular dynamics simulation, *International Journal of Engineering Science,* No. 44, pp. 927–937, 2006

[18] H. Rahmatipour, A. R. Azimian, Molecular dynamics simulation of Couette flow behavior in smooth and rough nanochannels, *Modares Mechanical Engineering,* Vol. 15, No. 7, pp. 119-130, 2015. (In Persian)

[19] M. Rezaei, A. R. Azimian, D. Toghraie, Molecular dynamics study of structural properties of electro-osmotic flow in a nanochannel, *Journal of Solid and Fluid Mechnics*,Vol. 2, No. 4, pp. 77-91, 2012. (In Persian)

[20] Y. Bakhshan, A. Shadloo jaromi, Molecular Dynamics Simulation of Surface Specifics Effects on the nanoscale fluid flow, *Modares Mechanical Engineering,* Vol. 15, No. 5, pp. 176-184, 2015. (In Persian)

[21] A. kucaba-pietal, Z. Walenta, Molecular dynamics computer simulation of water flows in nanochannels, Vol. 57, No. 1, pp. 55–61, 2009.

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.10.24.8]

[22] A. Kalra, S. Garde, and G. Hummer, Osmotic water transport through carbon nanotube membranes, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.,* Vol. 100, No. 18, pp. 10175–10180, 2003.

[23] T. W. Allen, S. Kuyucak, S. H. Chung, "The effect of hydrophobic and hydrophilic channel walls on the structure and diffusion of water and ions," *J. Chem. Phys.,* Vol. 111, No. 17, pp. 79–85, 1999.

[24] C. Hartnig, W. Witschel, E. Spohr, "Molecular Dynamics Study of the Structure and Dynamics of Water in Cylindrical Pores," *J. Phys. Chem. B,* Vol. 102, No. 7, pp. 1241–1249, 1998.

[25] M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press, Oxford,* 1989.

[26] S. N. Laboratories. *LAMMPS: Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator,* Available: http://lammps.sandia.gov/, (version 4 Mar 2014).

[27] G. Karniadakis, A. Beskok, N. Aluru, Microflows and Nanoflows Fundamentals and Simulation, *Interdiscip. Appl. Math.,* Vol. 29, 2005.

[28] Y. Zhu, L. Zhang, X. Lu, L. Lu, and X. Wu, Flow resistance analysis of nanoconfined water in silt pores by molecular simulations: Effect of pore wall interfacial properties, *Fluid Phase Equilib,* Vol. 362, pp. 235–241, 2014.

[29] P. Mark, L. Nilsson, Structure and Dynamics of the TIP3P, SPC, and SPC/E Water Models*, the Journal of Chemical Physics*. Vol. 105, pp. 9954-9960, 2001

[30] P. a. Thompson and S. M. Troian, "A general boundary condition for liquid flow at solid surfaces," *Nature,* Vol. 389, No. September, pp. 360–362, 1997.

[31] M. Cieplak, J. Koplik, and J. R. Banavar, "Boundary conditions at a fluid-solid interface," *Phys. Rev. Lett.,* Vol. 86, No. 5, pp. 803–806, 2001.

[32] L.Z. Zhang, S.Y. Jiang, Molecular simulation study of nanoscale friction for alkyl monolayers on Si(111), *The Journal of Chemical Physics,* Vol. 117, pp. 1804–1811, 2002.

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]

[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.10.24.8]