



شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تأثیرات مشخصات فیزیکی سطح بر جریان سیال در ابعاد نانو

یونس بخشان^{1*}، علیرضا شادلو جهرمی²

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: 08 دی 1393

پذیرش: 18 بهمن 1393

ارائه در سایت: 15 فروردین 1394

کلید واژگان:

دینامیک مولکولی

نانوکانال

پتانسیل لنارد- جونز

زبری

فرورفتگی

چکیده

در مقاله حاضر، از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای بررسی تأثیرات زبری و فرورفتگی سطح بر روی جریان پوآزی آرگون مایع در نانوکانال‌ها استفاده شده‌است. تفاوت‌های متعددی در مشخصات هیدرودینامیک اصطکاک جریان میان زبری‌ها و فرورفتگی‌ها وجود دارد که ناشناخته هستند. در این مطالعه، از پتانسیل لنارد- جونز برای مدل کردن برهم کنش‌های بین ذرات استفاده شده‌است. هر اتم دیواره جامد در داخل شبکه‌اش قرار داده شده است و دمای آن به وسیله ترموستات قرار داده شده بر روی آن کنترل می‌شود. زبری‌ها و فرورفتگی‌ها بر روی دیواره پایینی قرار گرفته‌اند. برای ایجاد مقایسه بین زبری‌ها و فرورفتگی‌ها، ابعاد یکسانی برای هر دو در نظر گرفته شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که مشخصات هیدرودینامیک جریان و تنش برشی دیواره به زبری‌ها و فرورفتگی‌ها دیواره بستگی دارد. زبری ایجاد شده بر روی دیواره پایینی تأثیرات بیشتری بر روی پروفیل‌های سرعت و چگالی به نسبت فرورفتگی متناظر خود دارد. همچنین نتایج نشان می‌دهد که حضور زبری بر روی دیواره پایینی باعث افزایش تنش برشی دیواره پایینی و کاهش تنش برشی دیواره بالایی می‌شود در صورتی که حضور فرورفتگی بر روی دیواره پایینی تأثیرات چندانی بر روی دیواره بالایی ندارد و فقط باعث افزایش تنش برشی دیواره پایینی می‌شود.

Molecular Dynamics Simulation of Surface Specifics Effects on the nanoscale fluid flow

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 29 December 2014
Accepted 07 February 2015
Available Online 04 April 2015

Keywords:

Molecular dynamics
Nanochannel
Lennard-Jones potential
Roughness
Cavitation

ABSTRACT

In the present essay, molecular dynamics simulation has been employed for simulating of surface roughness and cavitation effects on Poiseuille flow of liquid Argon in nanochannels. There are some extensive differences on the hydrodynamic characteristics of flow friction between roughness and cavitations which are unknown. In this study, the Lennard-Jones potential is used to model the interactions between particles. Each atom of the solid wall is anchored at its lattice site and its temperature has been fixed by applying thermostat on it. The roughness and cavitation have been placed on the bottom wall of channel. To make a comparison between the effect of roughness and cavitation, the same dimension is used for both. Obtained results show, those hydrodynamic characteristics of flow and the walls shear stress depends on the roughness and cavitation sizes. The roughness on the bottom wall has more effect than cavity wall on the velocity and density profiles. Also, results show that the presence of roughness on the bottom wall causes the shear stress on the bottom wall to increase and the shear stress on the top wall to decrease, while the presence of cavitation on the bottom wall has no effect on the top wall and just causes the shear stress of bottom wall to increase.

1- مقدمه

محیط‌های پیوسته می‌گردد. این مشکل به‌ویژه در سال‌های اخیر و با پیشرفت نانو تکنولوژی و شروع به ساخت ابزارها و ادوات در مقیاس نانو و وجود سطح مقطع جریان در اندازه نانومتر و میکرومتر بسیار نمایان‌تر شده است. نانو کانال و میکرو کانال یکی از قسمت‌های اصلی و پرکاربرد در این ادوات و ابزارها می‌باشند. به دست آوردن مشخصات جریان برای طراحی درست و کارکرد مناسب این ابزارها بسیار مهم است؛ بنابراین می‌توان علم محاسباتی نانو را مکمل علم آزمایشگاهی نانو دانست. همچنین برخلاف سیستم‌ها در ابعاد ماکرو، در ابعاد نانو ابزارها و وسایل آزمایشگاهی برای

اگرچه مدل محیط پیوسته به‌صورت گسترده جهت 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 و جهش دمایی 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

Please cite this article using:

Y. Bakhshan, A. Shadloo Jahromi, 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)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

بررسی این سیستم‌ها محدود می‌باشند و هزینه بسیار زیادی را برای تحقیقات آزمایشگاهی نیاز دارند؛ در نتیجه، در این زمینه مطالعات عددی انجام شده بسیار بیشتر از مطالعات آزمایشگاهی است. علم محاسباتی نانو روش مناسبی برای شبیه‌سازی مسائل موردنظر در این حیطه است.

در طی چند سال اخیر حل جریان‌های سیال در ابعاد بسیار ریز به‌وسیله روش دینامیک مولکولی توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده است. روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اولین بار توسط آلدِر در سال 1956، به‌عنوان یک روش استاندارد شبیه‌سازی در محاسبات فیزیک آماری مطرح گردید. مطالعه جریان‌ها در ابعاد نانو در بسیاری از کاربردها از جمله ادوات میکروفلوئیدی، علم نانو و سیستم‌های بیولوژیکی موردتوجه بسیاری از محققین قرار گرفته است. رفتار جریان در ابعاد نانو در مقایسه با ابعاد ماکرو کاملاً متفاوت است. در ابعاد نانو جریان سیال با نسبت بزرگ سطح به حجم روبرو است؛ بنابراین در بررسی جریان در ابعاد نانو برهم‌کنش بین سیال و جامد بسیار مهم است. از آنجایی که مشاهده رفتار سیال در نزدیکی مرز سیال و دیواره بسیار مشکل است استفاده از روش‌های عددی که بر اساس دینامیک مولکولی می‌باشند بسیار مفید می‌باشند. در طی سال‌های اخیر، مطالعات مهمی در زمینه هیدرودینامیک جریان پوآزی به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام شده است که در ادامه به بیان برخی از این مطالعات می‌پردازیم.

همان‌طور که گفته شد، به دست آوردن داده‌های تجربی در مقیاس نانو بسیار سخت و هزینه‌بر است. با این حال مطالعات آزمایشگاهی انجام شده در این زمینه بسیار مفید است. ژو و همکاران [1]، کرایگ و همکاران [2]، تریسوی و همکاران [3] در مطالعات آزمایشگاهی خود نشان دادند که لغزش جریان به شدت تحت تأثیر برهم‌کنش سیال و دیواره و زبری‌های سطح است. تایرل و آتارد [4] با استفاده از میکروسکوپ، نانوحباب‌هایی را در مرز سیال و دیواره برای سطح خیس نشونده¹ مشاهده کرده‌اند. آن‌ها نتیجه گرفتند که حضور این نانوحباب‌ها تأثیراتی بر لغزش جریان خواهد داشت.

امین فر و همکاران [5]، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و اعمال توابع پتانسیل مختلف لنارد-جونز، جریان پوآزی آرگون مایع را در یک نانوکanal 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. ژو و همکاران [6] به شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی بر روی مولکول‌های آب در باریکه پر منفذ پرداختند. در این پژوهش دو صفحه سیلیسیوم (1 1 1) برای مدل کردن باریکه منفذ دار انتخاب شد، نتایج شبیه‌سازی نشان داد که در سطح مولکولی، اصطکاک بین منفذ دیواره و مولکول‌های آب با افزایش قابلیت خیس شونده منفذ دیواره افزایش می‌یابد و مانع از حرکت آب در باریکه می‌شود. یانگ و همکاران [7] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نتیجه گرفتند که برای سیالات روی سطوح بسیار صاف و سطوح خیس نشده تصاویر جریان مولکولی، نشان می‌دهد که یک‌فاصله هوایی و یا نانوحباب‌هایی بین سیال و دیواره جامد وجود دارد و نتایجی بر روی جریان لغزشی می‌گذارند. برای سطوحی با قابلیت خیس شدن، سرعت سیال با افزایش اعمال نیرو افزایش می‌یابد. درحالی‌که افزایش نیرو تأثیراتی بر روی ساختار چگالی مولکول‌های جریان ندارد. بینگ کو و همکاران [8] 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. چن و همکاران [9] به مطالعه تأثیرات خیس شونده‌گی سطح بر روی جریان فشاری سیال لنارد-جونز در نانوکanal پرداخته‌اند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که شرایط مرزی هیدرودینامیک در سطح بین سیال و جامد به هر دو پارامتر خیس شونده‌گی سطح و مقدار نیروی اعمالی بستگی دارد. کوسابا و همکاران [10] به مطالعه تأثیرات جنس دیواره بر روی جریان پوآزی سیال با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداخته‌اند. سوفاس و همکاران [11] برای جریان پوآزی به بررسی تأثیرات دما و نیروی خارجی اعمالی بر روی جریان گاز مایع آرگون پرداخته‌اند و به این نتیجه رسیده‌اند که تأثیرات این دو در مقیاس نانو ناچیز است. زیارانی و همکاران [12] با بهره‌گیری از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، جریان پوآزی متلاطم را در یک نانوکanal، با اعمال دو نیروی خارجی، سینوسی و پله واحد، بر روی ذرات اتم بررسی کرده‌اند. آن‌ها برای برهم‌کنش بین اتم‌های سیال از پتانسیل ویک-چاندلر-اندلسن بهره برده‌اند. طغرای و عظیمیان [13] جریان پوآزی آرگون مایع را در یک نانوکanal باریک شبیه‌سازی کرده‌اند. آن‌ها با اعمال نیروی یکنواخت روی ذرات سیال پروفیل‌های چگالی، سرعت و دما را به دست آورده‌اند. نتایج حاصل از کار آنها نشان می‌دهد که طول لغزش و پروفیل سرعت به نیروی خارجی اعمالی بستگی دارد. ناگایاما و چن [14,15] نشان دادند که شرایط مرزی هیدرودینامیک، در سطح بین سیال و جامد به هر دو پارامتر خیس شونده‌گی سطح و مقدار نیروی اعمالی بستگی دارد. برای یک سیال لنارد-جونز در نانوکanal با سطح خیس شونده²، پروفیل سرعت شکل سنتی سهموی را دارد. شرط مرزی عدم لغزش ممکن است که به خاطر تجاوز کردن نیروی اعمالی بر مقاومت بین سطحی شکسته شود. رضایی و عظیمیان [16] جریان الکترواسموتیک در یک محلول الکترولیت و در مجاورت دو دیواره باردار موازی را شبیه‌سازی کرده‌اند. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهند که جریان الکترواسموتیک به صورت 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.

در جریان در ابعاد نانو، ساختار مولکولی سیال و دیواره و همچنین برهم‌کنش بین این دو در مقیاس طولی مولکولی، نقش کلیدی دارد. بررسی و دسته‌بندی تمامی پارامترهای تأثیرگذار بر روی جریان سیال و دیواره موردتوجه بسیاری از محققین بوده است. یکی از این پارامترهای تأثیرگذار، زبری‌ها و فرورفتگی‌های ایجاد شده بر روی دیواره است. تفاوت‌های متعددی در اصطکاک جریان میان زبری‌ها و فرورفتگی‌ها وجود دارد که به‌خوبی مطالعه نشده‌اند. بررسی تأثیرات همزمان زبری‌ها و فرورفتگی‌های دیواره بر روی تنش برشی دیواره و هیدرودینامیک جریان و بررسی تأثیرات طول و ارتفاع این زبری‌ها به‌طور دقیق و جداگانه بر جریان سیال و تنش برشی دیواره، ازجمله نوآوری‌های این پژوهش است که در هیچ‌یک از کارهای تحقیقاتی گذشته گزارش نشده است [6-8]. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که عوامل مشخص‌کننده زبری‌ها و فرورفتگی‌ها که در این پژوهش r_x و r_y نامیده شده‌اند باید با ملاحظات مهندسی و دقت بیشتری به نسبت قبل،

3- روش شبیه‌سازی

در کار حاضر رفتار جریان و تنش برشی دیواره برای سیال ساده که بین دو صفحه گیر افتاده است شبیه‌سازی شده است. شکل 1 مشخصات هندسی سیستم شبیه‌سازی را نشان می‌دهد. هرکدام از دیواره‌های بالایی و پایینی دارای چهار لایه مولکولی منظم شده می‌باشند. در این شکل، $L_y = 10\sigma_f$ و ابعاد جانبی $L_x \times L_z = 20\sigma_f \times 20\sigma_f$ که σ_f قطر مولکول‌های سیال است. صفحه جامد بالایی صاف است درحالی‌که صفحه جامد پایینی به‌وسیله زبری‌ها و فرورفتگی‌هایی به ارتفاع یا عمق h_d و عرض w_d در جهت y و z تزیین شده‌اند.

شرایط مرزی تناوبی در جهت جریان، یعنی محورهای x و z اعمال شده است. برای یک مولکول سیال سرعت v_i و مومنتم p_i ذره i ام به صورت روابط (1) و (2) تعریف می‌شود [17].

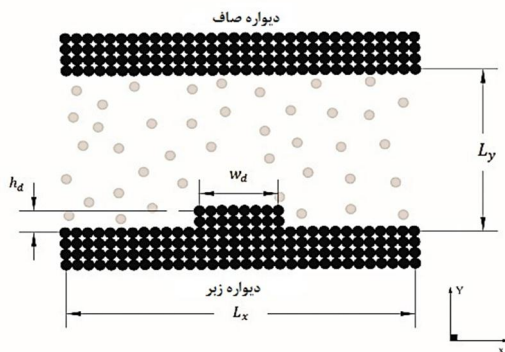
$$v_i = \frac{p_i}{m_f} \quad (1)$$

$$p_i = \sum_{j \neq i} F_{ij} + F_e \quad (2)$$

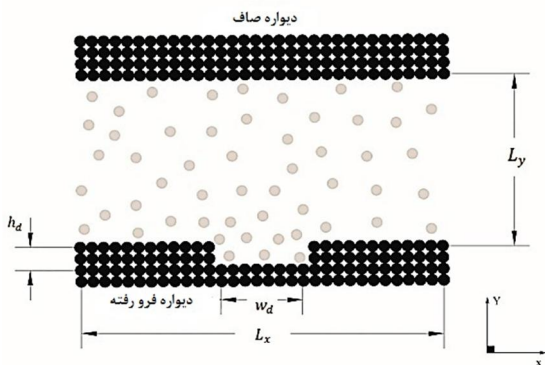
که در آن m_i جرم مولکول i ام و F_{ij} نیروی بین مولکول i ام و j ام و F_e نیروی خارجی اعمالی به ذرات در جهت محور x است. جرم مولکول‌های دیواره m_w برابر با جرم مولکول‌های آرگون در نظر گرفته شده است و معادلات حرکت برای مولکول‌های دیواره شبیه مولکول‌های سیال است، با این تفاوت که نیروی فنری هارمونیک را جایگزین نیروی خارجی می‌کنیم.

برای مولکول‌های سیال و دیواره از تابع پتانسیل لnard- جونز 6-12 برای محاسبه برهم‌کنش‌های بین مولکولی استفاده می‌کنیم. پتانسیل لnard- جونز 6-12 برای مولکول‌های سیال به صورت رابطه (3) است [17].

الف



ب



شکل 1 طرحواره‌ای از جریان پوآزی درون نانوکanal در حالت زبر و فرورفته

طراحی گردند. این موضوع از جمله موارد بسیار مهمی است که محققین قبلی به‌سادگی از کنار آن گذشته‌اند. درواقع نتایج این شبیه‌سازی کمک شایانی به چگونگی افزایش یا کاهش نیروی درگ و اصطکاک بین سیال و دیواره به‌وسیله ایجاد زبری‌ها و فرورفتگی‌ها در سطح مولکولی می‌کند.

2- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

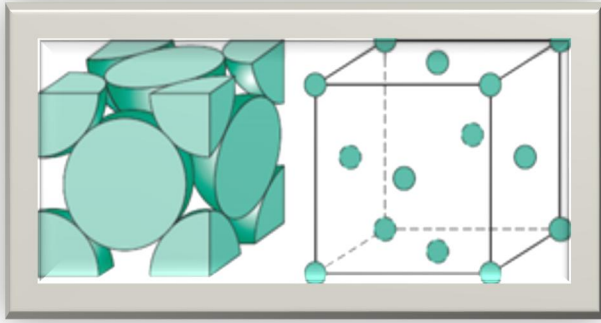
روش دینامیک مولکولی یکی از روش‌های کارآمد جهت حل معادلات حرکت است. این روش، زمانی اهمیت بیشتری پیدا می‌کند که جهت بررسی ویژگی‌های سیال، نیاز به تحلیل تأثیرات و نیروهای مولکولی باشد [17]. اساس این روش، حل معادلات نیوتن در حرکت مولکول‌ها همراه با اعمال میدان پتانسیل بین مولکول‌ها است. روند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به این صورت است که ابتدا مکان و سرعت اولیه ذرات تعیین می‌شود. بعد از محاسبه نیروهای بین‌مولکولی برحسب تابع پتانسیل و شرایط شبیه‌سازی سیستم، معادلات حرکت انتگرال‌گیری شده و مکان و سرعت جدید مولکول‌ها در هر مرحله به دست می‌آید [17]. این حلقه مدام تکرار می‌شود تا درنهایت سیستم به تعادل برسد. سپس با استفاده از تحلیل مکانیک آماری، مشخصات فیزیکی میکروسکوپی مانند فشار، دما، سرعت متوسط، چگالی عددی ذرات و دیگر مقادیر متوسط کمیت‌های ترمودینامیکی و هیدروپنایمیک تعیین می‌شود. درروش دینامیک مولکولی نیازی به اعمال محدودیت‌های ترمودینامیکی و تغییر فاز نیست چراکه تمامی این موارد در نحوه اعمال نیروهای پتانسیل بر سیستم اعمال می‌گردد. این روش برای بررسی ضریب انتقال حرارت فیلم نازک حالت جامد، انتشار گرما و خواص سطوح تماس بین سیال و جامد نیز به‌کاررفته است [18-23]. معیار تحلیل جریان پیوسته و مولکولی، درون نانوکanal‌ها عدد نادسن¹ است. عدد نادسن به‌صورت نسبت مسافت آزاد میانگین مولکولی به بعد مشخصه سیستم تعریف می‌شود؛ که در مسئله حاضر ابعاد و چگالی عددی طوری انتخاب شده‌اند که تحلیل جریان مولکولی صادق باشد. شرایط مرزی تناوبی² همان‌طور که در مرجع [17] 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.

در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اغلب با اعداد بسیار کوچک کار می‌کنیم که برای جلوگیری از افزایش حجم محاسبات و ایجاد خطاهای محاسباتی از واحد کاهیده استفاده می‌کنیم. در جدول 1 برخی از واحدهای کاهیده لnard- جونز را بیان کرده‌ایم.

جدول 1 دستگاه کاهیده لnard جونز

واحد کاهیده	کمیت
L/σ	طول
$F/\left(\frac{\epsilon}{\sigma^2}\right)$	نیرو
E/ϵ	چگالی
$v/\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)$	سرعت
$t/\left(\frac{m^{1/2}\sigma}{\sigma^{1/2}}\right)$	زمان

1- Knudsen number
2- Periodic Boundary Condition



شکل 2 سلول واحد با ساختار شبکه مرکزپر- و جوه پر

در $K_b/T = 1.1$ و چگالی عددی سیستم نیز برابر $\rho\sigma^3 = 0.81$ است. لذا در این شرایط آرگون را می‌توان مایع فرض کرد [19]. گام زمانی شبیه‌سازی برابر 0.005τ است که $\tau = \left(\frac{m_f\sigma_f^2}{\epsilon_f}\right)^{1/2}$ زمان مشخصه است [20]. معادلات حرکت با استفاده از الگوریتم ولت انتگرال‌گیری شده‌اند [17]. باید توجه کرد که در این شبیه‌سازی ابتدا بدون اعمال نیروی خارجی، به سیستم اجازه داده شده تا به حالت تعادل ترمودینامیکی خود نزدیک شده و بعد از آن با اعمال نیروی خارجی F_{ext} شبیه‌سازی غیر تعادلی را از سر گرفته‌ایم. گرمای تولید شده ناشی از نیروی خارجی $F_{ext} = 0.1 \frac{\epsilon}{\sigma^2}$ باعث بالا رفتن دمای سیستم می‌شود که برای ثابت نگه‌داشتن دمای سیستم از ترموستات قرارگرفته بر روی دیواره 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 مرزها را ثابت نگه می‌دارد؛ بنابراین می‌توانیم دمای سیستم را از رابطه‌های (6) و (7) به دست آوریم.

$$\frac{3}{2}NK_bT = KE(T) \quad (6)$$

$$KE(T) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i v_i^2 \quad (7)$$

4- بحث و نتایج

در این پژوهش برای مطالعه تأثیرات زبری و فرورفتگی بر هیدرودینامیک سیال‌های ساده و تنش برشی دیواره، داخل نانوکناال‌ها با زبری‌ها و فرورفتگی‌هایی به‌وسیله عامل r_x و r_y مشخص شده‌اند که $r_x = \frac{w_d}{L_x}$ و $r_y = \frac{h_d}{L_y}$ است. شکل 3 تصویری از جریان اتم‌های آرگون را با اعمال نیروی خارجی $F_e = 0.1$ و چگالی عددی $\rho\sigma^3 = 0.81$ نشان می‌دهد. مقادیر r_x و r_y استفاده شده به ترتیب 0/222 و 0/166 است. برای شکل‌های نشان داده شده مولکول‌های سیال در مجاورت مولکول‌های دیواره بوده و هیچ‌گونه نانو حباب‌هایی در نزدیکی دیواره دیده نمی‌شود که نشان‌دهنده برهم کنش قوی سیال و دیواره است ($c_{fw} = 1.0$) [6,7].

برای محاسبه کردن رفتار هیدرودینامیکی جریان سیال در حالت پایا از میانگین پروفیل سرعت و میانگین پروفیل چگالی استفاده شده است. دامنه محاسبات به قفسه‌هایی² با عرض Δy در امتداد y تقسیم شده‌اند. سرعت متوسط میانگین در یک y مشخص با رابطه $u_x(y) = \frac{m_i u_i}{\sum_{i \in y} m_i}$ بدست

$$U(r_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon_f \left[\left(\frac{\sigma_f}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_f}{r_{ij}}\right)^6 \right] & , r_{ij} \leq r_c \\ 0 & , r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (3)$$

که r_{ij} فاصله بین مولکول‌های i و j و σ_f و ϵ_f به ترتیب طول مشخصه و انرژی ذرات سیال می‌باشند. شعاع قطع r_c برابر با $2.5\sigma_f$ است. مقادیر مناسب پارامترها، برای این سیستم $\epsilon_f = 1.67 \times 10^{-21} J$ و $\sigma_f = 34 \text{ nm}$ برای گاز آرگون است. پارامترهای انرژی پتانسیل لنارد-جونز ϵ_w و σ_w برای دیواره مساوی با مولکول‌های سیال در نظر گرفته‌ایم. برای مدل کردن نیروهای بین مولکولی سیال و دیواره از مدل اصلاح‌شده پتانسیل لنارد-جونز [7,17] که در رابطه (4) زیر آمده است استفاده شده است.

$$U(r_{ij}) = 4\epsilon_{fw} \left[\left(\frac{\sigma_{fw}}{r_{ij}}\right)^{12} - c_{fw} \left(\frac{\sigma_{fw}}{r_{ij}}\right)^6 \right] \quad (4)$$

که ϵ_{fw} و σ_{fw} پارامترهای سیال-دیواره می‌باشند که برابر با ϵ_w و σ_w در نظر گرفته شده‌اند. پارامتر c_{fw} نشان‌دهنده میزان برهم کنش بین سیال و دیواره است. با افزایش مقدار c_{fw} میزان برهم کنش بین سیال و دیواره در نتیجه چسبندگی سیال و دیواره بیشتر شده و ذرات سیال به دیوار می‌چسبند که باعث افزایش اصطکاک بین سیال و دیواره می‌شود [6,7,10]. بنابراین این پارامتر مهم، معیاری برای بیان خیس شونده‌گی سطح یا برهم کنش سیال-دیواره است. با تغییر مقدار این پارامتر از 0/5 تا 1 زاویه تماس ذرات سیال با دیواره به ترتیب از 140° به 90° تغییر می‌کند که به ترتیب سطوح خیس نشونده و خیس شونده را مدل می‌کنند. این مدل توسط بارات و همکاران معرفی شده است [13]. در این پژوهش سطح دیواره را خیس شونده در نظر گرفته‌ایم؛ یعنی $c_{fw} = 1$. چیدمان اولیه مولکول‌های سیال و دیواره در ابتدا به صورتی است که هر کدام از مولکول‌ها در مرکز شبکه مکعبی¹ خود قرار دارند. هر کدام از اتم‌های دیواره جامد، به‌وسیله نیروی فزنی هارمونیک که با رابطه $\Phi_{harm} = K_s(r_{iw} - r_{iw}^{eq})^2/2$ مدل می‌شود در شبکه خود قرار گرفته‌اند. در این رابطه r_{iw} موقعیت اتم i ام دیواره و r_{iw}^{eq} موقعیت تعادلی اتم i ام است. در این مطالعه مقدار K_s را برابر $300 \frac{\epsilon_f}{\sigma_f^2}$ در نظر گرفته‌ایم.

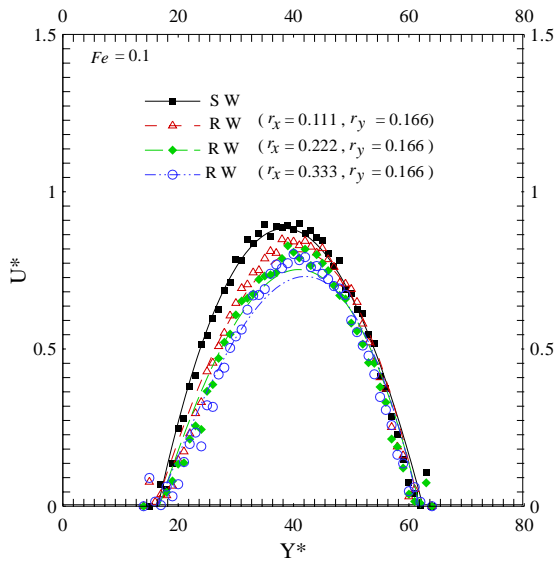
همان‌طور که گفته شد اتم‌های دیواره و سیال به‌وسیله شبکه، مرکزپر- و جوه‌پر چیده شده‌اند. شکل 2 یک سلول از این نوع ساختار را نشان می‌دهد. در این ساختار اتم‌ها در گوشه‌ها و مرکز جوه قرار دارند؛ بنابراین عدد همسایگی این ساختار دوازده است. به همین دلیل نیز در هر واحد شبکه چهار اتم، سه‌اتم در مرکز جوه و یک اتم در گوشه‌ها، موجود است. تماس هر اتم با همسایه‌هایش از مسیر قطر جوه واحد شبکه است و بر این اساس محاسبات صورت می‌پذیرد. بسیاری از فلزات معمول مانند مس، نیکل و سرب در این ساختار شکل می‌گیرند [17].

سرعت اولیه ذرات سیال به صورت تصادفی بر اساس دمای داده شده، به سیستم اعمال شده است. این توزیع تصادفی بر اساس توزیع ماکسول-بولتزمان که یک توزیع گاوسی است به سیستم اعمال شده است که برای یک گاز ایده آل این توزیع به صورت رابطه (5) است [17].

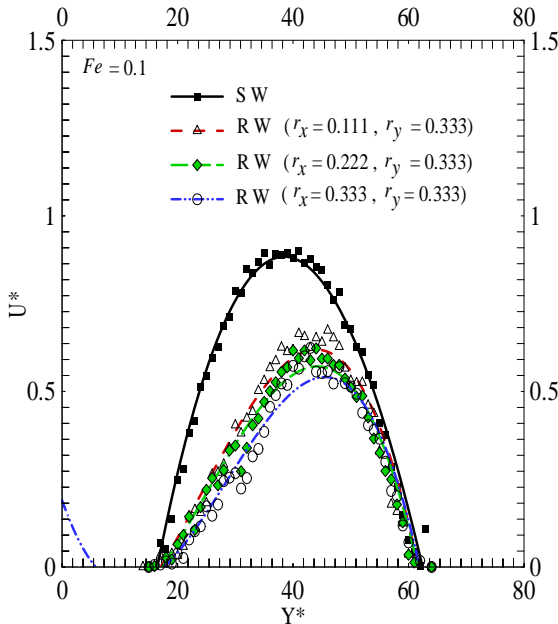
$$P(v) = \left[\frac{m}{2\pi k_B T} \right]^{3/2} \exp \left[-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2\pi k_B T} \right] \quad (5)$$

در این شبیه‌سازی ذرات سیال بین دو صفحه موازی قرار دارد. یک نیروی خارجی برای به حرکت درآوردن سیال در جهت x به اتم‌های سیال اعمال گردیده است. دمای سیستم شبیه‌سازی برای تمامی مولکول‌ها

الف



ب



شکل 4 نمودار تغییرات سرعت در عرض کانال با مقادیر مختلف زبری و فرورفتگی در دیواره

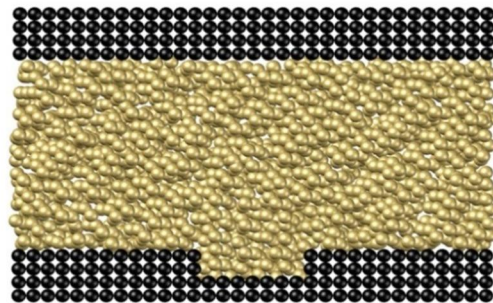
شکل‌های 6 و 7 متوسط پروفیل چگالی در امتداد محور Y در حالت‌های مختلف را نشان می‌دهد. پروفیل چگالی برای دو دیواره صاف برای مقایسه نشان داده شده است. با توجه به شکل‌های به دست آمده می‌توان فهمید که ساختار مولکول‌های سیال بین دو صفحه در همهٔ حالت‌ها بسیار نامنظم است و دارای نوسانات بسیاری در عرض کانال است. این موضوع در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اتم‌های آب در نانو کانال‌ها نیز گزارش شده است [10، 6].

باین‌حال 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 به آرامی یکنواخت می‌شود؛ بنابراین با انتخاب C_{FW} بزرگ‌تر و افزایش برهم کنش بین سیال و دیواره [7، 6] می‌توانیم مقدار چگالی را در نزدیکی دیواره افزایش دهیم که در نتیجه مقدار نوسانات

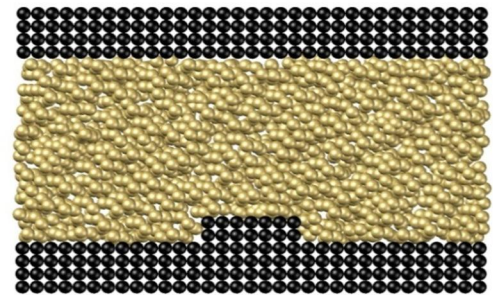
می‌آید؛ که m_i و u_i جرم و سرعت اتم i ام در Y می‌باشد و $\sum_{i \in \gamma} m_i$ نشانگر جمع اتم‌های اشغال شده در Y است همچنین میانگین پروفیل چگالی سیال در یک Y مشخص با رابطه $\rho(Y) = \frac{N_{bin}(Y)}{V_Y}$ بدست می‌آید که $N_{bin}(Y)$ تعداد اتم‌های سیال اشغال شده در قفسه‌ای به حجم V_Y است.

شکل 4 و 5 متوسط پروفیل سرعت در امتداد محور Y در حالت‌های مختلف، دیواره زبر¹ و دیواره فرورفته² را نمایش می‌دهد. پروفیل سرعت برای دو صفحه دیواره صاف³ جهت مقایسه نشان داده شده است. پروفیل‌های سرعت شبیه‌سازی شده در تمام حالات مناسب با حالت کلاسیک بوده و شکل سهموی خود را حفظ کرده است [12]. طبق نتایج به دست آمده از تحقیق [5] نوسانات پروفیل سرعت برای نانوکانال با دیواره صاف، برای پتانسیل لندارد- جونز 6-12 به حداکثر مقدار خود می‌رسد؛ بنابراین نوسانات مشاهده شده برای نانوکانال صاف توجیه‌پذیر است. از آنجایی که در این شبیه‌سازی مقدار $C_{FW} = 1.0$ در نظر گرفته‌ایم مقدار سرعت سیال بر روی دیواره صفر است. در شکل‌های نشان داده شده نیز سرعت بر روی دیواره صفر است. تمامی حالت‌های نشان داده شده مشخص است که پروفیل سرعت در نزدیکی دیواره کاهش یافته است و از حالت سهموی خود منحرف می‌شود. همچنین همان‌گونه که در شکل‌های 4 الف، ب مشخص است برای حالت زبر با افزایش r_x ، ماکزیمم سرعت به دلیل وجود مقاومت اصطکاکی در صفحه پایینی به تدریج به سمت دیواره صاف بالایی کشیده می‌شود. این موضوع در پژوهش انجام شده توسط یانگ و همکاران [7] و همچنین کمالی و همکاران [24] نیز گزارش شده است. برای شکل‌های 5 الف، ب که نشانگر پروفیل سرعت در حالت فرورفتگی دیواره می‌باشند، انحراف در پروفیل سرعت و کشیده شدن به سمت دیواره صاف بالایی دیده نمی‌شود یا حداقل بسیار کمتر است ولی با این‌حال پروفیل سرعت در ناحیه فرورفتگی در نزدیکی دیواره پایین دچار بی‌نظمی بیشتری به نسبت زبری متناظر خود است.

الف



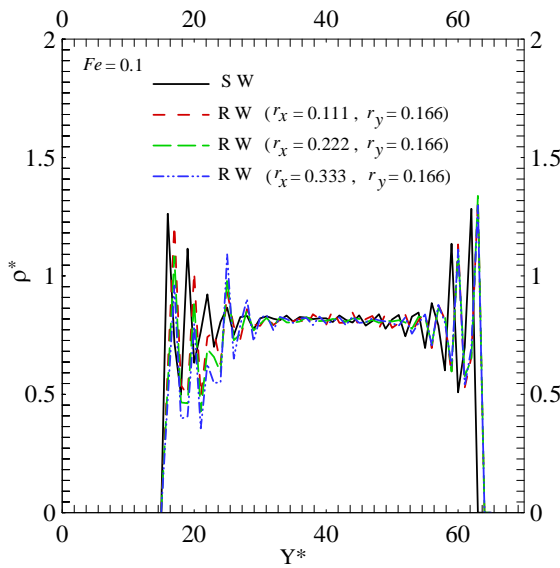
ب



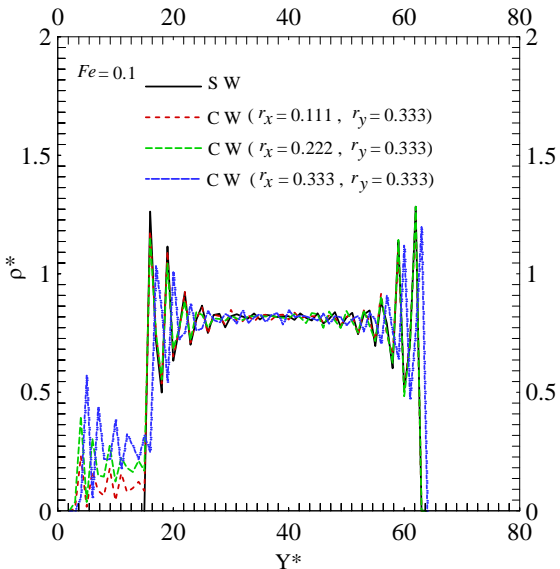
شکل 3 تصویری از جریان ذرات سیال در نانوکانال‌ها

- 1- Rough Wall (R W)
- 2- Cavity Wall (C W)
- 3- Smooth Wall (S W)

الف



ب



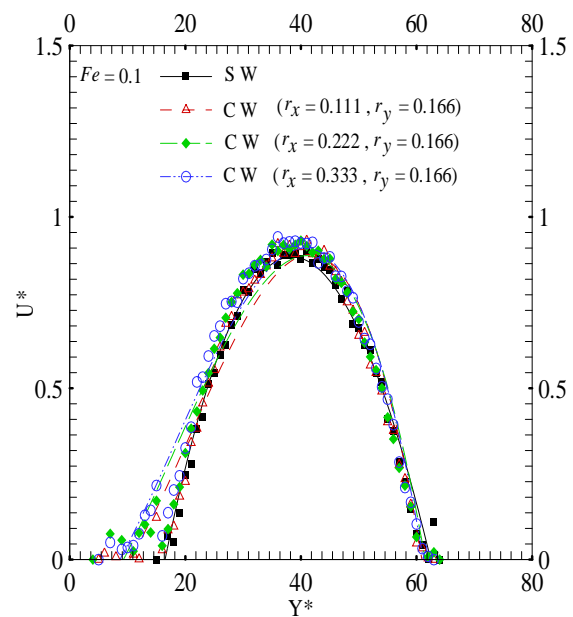
شکل 6 نمودار تغییرات چگالی در عرض نانوکانال با مقادیر مختلف زبری در دیواره

می‌تواند تأثیرات بسزایی در افزایش یا کاهش انتقال حرارت سیستم موردنظر داشته باشد.

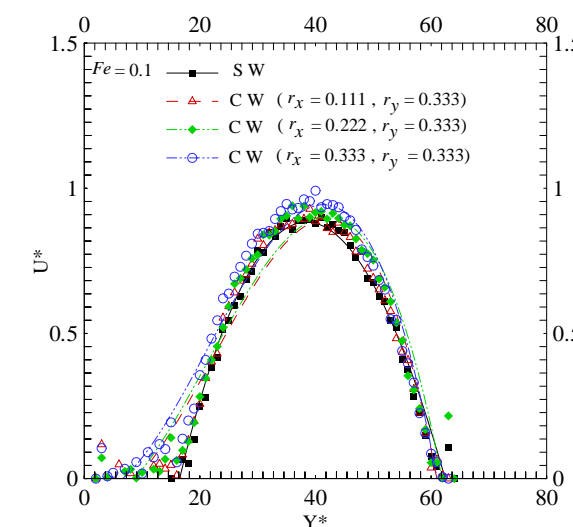
در شکل‌های 7 الف، ب تأثیرات فرورفتگی دیواره را بر چگالی جریان در نانوکانال‌ها نشان داده است. بر روی دیواره پایینی که در واقع فرورفتگی‌های دیواره بر روی آن ایجاد شده‌اند شاهد حضور مولکول‌های مازاد خواهیم بود. نکته مهم در این حالت پرش شدید مقدار چگالی درست بعد از اتمام ناحیه فرورفتگی است. همان‌گونه که در شکل‌های 7 الف، ب دیده می‌شود در ناحیه فرورفتگی مقدار چگالی، نوسانات ملایمی داشته و در انتهای این ناحیه، مقدار چگالی پرش شدیدی داشته است و بعد از آن پروفیل چگالی تا نزدیکی صفحه صاف بالایی تغییرات یکسانی با حالت دیواره‌های صاف داشته است؛ بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که تغییرات r_x در r_y ثابت فقط در محدوده قسمت فرورفته بر مقدار پروفیل چگالی تأثیر داشته است. برای بررسی دقیق‌تر در شکل 8 ب، تغییرات پروفیل چگالی با افزایش r_x در نزدیکی دیواره با

چگالی در نزدیکی دیواره کاهش می‌یابد. مطالعات یانگ [7] نشان می‌دهد که ماکزیمم نوسانات نزدیک به دیواره، در حالت $C_{fw} = 0.5$ نزدیک به دو برابر بیشتر از حالت $C_{fw} = 1.0$ است. به علاوه همان‌گونه که در شکل 6 الف، ب نشان داده شده است، برای حالت زبری دیواره پایین، چگالی سیال تحت تأثیر مقدار r_x و r_y است. زمانی که r_y ثابت باشد با افزایش مقدار r_x میزان نوسانات چگالی دچار دگرگونی می‌شود. برای بررسی دقیق‌تر این موضوع در شکل 8 الف تغییرات پروفیل چگالی در نزدیکی دیواره با بزرگ‌نمایی مناسب نشان داده شده است. مشخص است که با افزایش r_x ، مقدار چگالی در نزدیکی دیواره کاهش یافته است؛ بنابراین حضور زبری‌ها با افزایش r_x باعث ایجاد لایه‌های پایین‌تر چگالی می‌شود. این موضوع در هیچ‌یک از کارهای تحقیقاتی انجام شده توسط یانگ [7] و بینگ کو [8] مورد بررسی قرار نگرفته است و بسیار بااهمیت است. کاهش لایه‌های چگالی در نزدیکی دیواره

الف

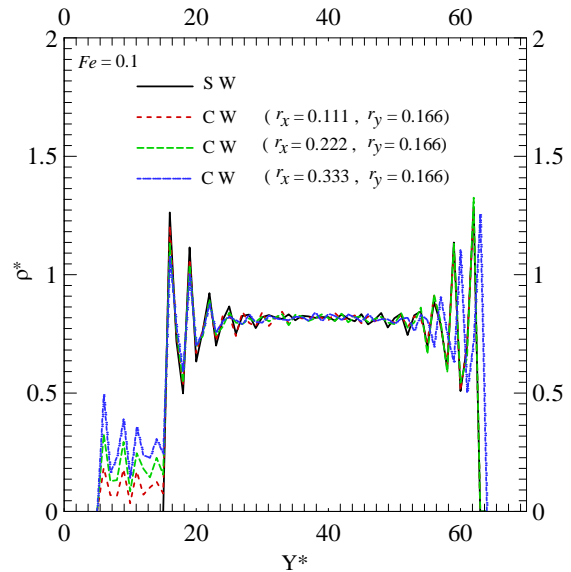


ب

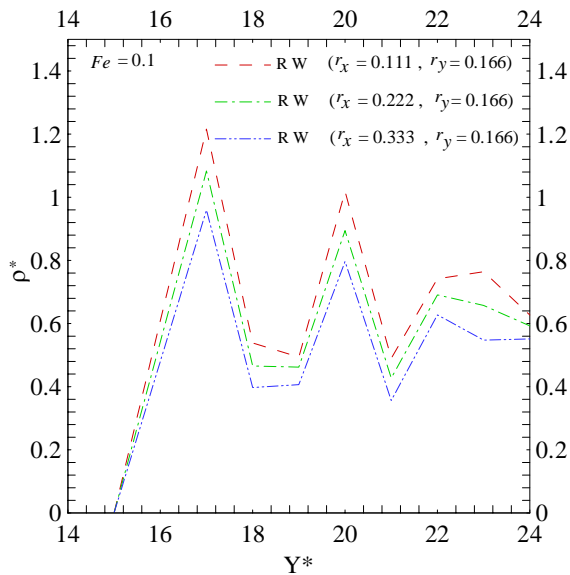


شکل 5 نمودار تغییرات سرعت در عرض نانوکانال با مقادیر مختلف فرورفتگی در دیواره

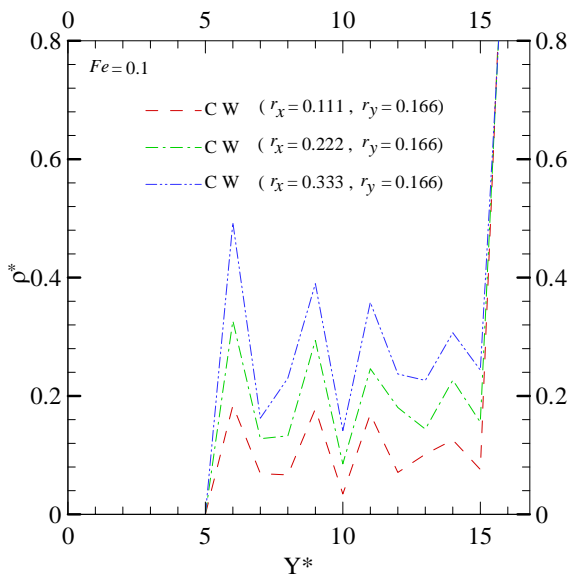
الف



الف

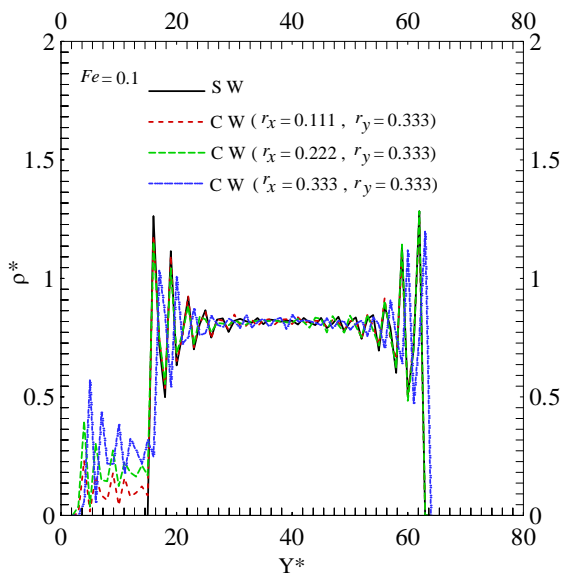


ب



شکل 8 نمودار تغییرات چگالی در نزدیکی دیواره با بزرگنمایی

ب



شکل 7 نمودار تغییرات چگالی در عرض کانال با مقادیر مختلف فرورفتگی در دیواره

بزرگ‌نمایی مناسب ترسیم شده است. مشخص است که حضور فرورفتگی‌ها برخلاف حضور زبرها باعث ایجاد لایه‌های بالاتر چگالی می‌شود. البته این افزایش چگالی فقط و فقط، در محدوده ناحیه فرورفتگی است و تأثیرات چندانی در ادامه عرض نانوکanal نداشته و با نوسانات پروفیل چگالی در حالتی که دیواره‌های بالایی و پایینی صاف می‌باشند یکسان است. این موضوع از جمله تفاوت‌های بین زبری و فرورفتگی در دیواره نانو کانال‌ها است.

از جمله دیگر نتایج مهم به دست آمده از این پژوهش در شکل 9 الف و ب نمایش داده شده است؛ که به بررسی تأثیرات r_x و r_y بر تنش برشی دیواره زبر پایینی و دیواره صاف بالایی پرداخته است. همان‌گونه که قبلاً نیز گفته شد ایجاد زبری بر روی دیواره پایینی باعث افزایش مقاومت اصطکاکی بر روی دیواره پایینی می‌شود؛ بنابراین با افزایش مقدار r_y می‌توانیم این مقاومت اصطکاکی را افزایش دهیم. نتایج نشان داده شده در شکل 9 الف نیز گواهی بر این امر است. چراکه در حالتی که مقدار r_x ثابت باشد با افزایش مقدار r_y

تأثیرات زبری و فرورفتگی بر روی هیدرودینامیک جریان و تنش برشی دیواره پرداخته‌ایم. حضور زبری‌ها و افزایش r_x باعث انحراف ماکزیمم سرعت به سمت دیواره بالایی شده درحالی‌که این پدیده برای دیواره فرورفته رخ نمی‌دهد. همان‌طور که مشاهده شد زبری ایجاد شده بر روی دیواره پایینی به‌طور کلی تأثیرات بیشتری بر روی پروفیل‌های سرعت و چگالی به نسبت فرورفتگی متناظر خود دارد. تغییرات r_x و r_y در زبری‌ها و فرورفتگی‌ها تأثیرات متفاوتی را بر روی پارامترهای مختلف هیدرودینامیکی گذاشته و تأثیرات هرکدام از این دو باید به‌صورت مجزا و دقیق بررسی شود. برای هر دو حالت زبری و فرورفتگی دیواره، با ثابت ماندن r_x و افزایش r_y ، لایه‌های چگالی در نزدیکی دیواره بیشتر می‌شوند و در نتیجه تنش برشی افزایش می‌یابد. ولی در حالتی که مقدار r_y ثابت باشد و مقدار r_x زیاد شود موضوع متفاوت هست و نیاز به بررسی دقیق‌تر است. در حالت زبری با ثابت ماندن r_y و افزایش r_x مقدار چگالی در نزدیکی دیواره پایینی کاهش یافته و در نتیجه تنش برشی دیواره نیز کاهش می‌یابد درحالی‌که در حالت فرورفتگی، با ثابت ماندن r_y و افزایش r_x ، چگالی در نزدیکی دیواره افزایش و در نتیجه تنش برشی دیواره پایینی نیز افزایش می‌یابد.

6- مراجع

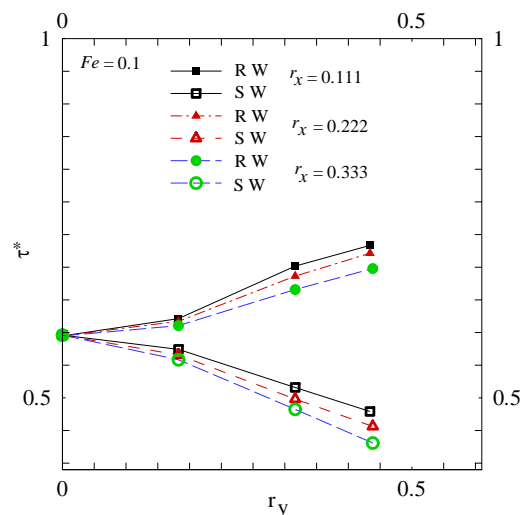
- [1] Y. Zhu, S. Granick, Rate-dependent slip of Newtonian liquid at smooth surface, *physical review letters*, Vol. 87, NO. 9, pp. 1-12, 2001
- [2] V. J. Craig, C. Neto, D. M. Williams, Shear-dependent boundary slip in an aqueous newtonian liquid, *physical review letters*, lett. 87,054504, pp. 1-11, 2001
- [3] D. C. Trethewey, C. D. Meinhart, Apparent fluid slip at hydrophobic microchannel walls, *physics of fluid*, Vol. 14, No. 3, pp. L9-L12, 2002
- [4] N. V. Priezjev, A.A. Darhuber, S.M. Troian, Slip behavior in liquid films on surfaces of patterned wettability: comparison between continuum and molecular dynamics simulations, *physical review*, No. 71, 041608, pp. 1-11, 2005
- [5] 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)
- [6] Y. Zhua, L. Zhangb, X. Lua, L. Lua, X. Wua Flow resistance analysis of nanoconfined water in silt pores by molecular simulations: Effect of pore wall interfacial properties, *Fluid Phase Equilibria*, No. 362 pp. 235- 241, 2014
- [7] S. C. Yang, Effects of surface roughness and interface wettability on nanoscale flow in a nanochannel, *Microfluid Nanofluid*, Vol. 2, No. 6 pp. 501-511, 2006
- [8] 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
- [9] C. Chen, D. Lin and: A molecular dynamics simulation of TIP4P and Lennard-Jones water in nanochannel, *Acta Mechanica*, No. 173, pp. 181-194 2004
- [10] A. Kukaba, Z. Walenta, Z. Peradzynski, Molecular Dynamics Computer Simulation of Water Flows, in Nanochannels, *Bulletin of the polish Academy of Sciences*, Vol. 57, NO. 1, pp. 55-61, 2009
- [11] F. Sofos, T. E. Karakasidis, A. Liakopoulos, Non-equilibrium Molecular Dynamics Investigation of Parameters Affecting Planer Nanochannel Flows, *Journal of Contemporary Engineering Science*, Vol. 2, pp. 283-298, 2009
- [12] A. S. Ziarani, A.A. Mohamad, A Molecular dynamics study of perturbed poiseuille flow in a nanochannel, *Microfluid Nanofluid*, Vol. 2, pp. 12-20, 2005.
- [13] D. Toghraie, A. R. Azimian, Non-Equilibrium Molecular Dynamics Simulation of Poiseuille Flow in a Nanochannel, *Iranian Journal of Mechanical Engineering*, Vol. 1, No. 1, pp. 21-33, 2010. (In Persian)
- [14] G. Nagayama, P. Cheng, Effects of interface wettability on microscale flow by molecular dynamics simulation, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, pp. 501-513, 2003.
- [15] J. L. Barrat, L. Bocquet, Large slip effect at a nonwetting fluid-solid interface, *physical review letters*, lett. 82, p p. 4671-4674, 1999
- [16] 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 Mechcnics*, Vol. 2, No.4, pp. 77-91, 2012. (In Persian)
- [17] M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, *Oxford University Press, Oxford*, 1989.

تغییرات در پروفیل سرعت و چگالی، فقط و فقط، در محدوده فرورفتگی می‌شود و تأثیرات چندانی در ادامه عرض نانوکanal نداشته و با پروفیل چگالی و سرعت در حالتی که دیواره‌های بالایی و پایینی صاف می‌باشند یکسان است؛ بنابراین انتظار می‌رود که تنش برشی بر روی دیواره صاف بالایی نیز، مستقل از این فرورفتگی‌ها باشد. شکل 9 به خوبی این ادعا را اثبات می‌کند و نشان می‌دهد که تنش برشی دیواره صاف با افزایش مقادیر r_x و r_y ثابت می‌ماند؛ از طرفی شکل 9 نشان می‌دهد که با افزایش r_x ، مقدار تنش برشی دیواره زبر پایینی افزایش می‌یابد. دلیل این موضوع را نیز می‌توان در شکل 8 ب جستجو کرد که افزایش r_x باعث افزایش پروفیل چگالی در نزدیکی دیواره شده است. بنابراین تغییرات r_x و r_y در زبری‌ها و فرورفتگی‌ها تأثیرات متفاوتی را بر روی پارامترهای مختلف هیدرودینامیکی گذاشته و تأثیرات هرکدام از این دو باید به‌صورت مجزا و دقیق بررسی شود.

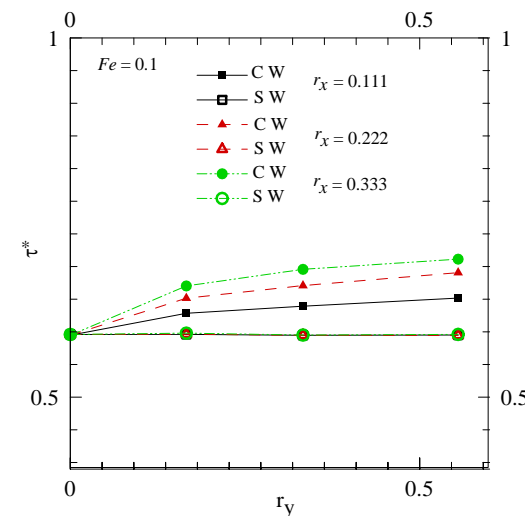
5- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این تحقیق با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی

الف



ب



شکل 9 نمودار تغییرات تنش برشی دیواره در حالت‌های مختلف زبری و فرورفتگی دیواره پایینی

- transfer by molecular dynamics, in *Proceeding of the tenth Conference of Iranian Aerospace Society, Tehran*, 1389. (In Persian)
- [22] P. A. Thompson, M.O. Robbins, Shear flow near solids: epitaxial order and flow boundary conditions, *Phys. Rev*, pp. 6830-6837, 1990
- [23] B.H. Kim, A. Beskok, T. Cagin, Thermal interactions in nanoscale fluid flow, molecular dynamics simulations with solid-liquid interfaces, *Microfluidic-nanofluidic*, Vol. 5, No. 4, pp. 551-559, 2008.
- [24] A. Kamali, A. Kharazmi, Molecular dynamics simulation of surface roughness effects on nanoscale flows, *International Journal of Thermal Sciences*, pp. 226-232, 2011
- [18] J. R. Lukes, D. Y. Li, X. G. Liang, C. L. Tien, Molecular dynamics study of solid thin-film thermal conductivity, *Journal of Heat Transfer*, Vol.122, pp. 536-543, 2000.
- [19] D. X. Xiong, Z. Y. Guo, Z. X. Li, Heat propagation study by molecular dynamics approach, *Journal of Heat Transfer*, pp. 306-311. 1996
- [20] Z. Y. Guo, Z. Y. Wang, M. Chen, Molecular dynamics study on interface properties and interphase transport, in *Proceeding of International Symposium on Heat Transfer Conference, Beijing, China*, pp. 77-89, 2000.
- [21] Darbandi, H. R. Abbasi, M. Saboori, R. Khaledi, Investigation of heat