



مطالعه تاثیر قطر نانوکanal بر پروفیل چگالی در جریان کوئت دوبعدی توسط دینامیک مولکولی

زهرا پهلوان دخت^۱، علی باپیران^۲

^۱ کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک-تبدیل انرژی، دانشگاه پیام نور رشت، ایران pahlevan58@gmail.com

^۲ کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک-تبدیل انرژی، دانشگاه پیام نور رشت، ایران alishz332@yahoo.com

چکیده

در زمینه فناوری نانو، انتقال سیال در مجاری از اهمیت بالایی برخوردار است و با توجه به محدودیت های آزمایشگاهی در تحلیل رفتار جریان در مقیاس نانو از شبیه سازی عددی استفاده می شود. از این رو در این مقاله با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی که یک روش دقیق برای سیستم های مولکولی بر مبنای قانون دوم نیوتن است، به بررسی تاثیر قطر نانوکanal بر روی پروفیل چگالی در جریان کوئت پرداختیم. شبیه سازی های این پژوهش با استفاده از نرم افزار لمپس انجام شده و بر اساس نتایج به دست آمده در این پژوهش مشاهده کردیم در قطر های پایین نانوکanal به دلیل کوچک بودن قطر، تاثیر نیروهای برهم کنش دیواره-سیال در سراسر نانوکanal تقریباً یکنواخت بوده و در نتیجه پروفیل چگالی شکل ثابتی به خود گرفته است و با افزایش قطر نانوکanal تاثیر نیروهای برهم کنش دیواره-سیال در بخش میانی نانوکanal کاهش یافته و در نتیجه پروفیل چگالی شکل ثابتی ندارد.

واژه های کلیدی

دینامیک مولکولی، جریان کوئت، قطر نانوکanal، پروفیل چگالی.

۱- مقدمه

امروزه به دلیل پیشرفت های علمی در زمینه ساخت تجهیزات در مقیاس میکرو و نانو، علم محاسباتی نانو به دلیل محدودیت های آزمایشگاهی، روشی مناسب و کم هزینه برای شبیه سازی و بررسی مشخصات سیستم های مورد نظر می باشد. به عبارت دیگر می توان گفت علم محاسباتی نانو مکمل علم آزمایشگاهی نانو به شمار می آید. تعیین کمیت های جریانی، برای طراحی درست و عملکرد بهینه تجهیزات میکرو و نانو بسیار ضروری است. در مقیاس نانو، ماده از اتم ها و مولکول ها تشکیل شده است، اما در سطح ماکروسکوپی (مقیاسی که اشیا با چشم غیر مسلح قابل رویت می باشد) ماده به عنوان یک محیط پیوسته در نظر گرفته می شود. با پدیدار شدن تجهیزات و تحقیقات در مقیاس نانو و میکرو، معادلات پیوستگی ارزش خود را از دست می دهند. مدل پیوستگی قادر به توصیف عوامل موثر در مقیاس مولکولی و غیر پیوسته مانند چرخش

و تغییر شکل مولکول ها، آثار الکتروستاتیکی در مرز دیواره-سیال نانوکanal ها، پرش دمایی و آثار موئینگی نمی باشد. تمامی این عوامل در سطح مولکولی، در نظر گرفتن برهم کنش های تک تک مولکول ها و رشد زمانی سیستم تا رسیدن به حالت تعادل می باشد. سپس خواص سیستم به صورت آماری قابل محاسبه می باشند. این چنین روش محاسباتی، شبیه سازی دینامیک مولکولی^۱ نامیده می شود که به عنوان یک رویکرد محاسباتی بسیار مهم در بررسی فیزیک جریان در این مقیاس مطرح می شود [1].

در روش شبیه سازی دینامیک مولکولی با اعمال معادلات حرکت نیوتن، مجموعه ای از موقعیت های اتمی به صورت پی در پی بدست می آید. دینامیک مولکولی یک روش تعیینی است به این مفهوم که حالت سیستم در هر زمان آتی را می توان از حالت فعلی آن پیش بینی کرد. در هر گام نیروهای وارد بر اتم ها محاسبه و با موقعیت ها و سرعت های فعلی ترکیب می شود تا موقعیت ها و سرعت های جدید در یک زمان کوتاه جلوتر بدست آید، فرض می شود که نیروی عمل کننده روی هر اتم طی این بازه زمانی ثابت است. بنابراین، اتم هابه موقعیت های جدید جابجا می شود و فرآیند تکرار می شود. به این ترتیب، یک شبیه سازی دینامیک مولکولی، یک مسیر محاسبه می کند که توصیف کننده چگونگی تغییر متغیرهای دینامیکی با زمان است.

جریان کوئت^۲ از جمله جریان های بسیار مهم بوده که در بسیاری از تجهیزات میکرو و نانو بکار می رود. از جمله آنها می توان به جریان هوا بین صفحات هارد دیسک رایانه، پمپ های گریز از مرکز با دور بالا، و برخی میکرو پمپ ها و نانو پمپ ها اشاره کرد. در مقاله حاضر به بررسی تاثیر قطر نانوکanal بر پروفیل چگالی در جریان کوئت توسط شبیه سازی دینامیک مولکولی پرداخته شده است.

در طی سالهای اخیر، مطالعات مهمی در زمینه رفتار جریان درون نانوکanal و تاثیرات گوناگون دیواره و پارامتر های سیال بر میزان لغزش در فصل مشترک دیواره-سیال صورت گرفته است که در ادامه به بررسی برخی از این مطالعات برجسته می پردازیم.

زو و ژو^۳ نشان دادند که به علت لغزش دیواره در مرز، جریان پوازیه کلاسیکی وجود نداشته و پروفیل سرعت در نانوکanal ها متفاوت است [2]. برخی مطالعات نشان می دهند که لغزش تابعی از نیروی برهم کنش مولکولهای دیواره-سیال است. لغزش برای سطوح فوق

¹ Molecular Dynamic Simulation

² Couette

³ Xu and Zhou