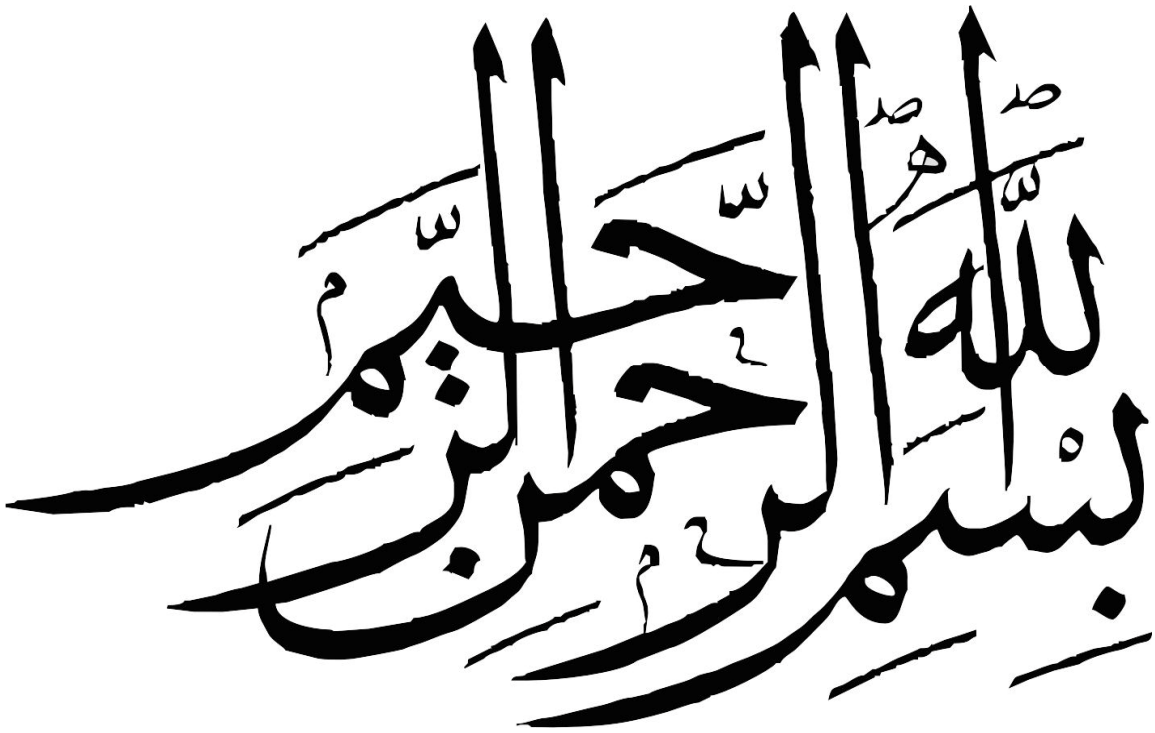
بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه تبریز

دانشکده فنی مهندسی مکانیک

گروه مهندسی مکانیک

رساله

برای دریافت درجه دکتری در رشته مهندسی مکانیک- تبدیل انرژی

عنوان

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جریان نانوسیال درون نانوکانال‌ها در حضور میدان مغناطیسی

استاد راهنما

دکتر حبیب امین‌فر

اساتید مشاور

دکتر محمدعلی جعفری‌زاده

دکتر موسی محمدپورفرد

پژوهشگر

نیّر رزم آراء

مهرماه 93

تقدیم به

پدر و مادر عزیز و همسر مهربانم

تقدیر و تشکر

بر خود لازم می‌دانم تا از زحمات

استاد راهنمای گران‌قدر خود، جناب آقای **دکتر حبیب امین‌فر** به خاطر سعه صبر و رهنمودهای ارزنده علمی و اخلاقیشان در طول دوران مقطع تحصیلی دکتری اینجانب،

اساتید مشاور پایان نامه، جناب آقای **دکتر محمد علی جعفری‌زاده** و جناب آقای **دکتر موسی محمدپورفرد** به خاطر راهنمایی‌های ارزشمندشان،

خانواده عزیز و همسر مهربانم به خاطر حمایت‌های بی دریغشان،

دوستان و کلیه آشنایانی که به هر نحوی مرا در انجام این رساله یاری رسانده‌اند،

تقدیر و تشکر می‌نمایم.

نیّر رزم آراء

نام خانوادگی دانشجو: رزم آراء **نام:** نیّر

عنوان پایان‌نامه: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جریان نانوسیال درون نانوکانال‌ها در حضور میدان مغناطیسی

استاد راهنما: دکتر حبیب امین‌فر

اساتید مشاور: دکتر محمدعلی جعفری‌زاده، دکتر موسی محمدپورفرد

مقطع تحصیلی: دکتری **رشته:** مهندسی مکانیک **گرایش:** تبدیل انرژی **دانشگاه:** تبریز

دانشکده: فنی مهندسی مکانیک **تاریخ فارغ‌التحصیلی:** مهرماه 93 **تعداد صفحه:** 182

واژه‌های کلیدی: دینامیک مولکولی، مقیاس نانو، نانوسیال، برهمکنش، میدان مغناطیسی

چکیده:

حرکت ذرات در مقیاس میکرو و نانو به پارامترهایی بستگی دارد که در سطح مولکولی خود را نشان می‌دهند. بررسی پدیده انتقال ذرات در این مقیاس با استفاده از مدل محیط پیوسته در مکانیک سیالات امکان پذیر نمی‌باشد. علاوه بر این، مطالعه تجربی انتقال ذرات در این مقیاس مستلزم صرف هزینه‌های فراوان می‌باشد. لذا، جریان درون میکرو و نانو کانال‌ها باید در سطح مولکولی تعریف و بررسی شوند. در رساله حاضر جریان نانوسیال درون نانوکانال‌ها به روش دینامیک مولکولی شبیه‌سازی شده و ریزساختار مولکولی سیستم در شرایط مختلف و با اعمال نیروهای مغناطیسی بررسی و مقایسه شده است. این شبیه‌سازی توسط کد منبع باز لمپس به زبان C++ در محیط لینوکس انجام گرفته و تحلیل خواص و ریزساختار سیستم توسط نرم افزارهای جانبی صورت گرفته است. نانوکانال شبیه‌سازی شده شامل نانوسیال متشکل از تعدادی نانوذره جامد درون سیال پایه آرگون می‌باشد که بین دو صفحه مسطح ساکن محصور گردیده است. نانوسیال تحت تأثیر نیروی خارجی فشاری درون نانوکانال جریان می یابد. این نیرو بر تمامی ذرات سیال در جهت جریان اعمال می شود. نتایج بدست آمده نشانگر کلوخگی نانوذرات در جریان نانوسیال درون نانوکانال تحت تأثیر نیروی خارجی می‌باشد. دلیل اصلی این پدیده، نیروی خارجی اعمال شده می‌باشد که باعث حرکت و نزدیک شدن نانوذرات به یکدیگر می‌شود. به محض نزدیک شدن نانوذرات به یکدیگر به دلیل شدت برهمکنش بالای نانوذرات در مقایسه با ذرات سیال پایه، کلوخه‌ای از نانوذرات تشکیل می‌گردد. در هنگام چسبیدن نانوذرات و یا کلوخه‌ای از آن‌ها به یکدیگر، سطح مشترک سیال- نانوذره کاهش یافته و لذا تعداد برخوردهای بین نانوذرات و سیال پایه

کم می‌شود. با کاهش برخوردها انرژی پتانسیل و آنتالپی سیستم کاهش می‌یابد. از اینرو در گام‌های زمانی مربوط به کلوخگی نانوذرات، سیستم به صورت لحظه‌ای از حالت تعادل خارج شده و سطح انرژی سیستم به صورت پله‌ای کاهش می‌یابد. سپس تا زمان کلوخگی بعدی انرژی سیستم دوباره متعادل می‌شود. این روند تا چسبیدن تمامی نانوذرات ادامه می‌یابد به طوری که سیستم در نهایت به مینیمم سطح انرژی رسیده و نوسانات در سیستم افزایش می‌یابد. همچنین در اثر کلوخگی نانوذرات در جریان نانوسیال، لایه بندی ذرات سیال در اطراف سطح نانوذرات کاهش یافته و بیشتر به سمت دیواره‌ها جذب می‌شوند. در ادامه نتایج جالبی از تأثیر عواملی مانند جنس نانوذرات، شعاع قطع، شدت برهمکنش سطح مشترک سیال- نانوذره، نیروی خارجی، تعداد و اندازه نانوذرات بر نرخ کلوخگی نانوذرات گزارش شده است. نانوذرات متشکل از دو جنس مس و پلاتین در سیستم نانوسیالی در دو شعاع قطع مختلف قرار می گیرند. به دلیل مقادیر کم پارامترهای برهمکنش نانوذرات مس، این نانوذرات در مقایسه با نانوذرات پلاتین سریعتر کلوخه می شوند. همچنین با افزایش شعاع قطع کلوخگی نانوذرات به تأخیر می افتد. افزایش در نیروی خارجی باعث افزایش ممنتم ذرات نانوسیال شده و کلوخگی نانوذرات سریعتر اتفاق می افتد. تأثیر افزودن لایه پوشاننده در سطح نانوذرات با افزایش شدت برهمکنش سطح مشترک سیال- نانوذره انجام می پذیرد به طوریکه با افزایش این پارامتر نانوذرات در مدت زمان بیشتری کلوخه می شوند. همچنین تغییر در کسرحجمی نانوذرات از طریق تغییر در تعداد و اندازه نانوذرات صورت می گیرد. با افزایش تعداد و اندازه نانوذرات، کلوخه نانوذرات در مدت زمان کمتری تشکیل می گردد. در نهایت با اعمال برهمکنش‌های دوقطبی- دوقطبی، به نانوذرات خاصیت مغناطیسی داده شده و ریزساختار جریانی نانوسیال مغناطیسی بررسی می‌گردد. نتایج نشان می‌دهند که به دلیل نوع برهمکنش نانوذرات مغناطیسی، نرخ کلوخگی در جریان نانوسیال مغناطیسی افزایش می‌یابد. همچنین با اعمال میدان مغناطیسی یک‌بار در جهت جریان و بار دیگر در جهت عمود بر جریان، تأثیر نیروی مغناطیسی خارجی بر نرخ کلوخگی بررسی می‌گردد. نتایج بیانگر کاهش نرخ کلوخگی با اعمال میدان مغناطیسی در هر دو جهت می‌باشد. نتیجه قابل توجه دیگر، پایداری بیشتر نانوذرات مغناطیسی با اعمال نیروی مغناطیسی در جهت عمود بر جریان می‌باشد.

فهرست مطالب

فصل اول: مقدمه و پیشینه پژوهش 1

1-1 مقدمه 2

2-1 شبیه‌سازی دینامیک مولکولی 4

3-1 پیشینه پژوهش 7

1-3-1 جریان سیال در مقیاس نانو 7

2-3-1 نانوسیالات 15

1-2-3-1 شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانوسیالات 17

2-2-3-1 جریان نانوسیال درون نانوکانال 19

3-3-1 سیالات مغناطیسی 24

فصل دوم: مبانی و روش‌ها 31

1-2 مقدمه 32

2-2 روش‌های شبیه‌سازی سیستم‌های مولکولی 32

1-2-2 کد منبع باز لمپس 35

3-2 برهمکنش‌های بین مولکولی 36

1-3-2 تابع پتانسیل لنارد- جونز 38

2-3-2 پتانسیل قطع شده 42

3-3-2برهمکنش بین سیال و سطح جامد 43

2- 4 مکان و سرعت اولیه ذرات 45
2-4-1 انتخاب پیکربندی اولیه 45
2-4-2 سرعت‌های اولیه 48
2- 5 شرایط مرزی 50
2-6 انتگرال‌گیری زمانی 54
2-6-1 الگوریتم ورله 55
2-6-2 الگوریتم سرعت ورله 56
2- 7 مجموع‌های آماری و دماپاهای سیستم 57
2-7-1 دماپاها یا مجموع‌های آماری دما ثابت 58
2-7-1-1 مقیاس‌بندی سرعت 58
2-8 تعادل سیستم 60
2-8-1 نمونه برداری 61
2-8-2 محاسبه متوسط آماری کمیت‌های ترمودینامیکی 62
2-8-2-1 دما 63
2-8-2-2 انرژی کل و آنتالپی 63
2-8-2-3 طول لغزش 64
2-8-2-4 تانسور تنش 66
2-9 معادلات ذرات مغناطیسی 67

2-10 پارامترهای حل جریان 69

فصل سوم: نتایج 71

3-1 نتایج تحلیل دینامیک مولکولی جریان سیال درون نانوکانال 72

3-1-1 اعتباردهی نتایج با سیال آرگون در جریان کوئت 72

3-1-2 نتایج جریان پوآزوی سیال آرگون درون نانوکانال 74

3-1-2-1 جزئیات شبیه‌سازی 74

3-1-2-2 توزیع انرژی سیستم 79

3-1-2-3 پروفیل چگالی و سرعت 82

3-2 نتایج تحلیل دینامیک مولکولی جریان نانوسیال درون نانوکانال 87

3-2-1 ریزساختار مولکولی جریان نانوسیال 87

3-2-2 تأثیر کلوخگی بر لایه بندی سیال 93

3-2-3 عوامل موثر در پدیده کلوخگی 95

3-2-3-1 تأثیر شعاع قطع و جنس نانوذرات 95

3-2-3-2 تأثیر نیروی خارجی 107

3-2-3-3 تأثیر شدت برهمکنش سطح مشترک سیال- نانوذره 115

3-2-3-4 تأثیر اندازه نانوذرات 120

3-2-3-5 تأثیر تعداد نانوذرات 126

3-3- اثرات مغناطیسی در جریان نانوسیال درون نانوکانال 130

3-3-1 نانوسیال با نانوذرات مغناطیسی 130

3-3-2 تأثیر میدان مغناطیسی خارجی بر کلوخگی 137

3-4 نتیجه گیری 144

3-5 پیشنهادات برای ادامه کار 147

مراجع 149

ضمایم 157

ضمیمه الف: تابع توزیع ماکسول- بولتزمن 158

ضمیمه ب: نمونه کدهای ورودی لمپس 165

ضمیمه ج: مقالات مستخرج از نتایج رساله 182

فهرست شکل‌ها

شکل 1- 1. فلوچارت کلی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی 6

شکل 1- 2 تغییرات طول لغزش به صورت تابعی از شدت برهمکنش سیال دیوار[26] 8

شکل 1- 3. هندسه جریان کوئت و پروفیل سرعت جریان [27] 9

شکل 1- 4. (الف) طرحواره‌ای جریان پوآزوی سیال آرگون درون نانوکانال (ب) توزیع چگالی سیال (پ) پروفیل سرعت سیال (ت) تنش برشی سیال [39] 11

شکل 1- 5. پروفیل سرعت و دمای جریان کوئت با دیوار شبکه ثابت و دیوار حرارتی فعال[41] 13

شکل 1- 6. (الف) طرحواره‌ای مدل جریان سیال درون نانوکانال (ب) توزیع انرژی برای نیروی سینوسی (پ) توزیع انرژی برای نیروی پالسی [43] 14

شکل 1- 7. لایه جذبی‌اتم‌های آرگون حول نانوذره [68] 19

شکل 1- 8. (الف) مدل جریان نانوسیال با آرگون مایع و نانوذرات صفحات تخت با اتم‌های مس (ب) توزیع آنتالپی سیستم در مرحله آسایش [69] 20

شکل 1- 9. (الف) مدل نانوکانال تحت (ب) توزیع انرژی در مرحله آسایش[70] 21

شکل 1- 10. نانوسیال تحت جریان برشی با سرعت $10m/s$ (الف) سرعت انتقالی و (ب) سرعت چرخشی نانوذره نزدیک دیوار 23

شکل 1- 11. طرحواره‌ای از بارهای اعمال شده بر روی جعبه شبیه‌سازی[84] 26

شکل 1- 12. تغییرات انرژی پتانسیل سیالات مغناطیسی 27

شکل 1- 13. پیشرفت زمانی ریزساختار میکروکپسول تحت تأثیر میدان مغناطیسی[86] 28

شکل 2- 1. روش‌های مدل‌سازی سیستم‌های نانو و درجه معین بودن آن‌ها 34

شکل 2- 2. روش‌های مدل‌سازی در مقیاس‌های طولی مختلف 35

شکل 2- 3 پتانسیل لنارد- جونز برحسب فاصله بین مولکولی ($\varepsilon = \sigma = 1$) [11] 40

شکل2- 4. تقسیم پتانسیل لنارد- جونز به قسمت‌های جاذبه و دافعه[11]..... 41

شکل 2- 5. نمایی از انواع ساختارهای شبکه‌ای استاندارد 46

شکل 2- 6. انواع ساختارهای مختلف شبکه FCC 47

شکل 2- 7. طرحواره‌ای از شرط مرزی تناوبی در یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی[11] 50

شکل 2- 8. طرحواره‌ای از جزئیات روش فهرست همسایه ورله[11]..... 52

شکل 2- 9. قفسه‌های نمونه‌گیری خواص در یک نانوکانال به صورت دو و سه‌بعدی 62

شکل 2- 10. طرحواره‌ای از مفهوم طول لغزش 65

شکل 3- 1. طرحواره‌ای از جریان کوئت سیال آرگون در یک نانوکانال دوبعدی [26] 72

شکل 3- 2. مقایسه پروفیل سرعت و لغزش/ عدم لغزش سیال (الف) $\epsilon_{wf} = 4.0\epsilon$ (ب) $\epsilon_{wf} = 0.4\epsilon$ 73

شکل 3- 3. طرحواره‌ای از مدل شبیه‌سازی جریان پوآزوی درون نانوکانال 75

شکل 3- 4. انرژی کل و انرژی پتانسیل سیستم برای نانوکانال با مدل (الف) پتانسیل لنارد- جونز 6-9 (ب) پتانسیل لنارد- جونز 6-12 (پ) پتانسیل لنارد- جونز هموار 81

شکل 3- 5. انرژی جنبشی سیستم برای سه نوع مدل تابع پتانسیل برهمکنش بین مولکولی مختلف 82

شکل 3- 6. پروفیل چگالی سیال برای نانوکانال با مدل (الف) پتانسیل لنارد- جونز 6-9 (ب) پتانسیل لنارد- جونز 6-12 (پ) پتانسیل لنارد- جونز هموار 84

شکل 3- 7. پروفیل سرعت سیال برای نانوکانال با مدل (الف) پتانسیل لنارد- جونز 6-9 (ب) پتانسیل لنارد- جونز 6-12 (پ) پتانسیل لنارد- جونز هموار 87

شکل 3- 8. طرحواره‌ای از جریان نانوسیال تحت نیروی خارجی درون نانوکانال 88

شکل 3- 9. چیدمان اولیه سیستم مدل نانوسیالی درون نانوکانال 88

شکل 3- 10. همگرایی آنتالپی سیستم در مرحله تعادل..... 90

شکل 3- 11. ریزساختار جریان نانوسیال تحت نیروی خارجی ثابت درون نانوکانال 92

شکل 3- 12. تغییر لایه بندی ذرات سیال در سطح مشترک سیال- جامد در طول پدیده کلوخگی..... 93

شکل 3- 13. پیشرفت زمانی آنتالپی سیستم در طول مرحله تعادل برای (الف) ذرات مس (ب) ذرات پلاتین 96

شکل 3- 14. ریزساختار سیستم نانوسیالی حاوی نانوذرات و دیوار جامد از جنس مس درون سیال پایه آرگون در شعاع قطع $r_c = 2.2\sigma$ در گام‌های زمانی مختلف..... 98

شکل 3- 15. ریزساختار سیستم نانوسیالی حاوی نانوذرات و دیوار جامد از جنس پلاتین درون سیال پایه آرگون در شعاع قطع $r_c = 2.2\sigma$ در گام‌های زمانی مختلف..... 99

شکل 3- 16. ریزساختار سیستم نانوسیالی حاوی نانوذرات و دیوار جامد از جنس پلاتین درون سیال پایه آرگون در شعاع قطع $r_c = 2.5\sigma$ در گام‌های زمانی مختلف.....100

شکل 3- 17. ریزساختار سیستم نانوسیالی حاوی نانوذرات و دیوار جامد از جنس مس درون سیال پایه آرگون در شعاع قطع $r_c = 2.5\sigma$ در گام‌های زمانی مختلف.....101

شکل 3- 18. توزیع آنتالپی در طول 2×10^6 گام زمانی برای سیستم نانوسیالی حاوی (الف) ذرات جامد از جنس پلاتین با شعاع قطع $r_c = 2.2\sigma$ (ب) ذرات جامد از جنس مس با شعاع قطع $r_c = 2.2\sigma$ (پ) ذرات جامد از جنس پلاتین با شعاع قطع $r_c = 2.5\sigma$ (ت) ذرات جامد از جنس مس با شعاع قطع $r_c = 2.5\sigma$ 105

شکل 3- 19. پیشرفت زمانی انرژی سیستم نانوسیالی حاوی ذرات پلاتین با شعاع قطع $r_c = 2.5\sigma$ (الف) انرژی جنبشی (ب) انرژی پتانسیل (پ) انرژی کل 106

شکل 3- 20. ریزساختار نانوسیال تحت جریان پوآزوی با نیروی $F_{ext} = 0.1pN$ 108

شکل 3-21. ریزساختار نانوسیال تحت جریان پوآزوی با نیروی $F_{ext} = 0.2pN$ 108

شکل 3- 22. ریزساختار نانوسیال تحت جریان پوآزوی با نیروی $F_{ext} = 0.3pN$ 109

شکل 3- 23. توزیع آنتالپی نانوسیال تحت جریان پوآزوی با نیروی (الف) $F_{ext} = 0.1pN$ (ب) $F_{ext} = 0.2pN$ (پ) $F_{ext} = 0.3pN$.....111

شکل 3- 24. توزیع چگالی ذرات سیال در گام‌های زمانی مختلف پس از رسیدن به تعادل برای (الف) سیال تک اتمی آرگون (ب) نانوسیال آرگون- مس 112

شکل 3- 25. تأثیر افزودن نانوذرات بر توزیع سرعت ذرات سیال در گام‌های زمانی انتهایی با نیروی (الف) $F_{ext} = 0.1pN$ (ب) $F_{ext} = 0.2pN$ (پ) $F_{ext} = 0.3pN$ 114

شکل 3- 26. (الف) ریزساختار جریان نانوسیال (ب) آنتالپی بی‌بعد سیستم در $\varepsilon_{NP-L} = 1$ 117

شکل 3- 27. (الف) ریزساختار جریان نانوسیال (ب) آنتالپی بی‌بعد سیستم در $\varepsilon_{NP-L} = 1.5$ 118

شکل 3- 28. (الف) ریزساختار جریان نانوسیال (ب) آنتالپی بی‌بعد سیستم در $\varepsilon_{NP-L} = 2$ 118

شکل 3- 29. آنتالپی بی‌بعد در زمان‌های کلوخگی برای سیستم‌های نانوسیالی با $\varepsilon_{NP-L} = 1$، $\varepsilon_{NP-L} = 1.5$ و $\varepsilon_{NP-L} = 2$.....119

شکل 3- 30. پیشرفت زمانی (الف) ریزساختار سیستم (ب) آنتالپی سیستم برای نانوسیال حاوی چهار نانوذره با $d_{np} = 3\sigma$.....121

شکل 3- 31. پیشرفت زمانی (الف) ریزساختار سیستم (ب) آنتالپی سیستم برای نانوسیال حاوی چهار نانوذره با $d_{np} = 4\sigma$.....122

شکل 3- 32. پیشرفت زمانی (الف) ریزساختار سیستم (ب) آنتالپی سیستم برای نانوسیال حاوی چهار نانوذره با $d_{np}=5\sigma$ 123

شکل 3- 33. آنتالپی سیستم در زمان‌های کلوخگی برای نانوسیال حاوی چهار نانوذره با قطرهای $d_{np}=3\sigma, d_{np}=4\sigma, d_{np}=5\sigma$ 124

شکل 3- 34. توزیع چگالی ذرات سیال در زمان تعادل کلوخگی برای نانوسیال حاوی چهار نانوذره با قطرهای $d_{np}=3\sigma, d_{np}=4\sigma, d_{np}=5\sigma$ 125

شکل 3- 35. توزیع سرعت ذرات سیال در زمان تعادل کلوخگی برای نانوسیال حاوی چهار نانوذره با قطرهای $d_{np}=3\sigma, d_{np}=4\sigma, d_{np}=5\sigma$ 126

شکل 3- 36. پیشرفت زمانی (الف) ریزساختار سیستم (ب) آنتالپی سیستم برای نانوسیال حاوی سه نانوذره با $d_{np}=5\sigma$ 127

شکل 3- 37. پیشرفت زمانی (الف) ریزساختار سیستم (ب) آنتالپی سیستم برای نانوسیال حاوی دو نانوذره با $d_{np}=5\sigma$ 128

شکل 3- 38. آنتالپی سیستم در زمان‌های کلوخگی برای نانوسیال حاوی دو، سه و چهار نانوذره با قطر $d_{np}=5\sigma$ ... 128

شکل 3- 39. چگالی ذرات سیال در زمان تعادل کلوخگی برای نانوسیال حاوی دو، سه و چهار نانوذره با قطر $d_{np}=5\sigma$ 129

شکل 3- 40. سرعت ذرات سیال در زمان تعادل کلوخگی برای نانوسیال حاوی دو، سه و چهار نانوذره با قطر $d_{np}=5\sigma$ 130

شکل 3- 41. طرحواره‌ای از جریان نانوسیال حاوی نانوذرات مغناطیسی 131

شکل 3- 42. توزیع آنتالپی سیستم در مرحله تعادل برای نانوسیال حاوی (الف) نانوذرات مغناطیسی (ب) نانوذرات غیرمغناطیسی 132

شکل 3- 43. پیشرفت زمانی (الف) ریزساختار سیستم (ب) آنتالپی سیستم برای نانوسیال حاوی نانوذرات مغناطیسی .. 134

شکل 3- 44. پیشرفت زمانی (الف) ریزساختار سیستم (ب) آنتالپی سیستم برای نانوسیال غیرمغناطیسی 136

شکل 3- 45. پیشرفت زمانی (الف) ریزساختار سیستم (ب) آنتالپی سیستم برای نانوسیال مغناطیسی با $F^*_{Mag,x} = 0.016$ 140

شکل 3- 46. پیشرفت زمانی (الف) ریزساختار سیستم (ب) آنتالپی سیستم برای نانوسیال مغناطیسی با $F^*_{Mag,y} = 0.016$ 142

شکل 3- 47. آنتالپی سیستم در زمان‌های کلوخگی برای نانوسیال معمولی، نانوسیال مغناطیسی و نانوسیال مغناطیسی با $F^*_{Mag,x} = 0.016$ و $F^*_{Mag,y} = 0.016$ 143

شکل 3- 48. توزیع سرعت ذرات سیال در زمان تعادل کلوخگی برای نانوسیال معمولی، نانوسیال مغناطیسی و نانوسیال مغناطیسی با $F^*_{Mag,x} = 0.016$ و $F^*_{Mag,y} = 0.016$ 144

فهرست جداول

جدول 2- 1. پارامترهای موجود در پتانسیل لنارد- جونز در مواد مختلف[11]..... 39

جدول 2- 2. مقادیر بی‌بعد مشخصه‌ها 70

جدول 3- 1. جزئیات شبیه‌سازی جریان نانوسیال 89

جدول 3- 2. مقادیر طول لغزش برای جریان پوآزوی سیال تک اتمی آرگون و نانوسیال آرگون- مس در مقادیر مختلف نیروی خارجی 115

جدول 3- 3. پارامترهای جریان نانوسیال تحت میدان مغناطیسی 137

فهرست نمادها

نمادهای لاتین

شتاب	a
درجه آزادی یا بعد سیستم	d
انرژی داخلی کل	E_{total}
نیروی بین مولکولی	F
فاصله بین دو دیوار	h
ممان اینرسی	I
ثابت استفان بولتزمن $\left(3.18\times10^{-23}J/K\right)$	K_B
انرژی جنبشی	KE
بعد مشخصه کانال	L
جرم ذره	m
تعداد ذرات	N
بردار عمود	$\vec{n}$
فشار سیستم	P
انرژی پتانسیل	PE
بردار مکان	r
فاصله بین اتم i ام و j ام	r_{ij}
شعاع قطع	r_c
مؤلفه های تنش	S_{ab}
دما	T
دمای واقعی	T_A
دمای مورد نظر	T_D
زمان	t
سرعت دیوار متحرک	U
حجم	V
سرعت	v

نمادهای یونانی

نرخ برشی	$\dot{\gamma}$
گشتاور مغناطیسی	$\vec{\tau}_{ij}$

پتانسیل برهمکنش	Φ
فاصله بین مولکولی (nm)	σ
عمق انرژی (J)	ε
عدد تصادفی	ξ
چگالی عددی	ρ
ضریب انرژی پتانسیل رطوبت دوستی سطح	α
ضریب انرژی پتانسیل رطوبت گریزی سطح	β
ضریب مقیاس بندی سرعت	λ
مسافت آزاد بین مولکولی	λ
زمان مشخصه	τ
سرعت زاویه‌ای	ω
ممان مغناطیسی	μ
نفوذ پذیری مغناطیسی خلاء $(4\pi\times10^{-7}H/m)$	μ_0
کمیت ماکروسکوپی	κ

زیرنویس‌ها

اتم i ام	i
اتم j ام	j
سیال- جامد	sf
سیال- دیوار	wf
کل	$total$

بالانویس‌ها

دوقطبی	dip
مغناطیسی	mag
لنارد- جونز	LJ
کمیت بی‌بعد	$*$

فصل اول: مقدمه و پیشینه پژوهش