دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده مهندسی مکانیک

بررسی طول لغزش در نانوکانال‌های صاف و زبر به کمک روش شبیه سازی دینامیک مولکولی

پایان‌نامه کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک

امید اطلس چیان

استاد راهنما

دکتر احمدرضا عظیمیان

۱۳۹۱

بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده مهندسی مکانیک

بررسی طول لغزش در نانوکانال‌های صاف و زبر به کمک روش شبیه سازی دینامیک مولکولی

پایان‌نامه کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک

امید اطلس چیان

استاد راهنما

دکتر احمدرضا عظیمیان

۱۳۹۱

پیش از هر چیز بر خود لازم می‌دانم که از همه عزیزانی که در این مسیر در کنار من بودند صمیمانه تشکر و سپاسگزاری نمایم.
از جناب آقای دکتر عظیمیان که هرگونه کمک را از اینجانب در هر زمینه ای دریغ نکردند و همواره پشتیبان بنده بودند، کمال سپاسگزاری را دارم.
از جناب آقای دکتر طغرایی که تجربیات خود را در اختیار بنده قرار دادند،
از دوستان عزیزم در گروه دینامیک مولکولی(MD)، قطب CFD که و سایر دوستانی که با حضور گرمشان پیمودن این راه را بر من آسان نمودند،
و نیز از کلیه عزیزانی که به هر عنوان در این تحقیق در کنار من بودند، کمال سپاسگزاری را دارم.

کلیه‌ی حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و نوآوری‌های ناشی از تحقیق موضوع این پایان‌نامه (رساله) متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان است.

تقدیم به:

پدر بزرگوار و مادر عزیزم

که پس از خدای یکتا تمام داشته‌های خود را مدیون آنانم

و خواهر دلبندم

که همواره در کنارم بوده است

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست مطالب ..... هشت

چکیده ۱

فصل اول: مقدمه

۱-۱ فناوری نانو ۳

۱-۲ روش های حل مسائل ۴

۱-۲-۱ روش های تحلیلی ۴

۱-۲-۲ روش های تجربی ۵

۱-۲-۳ روش های عددی ۵

۱-۳ نرم افزارهای موجود در شبیه سازی دینامیک مولکولی ۷

۱-۴ پدیده لغزش ۸

۱-۴-۱ طول لغزش در جریان ۱۰

۱-۵ هدف و اهمیت موضوع ۱۳

۱-۶ مروری بر کارهای انجام شده ۱۴

۱-۷ ارتباط پژوهش حاضر با کارهای قبلی ۱۹

فصل دوم: شبیه سازی دینامیک مولکولی

۲-۱ شبیه سازی های رایانه ای ۲۲

۲-۲ شبیه سازی دینامیک مولکولی ۲۲

۲-۲-۱ مقدمه ۲۲

۲-۲-۲ تعریف ۲۳

۲-۲-۳ مقایسه دینامیک مولکولی با روش های دیگر ۲۴

۲-۳ روند حل مساله به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی ۲۶

۲-۳-۱ شرایط اولیه ۲۶

۲-۳-۲ تقابل بین ذرات ۲۸

۲-۳-۳ تابع پتانسیل ۳۰

۲-۳-۴ الگوریتم های انتگرالگیری زمانی ۳۲

۲-۳-۵ شرایط مرزی ۳۴

۲-۳-۶ مشکلات شبیه سازی دینامیک مولکولی ۳۴

۲-۴ انسامبل ها در شبیه سازی دینامیک مولکولی ۳۵

۲-۴-۱ انواع ترموستات های دمایی ۳۶

فصل سوم: معرفی کار حاضر

۳-۱ شرایط حاکم ۳۸

۳-۱-۱ شرایط اولیه ۳۹

۳-۱-۲ شرایط مرزی ۳۹
۳-۱-۳ شرایط کلی ۳۹
۳-۲ تعریف مساله ۴۱
۳-۲-۱ ملاحظات جنبی ۴۱
فصل چهارم: نتایج
۴-۱ صحت سنجی ۴۵
۴-۲ شبیه سازی جریان در کانال صاف ۴۸
۴-۲-۱ اثر سرعت دیواره ۴۹
۴-۳ اثر ارتفاع کانال در جریان کوئت ۵۲
۴-۴ اثر تقابل دیواره و سیال ۶۵
۴-۵ شبیه سازی جریان در کانال زبر ۶۷
۴-۵-۱ اثر سرعت دیواره ۶۷
۴-۵-۲ اثر ارتفاع کانال در جریان پوازیه ۷۳
۴-۵-۳ اثر پریود زبری ۷۷
۴-۵-۴ اثر ارتفاع زبری ۸۱
۴-۵-۵ اثر تقابل دیواره و سیال ۸۵
۴-۵-۶ اثر اندازه اتمی ۸۸
فصل پنجم: جمع بندی
۵-۱ نتیجه گیری ۹۳
۵-۲ پیشنهادات ۹۵
منابع ۹۷

فهرست شکل‌ها

شکل ۱-۱- رژیم های مختلف جریان بر حسب عدد نادسن[۹]..... ۹
شکل ۱-۲- مولکول در کنار دیواره..... ۹
شکل ۱-۳- الف) جریان پوازیه همراه با لغزش در دیواره پایین ب) جریان کوئت و لغزش در دیواره بالا..... ۱۰
شکل ۱-۴- دیواره فانتوم به همراه ذرات فانتوم در لایه میانی..... ۱۲
شکل ۱-۵- تغییرات طول لغزش بر حسب ارتفاع زبری در تقابل مختلف سیال و دیواره..... ۱۷
شکل ۱-۶- تغییرات طول لغزش با نرخ برشی..... ۱۸
شکل ۱-۷- تغییرات طول لغزش مطلق (بالا) و نسبی (پایین) با افزایش ارتفاع کانال..... ۱۹
شکل ۲-۱- روش دینامیک مولکولی در مقایسه با روش مونت کارلو [۳۲]..... ۲۶
شکل ۲-۲- روش های مختلف مدل سازی از مقیاس های حالت پیوسته تا مولکولی آزاد [۳۳]..... ۲۷
شکل ۲-۳- روندنمای مراحل یک شبیه سازی دینامیک مولکولی..... ۲۹
شکل ۲-۴- تابع پتانسیل لنارد-جونز بر حسب فاصله دو ذره..... ۳۱
شکل ۲-۵- تابع پتانسیل لنارد-جونز و نیروی تقابل بین ذرات..... ۳۱
شکل ۲-۶- مقایسه تابع لنارد-جونز با نتایج تجربی برای گاز آرگون..... ۳۲
شکل ۲-۷- شرط مرزی پریودیک..... ۳۵
شکل ۳-۱- روندنمای پژوهش حاضر..... ۴۲
شکل ۳-۲- شماتیک ارتفاع معادل زبری جهت محاسبه طول لغزش..... ۴۳
شکل ۳-۳- شماتیک شرایط مرزی سرعت لغزش، عدم لغزش و قفل شدن..... ۴۳
شکل ۴-۱- مقایسه پروفیل های سرعت نتایج مرجع[۲۲] و کار حاضر، خطوط نقطه چین مربوط به کار حاضر ۴۷
شکل ۴-۲- نتایج طول لغزش مرجع [۲۲] و کار حاضر به همراه منحنی های تقریب زده شده..... ۴۸
شکل ۴-۳- شماتیک کانال صاف به همراه مختصات و دامنه محاسباتی..... ۵۰
شکل ۴-۴- اثر سرعت دیواره بر پروفیل های سرعت در جریان کوئت..... ۵۱
شکل ۴-۵- تغییرات طول لغزش در اثر مقادیر مختلف سرعت دیواره در ارتفاع کانال ۱۰۰..... ۵۲
شکل ۴-۶- مقایسه پروفیل های سرعت در ارتفاع کانال ۴۰ (شکل راست) و ۲۰۰(شکل چپ)..... ۵۳
شکل ۴-۷- اثر تغییرات ارتفاع کانال در پروفیل های سرعت با سرعت دیواره ۰/۲..... ۵۴
شکل ۴-۸- اثر تغییرات ارتفاع کانال در پروفیل های سرعت با سرعت دیواره ۰/۵..... ۵۴
شکل ۴-۹- اثر تغییرات ارتفاع کانال در پروفیل های سرعت با سرعت دیواره ۱/۰..... ۵۵
شکل ۴-۱۰- اثر تغییرات ارتفاع کانال در پروفیل های سرعت با سرعت دیواره ۲..... ۵۵

شکل ۴-۱۱- اثر تغییرات ارتفاع کانال در پروفیل های سرعت با سرعت دیواره ۴..... ۵۶
شکل ۴-۱۲- اثر تغییرات ارتفاع کانال در پروفیل های سرعت با سرعت دیواره ۸..... ۵۷
شکل ۴-۱۳- اثر تغییرات ارتفاع کانال در طول لغزش نسبی (راست) و سرعت لغزشی(چپ) در سرعت دیواره ۵۸۰/۲
شکل ۴-۱۴- اثر تغییرات ارتفاع کانال در طول لغزش مطلق در سرعت دیواره ۰/۲..... ۵۸
شکل ۴-۱۵- اثر تغییرات ارتفاع کانال در طول لغزش(راست) و سرعت لغزشی(چپ) در سرعت دیواره ۰/۵..... ۵۹
شکل ۴-۱۶- اثر تغییرات ارتفاع کانال در طول لغزش مطلق در سرعت دیواره ۰/۵..... ۵۹
شکل ۴-۱۷- اثر تغییرات ارتفاع کانال در طول لغزش (راست) و سرعت لغزشی (چپ) در سرعت دیواره ۱..... ۶۰
شکل ۴-۱۸- اثر تغییرات ارتفاع کانال در طول لغزش مطلق در سرعت دیواره ۱..... ۶۱
شکل ۴-۱۹- اثر تغییرات ارتفاع کانال در طول لغزش (راست) و سرعت لغزشی (چپ) در سرعت دیواره ۲..... ۶۱
شکل ۴-۲۰- اثر تغییرات ارتفاع کانال در طول لغزش مطلق در سرعت دیواره ۲..... ۶۱
شکل ۴-۲۱- اثر تغییرات ارتفاع کانال در طول لغزش در سرعت دیواره ۴..... ۶۲
شکل ۴-۲۲- اثر تغییرات ارتفاع کانال در طول لغزش مطلق در سرعت دیواره ۴..... ۶۲
شکل ۴-۲۳- اثر تغییرات ارتفاع کانال در طول لغزش در سرعت دیواره ۸..... ۶۳
شکل ۴-۲۴- اثر تغییرات ارتفاع کانال در طول لغزش مطلق در سرعت دیواره ۸..... ۶۳
شکل ۴-۲۵-اثر تغییرات ارتفاع کانال به همراه نغییرات سرعت دیواره بر طول لغزش در جریان کوئت..... ۶۴
شکل ۴-۲۶-طول لغرش نسبی با تغییرات سرعت دیواره و به ازای ارتفاع های مختلف کانال..... ۶۵
شکل ۴-۲۷- اثر تقابل دیواره و سیال بر پروفیل های سرعت کانال صاف جریان پوازیه با **F*=0.05**..... ۶۶
شکل ۴-۲۸- اثر تقابل دیواره و سیال بر مقادیر طول لغزش کانال صاف..... ۶۷
شکل ۴-۲۹- شماتیک انواع زبری های بکارگرفته شده درکانال زبر..... ۶۸
شکل ۴-۳۰- اثر تغییرات سرعت دیواره بر جریان کوئت در کانال زبر مستطیلی با هر دو دیواره زبر(راست) ۶۹
شکل ۴-۳۱- اثر تغییرات سرعت دیواره بر جریان کوئت در کانال زبر مثلثی با هر دو دیواره زبر (راست)..... ۶۹
شکل ۴-۳۲- اثر تغییرات سرعت دیواره بر جریان کوئت در کانال زبر مثلثی راست با هر دو دیواره زبر (راست).... ۷۰
شکل ۴-۳۳- اثر تغییرات سرعت دیواره بر جریان کوئت در کانال زبر مثلثی چپ با هر دو دیواره زبر (راست) ۷۱
شکل ۴-۳۴- تغییرات طول لغزش با سرعت دیواره در انواع زبری با یک دیواره زبر و حالت کانال صاف..... ۷۲
شکل ۴-۳۵- تغییرات طول لغزش با سرعت دیواره در انواع زبری با هر دو دیواره زبر و حالت کانال صاف ۷۲
شکل ۴-۳۶- اثر ارتفاع بر پروفیل سرعت در جریان پوازیه به ازای F*=0.005..... ۷۴
شکل ۴-۳۷- اثر ارتفاع بر پروفیل سرعت در جریان پوازیه به ازای F*=0.01..... ۷۴
شکل ۴-۳۸- اثر ارتفاع بر پروفیل سرعت در جریان پوازیه به ازای F*=0.02..... ۷۵
شکل ۴-۳۹- اثر ارتفاع بر پروفیل سرعت در جریان پوازیه به ازای F*=0.05..... ۷۵

شکل ۴-۴۰- اثر ارتفاع کانال با تغییرات نیروی خارجی بر سرعت لغزشی در کانال با زبری مستطیلی ۷۶
شکل ۴-۴۱- اثر ارتفاع کانال با تغییرات نیروی خارجی بر طول لغزش در کانال با زبری مستطیلی ۷۷
شکل ۴-۴۲- اثر ارتفاع کانال با تغییرات نیروی خارجی بر طول لغزش مطلق در کانال با زبری مستطیلی ۷۷
شکل ۴-۴۳- شماتیک تغییرات پریود زبری در زبری مستطیلی ۷۸
شکل ۴-۴۴- اثر تغییر پریود زبری بر پروفیل سرعت کانال با زبری مستطیلی و مقایسه با حالت کانال صاف ۷۹
شکل ۴-۴۵- اثر تغییر پریود زبری بر پروفیل سرعت کانال با زبری مثلثی و مقایسه با حالت کانال صاف ۷۹
شکل ۴-۴۶- اثر تغییر پریود زبری بر پروفیل سرعت کانال با زبری مثلثی راست (شکل راست) ۸۰
شکل ۴-۴۷- اثر تغییرات پریود زبری بر سرعت لغزشی در کانال هایی با زبری مستطیلی، مثلثی و مثلثی راست و چپ ۸۰
شکل ۴-۴۸- اثر تغییرات پریود زبری بر طول لغزش در کانالهایی با زبری مستطیلی، مثلثی و مثلثی راست و چپ ... ۸۱
شکل ۴-۴۹- اثر ارتفاع زبری بر پروفیل سرعت کانال با زبری مستطیلی ۸۲
شکل ۴-۵۰- اثر ارتفاع زبری بر پروفیل سرعت کانال با زبری مثلثی ۸۳
شکل ۴-۵۱- اثر ارتفاع زبری بر پروفیل سرعت کانال با زبری مثلثی راست(شکل راست) ۸۴
شکل ۴-۵۲- اثر ارتفاع زبری بر طول لغزش در زبری های مستطیلی، مثلثی و مثلثی راست و چپ ۸۵
شکل ۴-۵۳- اثر تغییرات تقابل دیواره و سیال بر پروفیل سرعت کانال زبر مستطیلی ۸۵
شکل ۴-۵۴- اثر تغییرات تقابل دیواره و سیال بر پروفیل سرعت کانال زبر مثلثی ۸۶
شکل ۴-۵۵- اثر تغییرات تقابل دیواره و سیال بر پروفیل سرعت کانال زبر مثلثی راست(شکل راست) ۸۷
شکل ۴-۵۶- اثر تغییرات تقابل دیواره و سیال بر مقادیر سرعت لغزشی در جریان پوازیه ۸۷
شکل ۴-۵۷- اثر تغییرات تقابل دیواره و سیال بر مقادیر طول لغزش در جریان پوازیه ۸۸
شکل ۴-۵۸- پروفیل های سرعت به ازای مقادیر مختلف پارامتر انرژی نسبی و مقیاس طولی $\sigma_r=0.6$ ۸۹
شکل ۴-۵۹- پروفیل های سرعت به ازای مقادیر مختلف پارامتر انرژی نسبی و مقیاس طولی $\sigma_r=1$ ۹۰
شکل ۴-۶۰- اثر مقیاس طولی بر طول لغزش با تغییرات تقابل دیواره و سیال ۹۱

فهرست جداول

جدول ۲-۱- معادلات حرکت در سیستمهای مختلف..... ۲۳
جدول ۳-۱- پارامترهای بی بعد بکار رفته در روند شبیه سازی ها..... ۴۰
جدول ۴-۱- مقادیر ماکزیمم خطا مربوط به نتایج پروفیل های سرعت مرجع[۲۲] و کار حاضر..... ۴۷
جدول ۴-۲- مقادیر خطا مربوط به طول لغزش محاسبه شده در مرجع [۲۲] و کار حاضر..... ۴۷
جدول ۴-۳- مقادیر ارتفاع معادل انواع زبری..... ۷۱
جدول ۴-۴- مقادیر ارتفاع معادل انواع زبری در پریودهای مختلف..... ۸۱
جدول ۴-۵- مقادیر ارتفاع معادل در ارتفاع های مختلف زبری دیواره..... ۸۴

فهرست نمادها

σ	مقیاس طولی
ε	عمق انرژی
ϕ	تابع پتانسیل
τ	زمان آسایش
ρ	چگالی
Γ	ضریب اصطکاک
λ	پویش آزاد مولکولی
F	نیرو
r_c	شعاع قطع
m	جرم
k_B	ثابت استفان بولتزمن
Kn	عدد نادسن
r	فاصله
v	سرعت
a	شتاب
t	زمان
N	تعداد ذرات
T	دما

زیرنویس

w	دیوار
f	سیال
s	لغزشی
ext	خارجی

بالانویس

$*$	کمیت بی‌بعد

چکیده

از جمله مهم‌ترین معادلات حاکم در مکانیک سیالات، معادلات ناویر-استوکس هستند که بدلیل پیچیدگی زیاد و پارامترهای بسیار بدون جواب باقی‌مانده اند. بعلاوه در ابعاد کوچک بسیاری از معادلات حاکم که در ابعاد معمولی برقرارند، نقض شده و یا از دقت کافی برخوردار نیستند. یکی از پدیده‌های مهم در جریان سیال داخل مجاری و کانال‌ها، لغزش سیال است که عموماً در ابعاد معمولی صرفنظر شده و در حل معادلات سیال از شرط عدم لغرش سیال استفاده می‌شود. درحالی‌که در ابعاد کوچک و بویژه در مقیاس نانو باید لغزش سیال را در نظر گرفته تا بتوان رفتار جریان سیال را به درستی تحلیل کرد. در تحقیق حاضر قصد داریم تا به تاثیرات پاره‌ای از پارامترهای مختلف موثر بر لغزش سیال بپردازیم. از جمله اثر تغییر ارتفاع کانال، مقدارتقابل بین ذرات سیال و جامد، زبری سطح، فاصله زبری‌ها، مقدار سرعت دیواره و اندازه اتمی. لازم به ذکر است که جهت انجام شبیه‌سازی‌ها از نرم‌افزار لمپس استفاده کردیم که یکی از قدرتمندترین پکیج‌های موجود در شبیه‌سازی جریان سیالات در مقیاس نانو به شمار می‌رود. بر اساس نتایج بدست آمده در این پژوهش با افزایش ارتفاع کانال در جریان کوئت با سرعت دیواره ثابت، لغزش سیال کاهش یافته و طول لغزش سیال به مقداری ثابت میل می‌کند. این تغییرات نیز عموماً به شکل تابع توانی هستند. با افزایش سرعت دیواره نیز لغزش بیشتر شده و در سرعت‌های بالا چه در کانال صاف و چه کانال زبر، پروفیل سرعت از حالت خطی خارج شده و حتی در سرعت‌های بسیار بالا بخشی از ذرات سیال در کنار دیواره ساکن بدون تحرک باقی می‌مانند. افزایش تقابل بین ذرات سیال و دیواره نیز در کانال صاف اثر بسزایی گذاشته و لغزش جریان را کم خواهد کرد. سرعت ذرات سیال در کنار دیوارهای زبر، بسیار نزدیک به سرعت دیواره است و با افزایش سرعت دیواره، لغزش در کانال با هر دو دیواره زبر بصورت تقریباً خطی افزایش می‌یابد. در کانال زبر نیز، با افزایش ارتفاع زبری و یا کاهش فاصله بین زبری‌ها، طول لغزش بشدت کاهش یافته و در این شرایط جریان توسط زبری‌ها بلوکه شده و سرعت لغزشی و طول لغزش هر دو منفی خواهند شد. زبری مستطیلی نیز در تمامی حالات بیشترین مقاومت در برابر جریان سیال را ایجاد کرده و زبری‌های مثلثی راست و چپ نیز عموماً رفتاری مشابه یکدیگر دارند. افزایش پریود زبری نیز معادل صاف‌تر شدن کانال بوده و لغزش را بیشتر خواهدکرد.

کلمات کلیدی: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، نانو کانال، لغزش، طول لغزش، کانال زبر

فصل اول
مقدمه

گسترش استفاده از تجهیزات با مقیاس کوچک و مزیت‌های آن‌ها نسبت به سیستم‌های با مقیاس معمولی سبب شده است تا در دهه‌های اخیر توجه محققین به بررسی این سیستم‌ها و تحلیل رفتار آن‌ها جلب شود. در موارد بسیاری که ابعاد مورد بررسی کوچک هستند، روش‌های معمولی قادر به حل نبوده و عموما جواب‌های غیر دقیق می‌دهند. بدین دلیل که رفتار سیستم‌ها در ابعاد ریز از رفتار آن‌ها در ابعاد معمولی متفاوت بوده و پارامترهای جدیدی وارد مسائل شده که لازمه بررسی این سیستم‌ها استفاده از روش‌های دقیق‌تر جهت پیش‌بینی رفتار مواد در این ابعاد است.

در بررسی جریان سیال در ابعاد کوچک مثل میکرو و نانو نیز این حساسیت وجود داشته و از تحلیل‌های معمولی که در مقیاس عادی(میلی‌متر تا متر) برقرار هستند نمی‌توان استفاده کرد و باید از روش‌های دیگر و مخصوص این ابعاد کمک گرفت. جهت بررسی جریان سیال در مقیاس‌های کوچک بسته به سیستم مورد بررسی از روش‌های مختلفی استفاده می‌شود که هر یک مزیت‌ها و معایب خاص خود را دارند. در مقیاس بسیار کوچک بویژه نانو، روش‌های حل گوناگونی وجود دارند که شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یکی از دقیق‌ترین آن‌ها به شمار رفته و می‌تواند رفتار سیستم‌های مورد بررسی با چنین مقیاس‌هایی را به خوبی پیش‌بینی کند. در ادامه به تشریح فناوری نانو و اهمیت آن پرداخته، روش‌های مرسوم حل مسائل را بیان کرده، مختصری پیرامون جریان‌های میکرو و نانو خواهیم گفت و مروری بر کارهای انجام‌شده مشابه تحقیق حاضر را بیان خواهیم نمود.

۱-۱ فناوری نانو

امروزه بررسی مواد در ابعاد نانو و استفاده از تجهیزات نانو بطور روز افزون گسترش یافته و با توجه به رفتار خاص مواد در این مقیاس لزوم بررسی مواد و سیستم‌ها در این ابعاد بیش از پیش احساس می‌شود. به همین دلیل از فناوری نانو جهت بررسی ساختار مواد استفاده می‌شود. هدف فناوری نانو درک خواص و ساخت انواع مواد، ساختارها و افزارها در مقیاس نانومتر است. این مواد و ساختارها ممکن است خواصی کاملا متفاوت از توده مواد و ساختارهای بزرگ داشته‌باشند. لازم به ذکر است که ابعاد نانو به سیستم‌هایی به اندازه ۰/۱ نانومتر تا ۱۰۰ نانومتر گفته می‌شود. بطور کلی تجهیزاتی که دارای ابعاد نانومتر هستند و یا فناوری نانو سبب عمل کردن آن‌ها می‌شوند، تحت عنوان فناوری نانو طبقه‌بندی می‌شوند.[۵]

از جمله کاربردهای فناوری نانو به موارد زیر می‌توان اشاره داشت:

- نانوکامپوزیت‌ها
- نانوکریستال‌ها
- نانوذرات
- مواد ساختار نانو

امروزه کاربرد فناوری نانو و بررسی رفتار مواد در این ابعاد در علم مکانیک نیز بسیار گسترش یافته‌است. بررسی رفتار پروتئین‌ها، DNA و RNA، سلول‌های دیگر زیستی، جریان بین دیسک سخت و حسگر مربوطه در رایانه‌ها، جریان سیال در پمپ‌های گریز از مرکز در نیروگاه‌های هسته‌ای، جداکننده‌های ذرات، میکروموتورها، میکروپمپ‌ها، تجهیزات تزریق مواد، سیستم‌های پاشش سوخت از جمله کاربردهای این فناوری به شمار می‌آیند. ضمن آنکه امروزه با پیشرفت تکنولوژی می‌توان تجهیزاتی با مقیاس میکرو و نانو ساخته و از آن‌ها در کاربردهای ذکر شده استفاده نمود.

جهت بیان اهمیت مقیاس نانو به پنج مورد می‌توان اشاره کرد:[۶]

۱- خواص موجی‌شکل الکترون‌های مواد با تغییر به مقیاس نانو متفاوت خواهند بود. در این مقیاس خواص بنیادی مثل دمای ذوب، بار الکتریکی و مغناطیسیته مواد تغییر خواهند کرد، اگرچه ساختار شیمیایی مواد تغییر نمی‌کند.

۲- یکی از مهم‌ترین خواص سیستم‌های بیولوژیک سازماندهی مواد در مقیاس نانو است، بطوری‌که به کمک فناوری نانو می‌توان جزئیات مصنوعی به مواد و سلول‌ها اضافه کرده و مواد جدید با خواص متفاوت ایجاد کرد.

۳- مواد با مقیاس نانو دارای سطح زیادی هستند که سبب شده تا از آن‌ها در مواد کامپوزیتی، سیستم‌های واکنشی[1]، تزریق مواد[2] و ذخیره‌سازی انرژی استفاده شود.
۴- بدلیل ابعاد کوچک مواد نانو، اثرات کشش سطحی و الکترومگنتیک افزایش یافته که سبب می‌شود تا مواد با این ابعاد سخت‌تر شده و کمتر شکننده شوند.
۵- مقدار تقابل ذرات در پدیده‌های موجی، در مقایسه با اندازه مواد نانو قابل مقایسه شده و این مواد را جهت کاربردهای الکترونیک نوری مناسب می‌سازد.

۱-۲ روش‌های حل مسائل

جهت بررسی رفتار مواد و سیستم‌ها و ازجمله بررسی رفتار جریان سیال در ابعاد نانو از روش‌های مختلفی می‌توان استفاده کرد. این روش‌ها در طول دهه‌های مختلف گسترش یافته و بهبود می‌یابند. جریان سیال با ابعاد نانو در موارد مختلفی کاربرد دارد که در قسمت قبلی به برخی از آن‌ها اشاره شد. جریان اطراف سلول‌های بدن انسان، بررسی عملکرد نانولوله‌ها، سیستم‌های دارورسانی و جریان سیال در پیل‌های سوختی از جمله مواردی هستند که در آن‌ها با جریان سیال در مقیاس نانو سر و کار داریم و باید از روش‌های مخصوص برای تحلیل این جریان‌ها استفاده کرد. استفاده از روش مناسب در حل این جریان‌ها از اهمیت بسزایی برخوردار است، چراکه مطابق بخش ۱-۱ این جریان‌ها رفتاری متفاوت با جریان هایی با مقیاس معمولی داشته و حتی تعریف خواص مواد در این ابعاد متفاوت خواهد شد و باید از فرضیات کامل‌تر و دقیق‌تر که با فیزیک مسأله مورد بررسی مطابقت دارند، استفاده کرد.

بطور کلی سه روش برای حل پدیده‌های مختلف وجود دارند، که در ادامه به توضیحاتی کلی پیرامون آن‌ها اشاره خواهیم کرد.

۱-۲-۱ روش‌های تحلیلی

در این روش‌ها سعی می‌شود تا معادلات حاکم بر مسأله را استخراج کرده و به کمک روش‌های ریاضی این معادلات را حل کرد. با توجه به اینکه در این روش فیزیک حاکم بر مساله به شکل روابطی در آمده و این روابط بصورت ریاضی حل می‌شوند، می‌توان گفت که این روش دقیق‌ترین روش برای حل مسائل مختلف به حساب می‌آید، چراکه در روند حل از فرضیات خاصی استفاده نشده و جواب بدست آمده دقیق است. بدین طریق یک حل ریاضی و فیزیکی از مسأله بدست می‌آید که به کمک آن اثر پارامترهای مختلف را براحتی می‌توان بررسی نمود.

عیب این روش آن است که عموما روابط حاکم بر پدیده‌های فیزیکی دارای پیچیدگی‌های بسیاری بوده و حل دقیق آن‌ها بدون فرضیات ساده‌شونده امکان پذیر نبوده و یا در شرایط خاص یک حل کامل و جامع از آن‌ها می‌توان

---

[1] reacting systems
[2] drug delivery

بدست آورد. به همین دلیل باید از فرضیات ساده شونده استفاده شود که این کار خود سبب شده تا دقت این روش کاهش یابد و نتایج بدست آمده از نتایج واقعی فاصله بگیرد. در نتیجه از این روش برای مسائل ساده و یا با هندسه ساده استفاده می‌شود که بکارگیری فرضیات مختلف جهت ساده‌سازی روابط، اختلالی در نتایج بدست آمده بوجود نمی‌آورد. این روش عموما در بررسی جریان سیال که دارای روابط پیچیده محاسباتی بوده و پارامترهای بسیاری در حل آن‌ها دخیل هستند، استفاده نمی‌شود.

۱-۲-۲ روش‌های تجربی

این روش‌ها از گذشته‌های دور جهت بررسی پدیده‌های مختلف کاربرد داشته و همچنان در موارد گوناگون از آن‌ها استفاده می‌شود. همانطورکه از نام روش مشخص است، در این روش‌ها از نتایج آزمایشگاهی و تجربی برای بررسی یک پدیده فیزیکی استفاده می‌شود. به همین دلیل نتایج بدست آمده به شرط استفاده از تجهیزات مناسب و دستگاه‌های اندازه‌گیری دقیق کاملا معتبر بوده و از اطلاعات آن جهت صحت سنجی روش‌های دیگر استفاده می‌شود. علیرغم نتایج دقیق این روش بدلیل هزینه‌بر بودن، لزوم صرف وقت بسیار در انجام آزمایش‌های تجربی، خطای فردی و خطای دستگاه و دشواری کنترل تمام پارامترها و شبیه‌سازی دقیق پدیده، این روش به مرور جای خود را به روش‌های دیگر داده است و در روند بررسی یک پدیده از آن برای تایید نتایج روش‌های دیگر کمک گرفته می‌شود.

۱-۲-۳ روش‌های عددی

روش‌های عددی یک شیوه جدید جهت حل پدیده‌ها هستند که با تبدیل معادلات دیفرانسیلی حاکم به معادلات جبری و اعمال فرضیات مختلف به بررسی این پدیده‌ها می‌پردازند. این روش‌ها معادلات حاکم بر پدیده‌ها را به روش‌های گوناگون ساده‌سازی کرده و با محاسبات مربوطه رفتار سیستم را با دقت مناسب بدست می‌آورند که این محاسبات نیازمند رایانه‌های قدرتمند است، که به مرور زمان و با پیشرفت روز افزون روش‌های محاسباتی و افزایش قدرت محاسباتی رایانه‌های موجود، این روش بعنوان یک ابزار قدرتمند در حل پدیده‌ها و بررسی رفتار سیستم‌های گوناگون در زمینه‌های مختلف شمرده می‌شود.

روش‌های عددی شامل دو دیدگاه اویلری و لاگرانژی هستند. روش‌های اویلری به سه دسته روش اختلاف محدود[1]، حجم محدود[2] و المان محدود[3] تقسیم می‌شوند و در بررسی پدیده‌ها از دستگاه مختصات ثابت استفاده کرده و رفتار وابسته به مکان و زمان سیستم ذرات را پیش‌بینی می‌کنند. روش‌های لاگرانژی نیز همگام با ذره شده و

[1] Finite Difference
[2] Finite Volume
[3] Finite Element

رفتار ذرات را با بررسی حرکت آن‌ها بدست می‌آورند. از جمله روش‌های لاگرانژی به روش دینامیک مولکولی[1]، روش مونت کارلو[2] و شبیه‌سازی دینامیک لانگوین[3] می‌توان اشاره کرد. هر یک از روش‌های مذکور رفتار ذرات سیستم را از دیدگاه‌های مختلفی بررسی می‌کنند و در موارد مختلف بسته به دقت مورد نیاز و رفتار سیستم، دارای دقت متفاوتی هستند. به همین دلیل هر کدام دارای کاربردهای متنوعی هستند. در ادامه به توضیح مختصری پیرامون این روش‌ها می‌پردازیم.[۷]

- روش دینامیک مولکولی

این روش شامل دو شکل کلی است؛ روش‌هایی که برای سیستم‌های تعادلی استفاده می‌شوند و روش-هایی که برای سیستم‌های غیرتعادلی استفاده می‌شوند[۸]. دینامیک مولکولی تعادلی عموما درمورد سیستم‌های منزوی به کار می‌رود که در آن تعداد ذرات و حجم سیستم ثابت است. انرژی کل سیستم نیز که برابر با جمع انرژی‌های جنبشی و پتانسیل می‌شود، ثابت است. شرح کامل این روش در فصل دوم آورده شده‌است.

- روش مونت کارلو یا روش اتفاقی

در این روش مکان ذرات بطور اتفاقی تولید شده و پیکربندی مولکولی تولید شده، فقط با پیکربندی پیشین مرتبط است. این روش بر اساس بررسی سطح انرژی توسط بررسی تصادفی هندسه سیستم مولکولی است و در آن دسته‌ای از الگوریتم‌های محاسباتی بکارمی‌روند که به منظور شبیه‌سازی رفتار سیستم‌های مختلف فیزیکی و ریاضی به‌کارمی‌روند. این روش بواسطه طبیعت اتفاقی بودن از سایر روش‌ها(مانند روش دینامیک مولکولی) متمایز می‌شود، چراکه غیرجبری است.

در شبیه‌سازی اتفاقی، تعداد زیادی پیکربندی (ساختار هندسی) جمع‌آوری می‌شود. انرژی پتانسیل هریک از این پیکربندی‌ها محاسبه می‌شود و این داده‌ها برای محاسبه خواص ترمودینامیکی سیستم استفاده می‌شوند، درحالی‌که در روش دینامیک مولکولی، تحول سیستم مولکولی درفواصل زمانی بسیار کوتاه مورد مطالعه قرار می‌گیرد. همچنین برخلاف روش‌های دینامیک مولکولی، اندازه حرکت ذرات در نظر گرفته نمی-شوند، به عبارت دیگر اندازه حرکت ذرات برای محاسبه خواص ترمودینامیکی لازم نیست.

- شبیه‌سازی دینامیک لانگوین

معادله لانگوین یک معادله دیفرانسیلی اتفاقی است که در آن دو جملهٔ وابسته به نیرو که به منظور تخمین اثرات مربوط به درجات آزادی صرف‌نظر شده، به قانون دوم نیوتن اضافه شده‌است. این دو جمله نشان‌دهنده نیروی اصطکاک و نیروی تصادفی هستند.

---

[1] Molecular Dynamics
[2] Mont Carlo
[3] Longvin dynamics

۱-۳ نرم‌افزارهای موجود در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

جهت انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از روش‌های مختلفی می‌توان استفاده کرد. روش عددی یکی از این روش‌ها محسوب می‌شود که در آن از نرم‌افزارهای موجود می‌توان استفاده کرد و یا کلیه مراحل شبیه‌سازی توسط فرد بصورت برنامه‌نویسی عددی نوشته شود. با توجه به حجم بالای تعداد شبیه‌سازی‌ها در پژوهش اخیر و حجم محاسباتی بالا بدلیل افزایش ابعاد سیستم مورد بررسی و ذیق وقت، برنامه‌نویسی کلیه مراحل در این پژوهش دنبال نشده و از نرم‌افزارهای موجود جهت شبیه‌سازی کمک گرفته‌شده است. بعلاوه نرم‌افزارهای موجود از دقت بسیار مناسبی برخوردار بوده و انعطاف پذیری مناسبی دارند؛ بدین ترتیب که از توابع پتانسیل متفاوت، شبکه‌های اتمی مختلف و الگوریتم‌های مختلف برای ایجاد شرایط دما ثابت و فشار ثابت و بطور کل اعمال شرایط دلخواه کاربر می‌توان استفاده کرد و همچنین اکثر این نرم‌افزارها دارای قابلیت اجرای شبیه‌سازی بر روی چندین هسته(پردازش موازی) هستند که سرعت اجرایی شبیه‌سازی‌ها را چندین برابر می‌کند. به همین دلیل در تمامی شبیه‌سازی‌ها از نرم افزار جهت مدلسازی جریان کمک گرفتیم. لیستی از نرم‌افزارهای موجود در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی عبارتند از:

لمپس[1] **[۱]:** این پکیج یک کد دینامیک مولکولی کلاسیک است، که شامل پتانسیل‌های مختلف مخصوص مواد نرم (مولکولی‌های زیستی و پلیمرها)، مواد جامد (فلزات و نیمه رساناها) و سیستم‌های مقیاس مزو و درشت است. از این کد برای مدلسازی اتم‌ها و همچنین جهت شبیه‌سازی ذرات درشت در مقیاس اتمی، مزو و بزرگتر استفاده می‌شود. مزیت این پکیج تنوع سیستم‌های قابل شبیه‌سازی به کمک آن است؛ بطوری که می‌توان هندسه‌ها، شرایط حاکم و بطور کلی جزئیات یک سیستم را بطور دلخواه بوسیله آن مدلسازی کرده و نتایج آنرا مشاهده نمود. این پکیج همواره توسط کاربران به روز رسانی شده و در شبیه‌سازی انواع جریان سیال با شرایط مختلف کارآیی قابل توجهی دارد.

گرومکس[2] **[۲]:** این پکیج نیز جهت بررسی مولکول‌های شیمیایی مثل پروتئین‌ها، اسیدهای نوکلئیک و چربی‌ها طراحی شده که می‌تواند تقابل‌های پیوندی پیچیده بین آن‌ها را به خوبی مدلسازی کند. همچنین در سیستم‌های غیربیولوژی مثل پلیمرها بسیار مورد استفاده قرار می‌گیرد.

هوام دی[3] **[۳]:** این نرم‌افزار جهت بررسی دینامیک سیستم ذرات بهینه‌شده استفاده می‌شود که مزیت آن بهره‌گیری از کارت‌های گرافیکی جهت افزایش سرعت محاسباتی است. انواع پتانسیل‌ها و روش‌های انتگرال‌گیری مختلف در این پکیج گنجانده شده‌است.

---

[1] Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator(LAMMPS)
[2] GROMACS
[3] HOOMD