دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

دانشکده مهندسی مکانیک

شبیه سازی دینامیک مولکولی تشکیل حباب بر روی سطح جامد

پایان‌نامه یا رساله برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته مهندسی مکانیک گرایش تبدیل انرژی

نام دانشجو

حجت اله رضایی نژاد

استاد راهنما:

دکتر مجید قاسمی

دکتر محمد حسین حامدی

خرداد ماه 1389

دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

دانشکده مهندسی مکانیک

شبیه سازی دینامیک مولکولی تشکیل حباب بر روی سطح جامد

پایان‌نامه یا رساله برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته مهندسی مکانیک گرایش تبدیل انرژی

نام دانشجو

حجت اله رضایی نژاد

استاد راهنما:

دکتر مجید قاسمی

دکتر محمد حسین حامدی

خرداد ماه 1389

بسم الله الرحمن الرحيم

تأییدیه‌ی هیأت داوران جلسه‌ی دفاع از پایان‌نامه/رساله

نام دانشکده: مهندسی مکانیک

نام دانشجو: حجت اله رضایی نژاد

عنوان پایان‌نامه یا رساله: شبیه سازی دینامیک مولکولی تشکیل حباب بر روی سطح جامد

تاریخ دفاع:

رشته: مکانیک حرارت و سیالات

گرایش: تبدیل انرژی

ردیف	سمت	نام و نام خانوادگی	مرتبه	دانشگاه یا مؤسسه	امضا
1	استاد راهنما	دکتر مجید قاسمی	استاد تمام	دانشگاه خواجه نصیر الدین طوسی	
2	استاد راهنما	دکتر حامدی	استاد تمام	دانشگاه خواجه نصیر الدین طوسی	
3	استاد مشاور				
4	استاد مشاور				
5	استاد مدعو خارجی				
6	استاد مدعو خارجی	دکتر محمد حسن رحیمیان	دانشیار	دانشگاه تهران	
7	استاد مدعو داخلی	دکتر مهرزاد شمس	دانشیار	دانشگاه خواجه نصیر الدین طوسی	
8	استاد مدعو داخلی				

تأییدیه‌ی صحت و اصالت نتایج

باسمه تعالی

اینجانب حجت اله رضایی نژاد به شماره دانشجویی 8604974 دانشجوی رشته مهندسی مکانیک گرایش تبدیل انرژی مقطع تحصیلی کارشناسی ارشد تأیید می‌نمایم که کلیه‌ی نتایج این پایان‌نامه/رساله حاصل کار اینجانب و بدون هرگونه دخل و تصرف است و موارد نسخه‌برداری‌شده از آثار دیگران را با ذکر کامل مشخصات منبع ذکر کرده‌ام. درصورت اثبات خلاف مندرجات فوق، به تشخیص دانشگاه مطابق با ضوابط و مقررات حاکم (قانون حمایت از حقوق مؤلفان و مصنفان و قانون ترجمه و تکثیر کتب و نشریات و آثار صوتی، ضوابط و مقررات آموزشی، پژوهشی و انضباطی ...) با اینجانب رفتار خواهد شد و حق هرگونه اعتراض درخصوص احقاق حقوق مکتسب و تشخیص و تعیین تخلف و مجازات را از خویش سلب می‌نمایم. در ضمن، مسؤولیت هرگونه پاسخگویی به اشخاص اعم از حقیقی و حقوقی و مراجع ذی‌صلاح (اعم از اداری و قضایی) به عهده‌ی اینجانب خواهد بود و دانشگاه هیچ‌گونه مسؤولیتی در این خصوص نخواهد داشت.

نام و نام خانوادگی: حجت اله رضایی نژاد

امضا و تاریخ:

مجوز بهره‌برداری از پایان‌نامه

بهره‌برداری از این پایان‌نامه در چهارچوب مقررات کتابخانه و با توجه به محدودیتی که توسط استاد راهنما به شرح زیر تعیین می‌شود، بلامانع است:

☐ بهره‌برداری از این پایان‌نامه/ رساله براي همگان بلامانع است.

☐ بهره‌برداری از این پایان‌نامه/ رساله با اخذ مجوز از استاد راهنما، بلامانع است.

☐ بهره‌برداری از این پایان‌نامه/ رساله تا تاریخ ..... ممنوع است.

نام استاد یا اساتید راهنما: دکتر قاسمی و دکتر حامدی

تاریخ:

امضا:

تقدیم به:

تقدیم به آنان که عقل چراغ راهشان است،

و از **آگاهی نمی‌هراسند.**

تشکر و قدردانی:

در این مجال بر خود لازم می‌دانم که از استاد عزیزم آقای دکتر مجید قاسمی بخاطر حمایت‌ها و راهنمایی‌هایشان قدردانی کنم.

همینطور بر خود واجب می‌دانم که از پدر و مادرم که همواره راهگشا و امید دهنده‌ی من بوده‌اند و لحظه‌ای از محبت بیشمار خود نکاستند، بسیار تشکر و قدردانی نمایم.

و در انتها از همسر گرامی‌ام که مشکلات بسیاری را متحمل شدند ولی هیچگاه خسته و درمانده نشده‌اند و پیوسته همراه و یاور من بودند، کمال تشکر را می‌نمایم.

چکیده

بررسی مولکولی پدیده‌های ترموفیزیکی امروزه یکی از جذاب‌ترین مسائلی است که توجه دانشمندان را به خود جذب کرده است. دینامیک مولکولی به‌عنوان یکی از قوی‌ترین روش‌های موجود برای بررسی چنین پدیده‌هایی، کاربردهای فراوانی یافته است.

حباب و فرایند تشکیل آن یکی از پیچیده‌ترین مباحث فیزیکی و مهندسی است. مقالات و تحقیق-های زیادی در این زمینه به چاپ رسیده است، اما بررسی دقیق‌تر و جامع‌تر در این زمینه نیازمند بررسی ماهیت تشکیل آن از دیدگاه مولکولی است. در این رساله فرایند تشکیل حباب به روش دینامیک مولکولی مورد تحقیق قرار گرفته است.

هدف اصلی این رساله بررسی عددی تاثیرات انحنای حباب بر روی کشش‌سطحی آن است. اثرات آبدوستی سطح بر روی شکل حباب و تاثیر مستقیم آن بر روی انحنای حباب نیز مورد بررسی قرار گرفته است. همین‌طور، صحت معادله یانگ-لاپلاس در توضیح رابطه‌ی میان پارامترهای حباب در ابعاد نانو به‌وسیله‌ی دینامیک مولکولی بررسی شده است.

نتایج این تحقیق نشان می‌دهد فشار در فاز بخار تقریبا مستقل از شعاع حباب است، ولی فشار در فاز مایع به شعاع حباب وابسته است و با کاهش شعاع حباب (یا افزایش انحنای پوسته‌ی حباب) فشار فاز مایع منفی تر می‌شود. کشش‌سطحی در این تحقیق از معادله‌ی یانگ-لاپلاس و همین-طور به طور مستقیم از روش دینامیک مولکولی محاسبه شده است. یکی از مهم‌ترین نتایجی که در این تحقیق بدست آمده آن است که مقدار کشش‌سطحی در نانو حباب با کاهش شعاع آن (یا افزایش انحنای پوسته‌ی حباب) افزایش می‌یابد.

واژه‌های کلیدی: دینامیک مولکولی، حباب، کشش‌سطحی، زاویه‌ی تماس، آبدوستی سطح و معادله‌ی یانگ-لاپلاس.

فهرست مطالب

فصل 1: مقدمه 1
1-1- کلیات 2

فصل 2: مروري بر پیشینه تحقیق 7
2-1- کلیات 8
2-2- مروري بر ادبیات موضوع 8
2-3- نتیجه‌گیری 11

فصل 3: شبیه سازي دینامیک مولکولی 13
3-1- کلیات 14
3-2- روش دینامیک مولکولی 14
3-3- تقریب بورن-اپنهایمر 15
3-4- پتانسیل و میدان نیرو 15
3-4-2- پتانسیلهای مدل کره-سخت 18
3-4-3- پتانسیل لنارد-جونز 18
3-4-4- شعاع قطع 21
3-5- روش بررسی دینامیک حرکت 21
3-5-2- انتگرالگیری از معادلات نیوتن 23
3-6- روش‌هاي تولید یک محیط دما ثابت 27
3-6-2- روش تعدیل سرعت 27
3-6-3- ترموستات نوز-هاور 28
3-7- شرایط مرزي متناوب و سطح جامد دما ثابت 29
3-7-1- شرط مرزي متناوب 29
3-7-2- سطح جامد دما ثابت 31
3-8- بی‌بعد سازي 34

فصل 4: توسعه مدل عددي 35
4-1- کلیات 36
4-2- هندسه‌ي شبیه‌سازي 36
4-3- تعریف برهم‌کنش‌ها 37
4-4- شبیه‌سازي 38
4-5- پردازش داده‌هاي خروجی 41

4-5-1- مرکز حباب و توزیع چگالی 41
4-5-2- محاسبه‌ي فشار 43
4-5-3- کشش‌سطحی 45
4-5-4- شعاع حباب 46
4-5-5- زاویه‌ي تماس حباب با سطح 47

فصل 5: نتایج و تفسیر آنها 48
5-1- کلیات 49
5-2- توزیع دانسیته 49
5-3- مختصات مرکز حباب 51
5-4- توزیع شعاعی چگالی 53
5-5- محاسبه‌ي شعاع حباب 55
5-6- زاویه تماس حباب با سطح 56
5-7- فشار گاز و مایع 57
5-8- تانسور فشار موضعی 58
5-9- کشش سطحی 60

فصل 6: جمع‌بندي و پیشنهادها 63
6-1- کلیات 64
6-2- جمع‌بندي نتایج 65
6-3- نوآوري 66
6-4- پیشنهادها 66

مراجع 67

پیوست 71

فهرست اشکال

شکل (1-1) نمایی از ترکیدن یک حباب متقارن در نزدیکی سطح.[6] 3
شکل (1-2) نمایی از دو موتور خطی میکرو حباب با دو آرایش مختلف در شکل نشان داده شده است. الف) موتور خطی با آرایش 2x1. ب) موتور خطی با آرایش 2x2. ج)نماي نزدیک از حباب تشکیل شده.[7] 3
شکل (1-3) مجموعه‌اي از حباب‌ها در نزدیکی سطح که بخاطر کاهش فشار ایجاد شده‌اند و در صورت ترکیدن آسیب زیادی را به سطح خواهند زد.[8] 4
شکل (1-4) حبابهاي ایجاد شده به استفاده از دستگاه تولید امواج مافوق صوت.[9] 5
شکل (1-5) نمایی از نانو حباب‌هاي هلیم ایجاد شده در یک فرایند آنیلینگ [10] 5
شکل (3-1) نمایی از پتانسیل لنارد-جونز 19
شکل (3-2) مقیاس کاربرد هر یک روشهاي مختلف و معادلات حاکم بر هر یک از روش‌ها [29]. 22
شکل (3-3) شماتیک الگوریتم ورله سرعتی 25
شکل (3-4) نمایی از یک سیستم چنداتمی 26
شکل (3-5) شرایط مرزي متناوب در دوبعد[35] 30
شکل (3-6) نمایی از تکنیک لیست همسایه، خطوط خط‌چین شعاع همسایه و خطوط ممتد شعاع قطع را نشان می‌دهند. در این شکل از چپ به راست به ترتیب مراحل این تکنیک را نشان می‌دهد. در حالت اول از راست زمان بازسازي لیست همسایه‌ها به تاخیر افتاده و خطاي محاسباتی وجود دارد[35] 31
شکل (3-7) یک سطح دما ثابت ایجاد شده با اتمهاي فانتوم[34] 32
شکل (4-1) هندسه‌ي شبیه‌سازي انجام شده براي تشکیل حباب بر روي سطح جامد. 37
شکل (4-2) یک قطاع از حباب در کنار کانتور چگالی محاسبه شده نشان داده شده است. 42
شکل (4-3) رابطه‌ي هندسی میان مرکز حباب، شعاع حباب و زاویه‌ي تماس را براي شبیه-سازي $E2$ 47
شکل (5-1) توزیع دو-بعدي چگالی در صفحهی $x-z$، مقدار پارامتر α (آبدوستی) براي سطح بالا 0.0716 و براي سطح پایین 0.046 است. مقادر مربوط به هر مورد در جدول (5-1) لیست شده است. $V2\ (a)$، $V4(b)$، $V5\ (c)$ و $V6\ (d)$. 49
شکل (5-2) نمودار توزیع دو-بعدي چگالی براي حباب در صفحه‌ي $x-z$ با مقدار$\alpha = 0.0716$ براي سطح بالا. مقدار پارامتر α براي سطح پایین براي هر مورد متفاوت است، همین‌طور در تمام شبیه‌سازي‌هاي نوع E، مقدار حجم نهایی جعبه‌ي شبیه‌سازي یکسان است ($\rho_{ave} = 0.617$). مقادیر مرتبط با هر مورد در جدول (5-1) آورده شده است. $E1\ (a)$، $E2(b)$، $E3\ (c)$، $E4\ (d)$ و $E5\ (e)$. 50
شکل (5-3) توزیع شعاعی چگالی براي مقادیر مختلف حجم جعبه‌ي شبیه‌سازي (چگالی‌هاي

متوسط ρ_{ave} متفاوت)..... 53
شکل (5-4) توزیع شعاعی چگالی براي مقادیر مختلف آبدوستی سطح پایین (مقدار آبدوستی براي سطح بالا ثابت است، $\alpha = 0.0716$)..... 54
شکل (5-5) نمودار تغییرات فشار گاز و مایع نسبت به شعاع حباب. نوارهاي خطا نمایانگر انحراف معیار است که با تقسیم 600 پیکوثانیه‌ي آخر به بازده‌هاي 200 پیکوثانیه‌اي براي داده-گیری بدست آمده است. مقدار معمول انحراف معیار براي فشار گاز0.0009و براي فشار مایع0.006 است..... 57
شکل (5-6) نمودار فشار موضعی نسبت به فاصله‌ي شعاعی از مرکز حباب و شکل شماتیک مشخص کننده‌ي سطح مشترك مایع و گاز a) V2، b) V3، c) V4 و d) V5..... 59
شکل (5-7) تغییرات کشش‌سطحی نسبت به شعاع حباب، نوارهاي خطا نتیجه‌ي نوارهاي خطاي فشار گاز و مایع می‌باشد. داده‌هاي بدست آمده به طور مستقیم از روش دینامیک مولکولی با متوسط گیري در کل 600ps آخر بدست آمده‌اند..... 61
شکل(الف-1) شماتیکی از روش برازش دایره با سه نقطه..... 72
شکل(ج-1) شماتیک پارامترهاي هندسی حباب..... 75

فهرست جداول

جدول (3-1) مقادیر پارامترهاي پتانسیل لنارد-جونز براي گازهاي نجیب.....19
جدول (3-2) معادلات حاکم بر سیستم‌هاي مختلف.....22
جدول (4-1) پارامترهاي مربوط به هر یک از شبیه‌سازي‌ها.....39
جدول (5-1) پارامترهاي مربوط به هر یک از شبیه‌سازي‌ها و مقادیر زاویه‌ي تماس حباب با سطح.....56
جدول (5-2) مقادیر کشش‌سطحی، فشار مایع و گاز بدست آمده از هر شبیه‌سازي انجام شده62

فصل 1:

مقدمه

1-1-کلیات

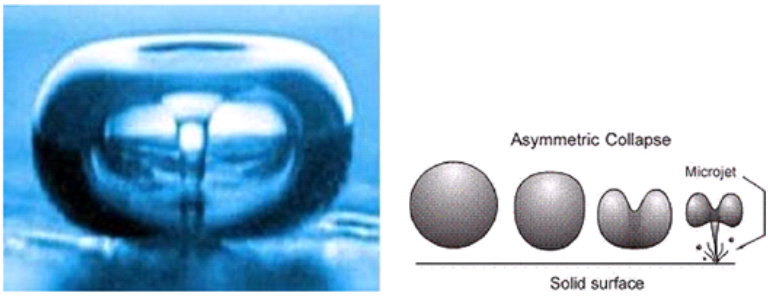
امروزه محاسبه به عنوان شاخه سوم علوم شناخته می‌شود و در کنار روش‌های تجربی و نظری با استفاده از آن می‌توان سیستم‌های مختلف را مطالعه و تحلیل کرد. شبیه سازی‌های رایانه‌ای به عنوان بخشی از علوم محاسباتی کاربردهای بسیاری در مطالعه فرایندهای شیمیایی، فیزیکی، زیست‌شناختی و البته در علوم مهندسی دارد. نقش در حال گسترش شبیه‌سازی رایانه‌ای دینامیک مولکولی در شاخه‌های مختلف علوم و قابلیت‌های منحصر به فرد این روش توجه بسیاری از محققان را به بهره‌گیری از آن جلب کرده است[1].

بررسی پدیده‌های بین سطحی مایع-گاز در میکرو-نانو حباب و قطره توجه بسیاری از دانشمندان در زمینه‌های مختلف را به خود جلب کرده است. در عین حال به دلیل ابهامات آماری موجود برای چنین پدیده‌هایی در مهندسی و شاخه‌های دیگر علوم[2-4]، همین‌طور روش‌های جدید تولید میکرو-نانو حباب[5] و البته کاربرد وسیع میکرو-نانو حباب در تکنولوژی ممز [1] و درمان های زیستی، تحقیقات در زمینه دینامیک قطره و حباب، و خواص فیزیکی آنها اهمیت بالایی پیدا کرده است. برخی از این کاربردها در شکل (1-1)، شکل (1-2)، شکل (1-3)، شکل (1-4) و شکل (1-5) آورده شده است.

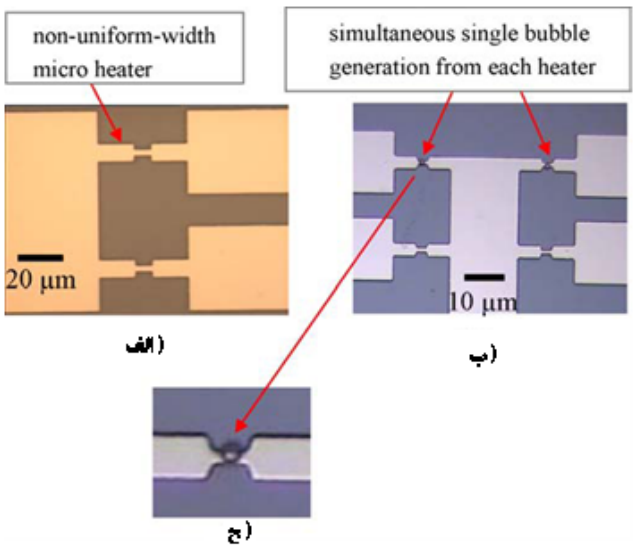
در شکل (1-1) نمایی از یک حباب متقارن که در حال ترکیدن[2] است را نشان می‌دهد. در فرایند ترکیدن حباب پارامتر کشش سطحی نقش اساسی را ایفا می‌کند.

[1] MEMS technology

[2] Collapse

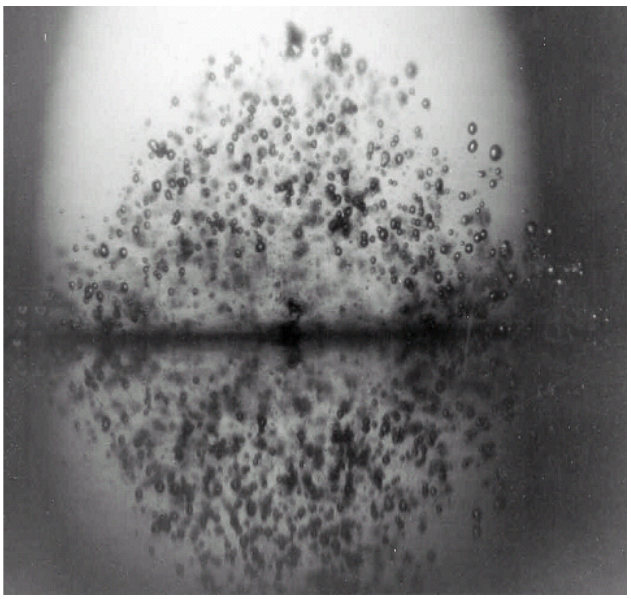


شکل (1-1) نمایی از ترکیدن یک حباب متقارن در نزدیکی سطح.[6]



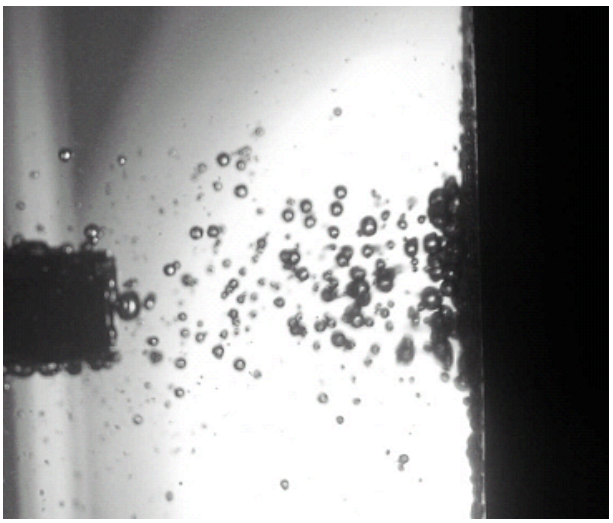
شکل (1-2) نمایی از دو موتور خطی میکرو **حباب**[1] با دو آرایش مختلف در شکل نشان داده شده است. الف) موتور خطی با آرایش 2×1، ب) موتور خطی با آرایش 2×2، ج)نمای نزدیک از حباب تشکیل شده.[7]

[1] Microbubble actuator

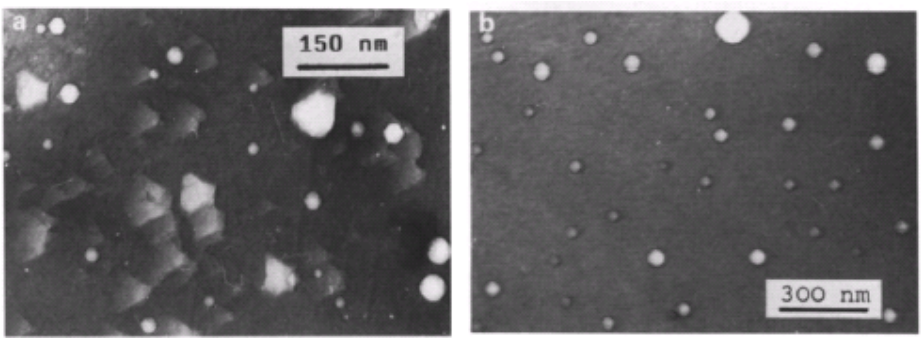


شکل (1-3) مجموعه‌اي از حباب‌ها در نزدیکی سطح که بخاطر کاهش فشار ایجاد شده‌اند و در صورت ترکیدن آسیب زیادی را به سطح خواهند زد.[8]

در شکل (1-4) نمایی از حباب‌های ایجاد شده با استفاده از دستگاه تولید امواج مافوق‌صوت نشان داده شده است. از امواج مافوق‌صوت برای تولید حباب در کلیه یا مثانه استفاده می‌شود. در این روش با استفاده از ضربه‌ی حاصله از ترکاندن حباب در نزدیکی سنگ کلیه یا مثانه آن را خورد می‌کنند سپس سنگ خورد شده از طریق مجاری ادراری دفع می‌شود.



شکل (1-4) **حباب**های ایجاد شده به استفاده از دستگاه تولید امواج مافوق صوت.[9]



شکل (1-5) نمایی از نانو حباب‌های هلیم ایجاد شده در یک فرایند آنیلینگ[1] [10].

روشهای آزمایشگاهی در بررسی کامل میکرو-نانو حباب و قطره به دلیل کوچک بودن ابعاد و شکننده‌گی و ظرافت آنها ناتوان هستند. به دلیل مشکلات متعددی که بر سر راه**حل‌های** آزمایشگاهی وجود دارد، تحتیقات با استفاده از روش دینامیک مولکولی بر روی چنین پدیده‌هایی ارزش چند برابری یافته است. شاید یکی از بهترین دلایل انتخاب چنین روشی برای بررسی خواص

[1] Anniling Process

و دینامیک پدیده‌های نانو این باشد که در چنین روشی، هر حالتی از ماده (گاز، مایع و جامد) و همین طور پدیده‌های چند فازی و سطح تماس میان دو فاز می‌تواند بدون دانستن خواص ترمو-فیزیکی مانند ضریب هدایت گرمایی، ویسکوزیته، دمای اشباع، کشش سطحی و ... شبیه‌سازی شود.

دینامیک مولکولی ابزار بسیار مناسبی برای بررسی و تحقیق در زمینه‌ی خواص و رفتار مواد و همین‌طور پدیده‌های ترموفیزیکی در ابعاد نانو را فراهم آورده است، با این حال استفاده کردن از این ابزار هزینه‌های محاسباتی زیادی را به ما تحمیل می‌کند. از این رو استفاده از تئوری‌ها و معادلات ماکروسکوپیک [1] می‌تواند راحتی زیادی را برای محققان به همراه آورد و البته تخمین‌های مناسبی را برای محاسبات مهندسی نانو بدست دهد. از طرف دیگر استفاده کردن از تئوری‌های ماکروسکوپیک در ابعاد نانو هنوز یکی از بحث‌انگیزترین موضوعات می‌باشد. بنابراین، پاسخ به این سوال که "تاکجا می‌توان از این تئوری‌ها و معادلات استفاده کرد؟" بسیار حائز اهمیت است.

یکی از این معادلات که با نوشتن یک رابطه‌ی ساده پایداری نیرو، میان فشار داخل و خارج یک قطره یا حباب بدست می‌آید، معادله‌ی یانگ-لاپلاس [2] است. در بخش بعد در کنار مرور تحقیقات گذشته در زمینه میکرو-نانو حباب‌ها، به بررسی دیدگاه‌های موجود در مورد استفاده از معادله‌ی یانگ-لاپلاس در ابعاد میکرو و نانو نیز خواهیم پرداخت.

[1] Macroscopic

[2] Young-Laplace equation