

بررسی و شبیه‌سازی پوشش نانویی در برخورد مایل نانو قطره توسط دینامیک مولکولی

آزیتا اروان*

گروه مکانیک، دانشگاه پیام‌نور، تهران

چکیده

برخورد قطرات نانو با سطح و سپس پخش شدن آن‌ها بر روی سطح، کاربردهای وسیعی در صنایع پیشرفته دارد. در این مقاله، شبیه‌سازی برخورد مایل نانو قطره با سطح توسط دینامیک مولکولی مطالعه شده و تاثیر عوامل فیزیکی بر روی پوشش‌های نانویی مورد بررسی قرار گرفته است. برای اجرای این تحقیق ابتدا منابع مورد مطالعه قرار گرفته و سپس مدل ریاضی مسئله نوشته شده و در ادامه کد نویسی برای حل عددی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی این فرآیند صورت گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که ضخامت لایه نانویی ایجاد شده با قطر نانو قطره ارتباط مستقیم دارد و همچنین افزایش سرعت برخورد در قطر پایین نانو قطره منجر به کاهش ضخامت لایه نانویی ایجاد شده و در قطر بالای نانو قطره منجر به افزایش ضخامت لایه نانویی ایجاد شده می‌گردد. در ایجاد پوشش‌های نانویی علاوه بر قطر و سرعت برخورد، زاویه‌ی تماس دینامیکی نقش بسزایی دارد به طوری که در شرایط یکسان افزایش زاویه‌ی تماس دینامیکی باعث کاهش ضخامت لایه نانویی می‌شود.

واژه‌های کلیدی: پوشش نانویی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، لمپس، نانو قطره.

ایمیل نویسنده مسئول: azita_arvan@yahoo.com

۱. مقدمه

امروزه به دلیل پیشرفت‌های علمی در زمینه‌ی ساخت تجهیزات در مقیاس میکرو و نانو، محاسبات در ابعاد نانو روشی مناسب و کم هزینه برای شبیه‌سازی و بررسی مشخصات سیستم‌های مورد نظر می‌باشد. به عبارت دیگر می‌توان گفت علم محاسباتی نانو مکمل علم آزمایشگاهی نانو به شمار می‌آید. تعیین کمیت‌های جریان، برای طراحی درست و عملکرد بهینه تجهیزات میکرو نانو و مخصوصاً تجهیزات پزشکی بسیار ضروری است [۱].

برخورد قطرات نانو با سطح و سپس پخش شدن آن‌ها بر روی سطح، کاربردهای وسیعی در صنایع از جمله پوشش‌دهنده‌های فلزی و غیرفلزی (به صورت حرارتی یا غیرحرارتی)، پوشش‌دهی سطح توربین بخار، خشک‌کن‌های پاششی، فرسایش خاک، پاشش سوخت در موتور و همچنین ساخت سلول‌های جدید خورشیدی و بسیاری از موارد دیگر دارد [۱، ۲]. رفتار قطره در برخورد با سطح جامد، تحت تاثیر رطوبت‌پذیری سطح می‌باشد [۳].

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان می‌دهد ارتباط مهمی بین زاویه‌ی تماس دینامیکی و سرعت برخورد قطره با سطح وجود دارد و بدین جهت می‌توان از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای تحقیقات بنیادی پدیده ترشوندگی و پخش شدن نانو قطره استفاده نمود [۴].

قطر نانو قطره دارای اثر مهم در رفتار دینامیکی یک قطره در طول برخورد آن بر روی یک سطح جامد است، این رفتار به عوامل

مختلفی از جمله زاویه‌ی تماس دینامیکی و سرعت برخورد بستگی دارد. اثر پخش شدن قطره بر روی سطح رطوبت‌پذیر شبیه‌سازی عددی شده است [۵]. ابتدا، با استفاده از تئوری جنبش مولکولی و بر اساس تحقیقات جدید در این زمینه، رابطه‌ای برای تعیین زاویه تماس در برخورد میکرو قطره به دست آمد و سپس از روش-های CFD برای تعیین زاویه و میزان پخش شدن قطره بر روی سطح رطوبت‌پذیر استفاده شده است. نتایج حاصل از مدل عددی با نتایج آزمایشگاهی و مدل‌های قبلی مقایسه شده است. پدیده برخورد قطره با سطح مورد توجه بسیاری از محققین بوده است [۸-۱].

در این مقاله، میزان پخش‌شوندگی نانو قطره بر روی سطح نیمه-رطوبت‌پذیر توسط دینامیک مولکولی مطالعه شده است. سپس عوامل موثر مانند سرعت برخورد، قطر نانو قطره و زاویه‌ی تماس دینامیکی که در ضخامت لایه نانویی نقش بسزایی دارند مورد بررسی قرار گرفته است.

۲. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اطلاعاتی در سطح میکروسکوپی (موقعیت و سرعت اتم) تولید می‌کند. جزئیات شبیه‌سازی به شکل زیر است:

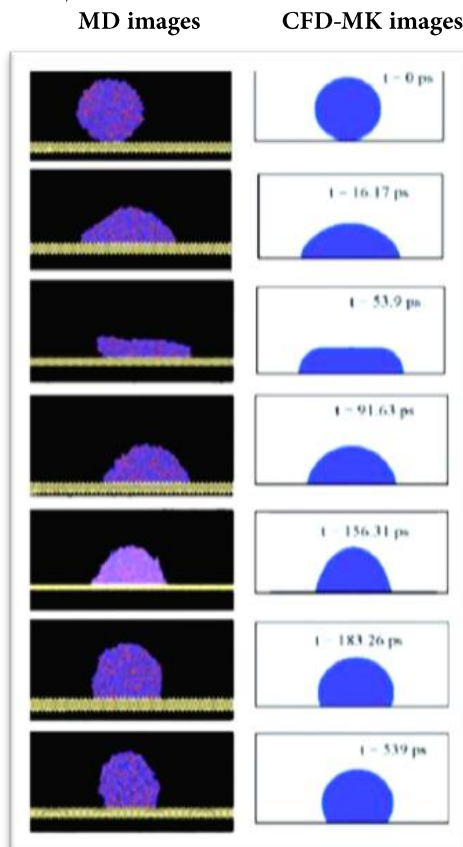
r مسافت و q بار بین اتم‌های i و j است. ϵ چاه پتانسیل و σ فاصله ای است که در آن پتانسیل برابر با صفر است. همچنین تابع پتانسیل در نظر گرفته شده بین اتم‌های طلا نیز به شکل زیر است:

$$E_{ij} = F_{\alpha} \sum_{i \neq j} p_{\beta} r_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{\alpha\beta} r_{ij} \quad (۲)$$

r_{ij} مسافت بین اتم i و j است. $\phi_{\alpha\beta}$ یک تابع پتانسیل دو به دو است. p_{β} چگالی بار الکترون اتم j از نوع β در موقعیت اتم i است. F تابع تعبیه که نشان دهنده انرژی مورد نیاز برای اتم i از نوع آلفا در ابر الکترونی است.

۴. اعتبار سنجی

برای بررسی و صحت اعتبار شبیه‌سازی انجام شده در این تحقیق شبیه‌سازی را با مقاله اسدی [۱۱] که در آن شبیه‌سازی توسط روش CFD-MK صورت گرفته است مقایسه می‌کنیم.

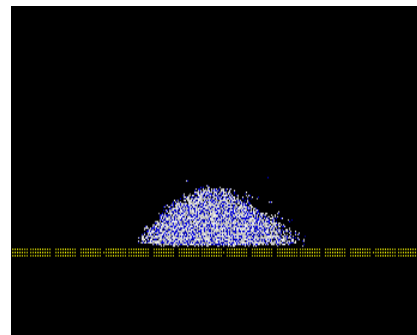


شکل ۲. مقایسه نانو قطره به قطر ۶ نانومتر با سرعت ۱/۲۵ آنگستروم بر پیکوثانیه (۱۲۵ متر بر ثانیه) با حل عددی CFD-MK [۱۱]

برای تولید هندسه اولیه مولکول آب و همچنین سطح طلا، ورودی کد لمپس نوشته شده و سپس کد لمپس اجرا گردیده است. ابتدا برای این امر یک باکس مکعبی از مولکول‌های آب تشکیل شده و سپس توسط معادله دایره قطرات با قطر دلخواه را به صورت کروی در آورده شده است. برخی از مولکول‌ها پس از محاط کردن دایره (کره) ناقص می‌مانند لذا برای رفع این مشکل از کد متلب بهره گرفته شده است. مطابق با پیشنهاد چن [۹]

برای مدل‌سازی مولکول‌های آب از مدل TIP₄P استفاده شده است. تابع پتانسیل بین مولکول‌های آب لنارد - جونز و تابع پتانسیل بین اتم‌های طلا eam تعریف شده است [۱۰]. برای نمایش داده‌های خروجی شبیه‌سازی انجام شده توسط لمپس از نرم‌افزار گرافیکی Vmd استفاده گردیده است.

برای بررسی سرعت‌های متفاوت کافیت سرعت مورد نظر را از رابطه فیثاغورث بین نانو قطره آب و برگه طلا پیدا نمود سپس در دستور سرعت موجود در کد ورودی لمپس اعمال کرد. زاویه تماس نیز از اعمال سرعت مناسب در دو محور x و z ایجاد می‌شود. منظور از زاویه تماس، زاویه‌ای است که قطره هنگام برخورد نسبت به سطح افقی یعنی برگه طلا دارد اما منظور از زاویه تماس دینامیکی، زاویه‌ای است که قطره هنگام حرکت بر روی سطح نسبت به برگه طلا دارد. در شکل زیر پخش شدن یک نانو قطره بر سطح نیمه‌رطوبت‌پذیر را مشاهده می‌کنیم.

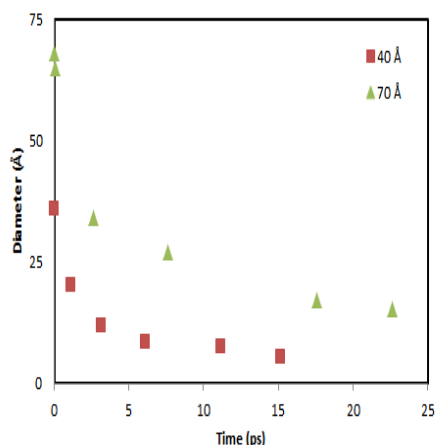


شکل ۱. پوشش نانویی با قطر ۷۰ آنگستروم و زاویه تماس دینامیکی ۳۰ درجه و سرعت ۵۰ آنگستروم بر پیکو ثانیه

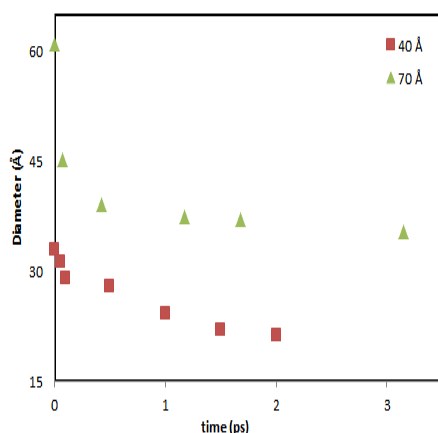
۳. معادلات حاکم

انتخاب تابع پتانسیل مناسب برای شبیه‌سازی از اهمیت بالایی برخوردار است. در صورتی که تابع پتانسیل نامناسب باشد با گذشت گام‌های زمانی شبیه‌سازی از هم پاشیده می‌شود. در این شبیه‌سازی تابع پتانسیل حاکم بین مولکول‌های آب، تابع پتانسیل لنارد جونز می‌باشد که به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۰]:

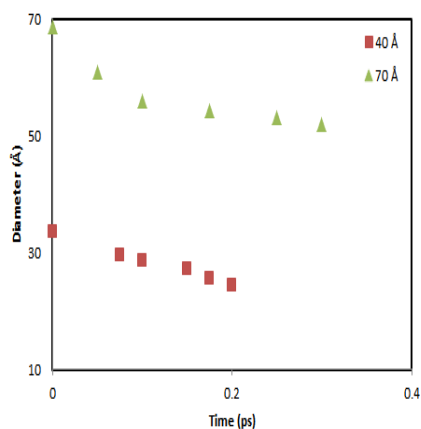
$$V_{ij} = \sum_{ij} \frac{q_i q_j e^2}{r_{ij}^2} + 4\epsilon_{oo} \left[\left(\frac{\sigma_{oo}}{r_{oo}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{oo}}{r_{oo}} \right)^6 \right] \quad (\square)$$



شکل ۴. ضخامت لایه‌ی نانویی ایجاد شده با قطرهای ۴۰، ۷۰ آنگستروم با زاویه‌ی ۶۰ درجه و سرعت ۵۰ آنگستروم بر پیکو ثانیه



شکل ۵. ضخامت لایه‌ی نانویی ایجاد شده با قطرهای ۴۰، ۷۰ آنگستروم با زاویه‌ی ۳۰ درجه و سرعت ۱۰۰ آنگستروم بر پیکو ثانیه



شکل ۶. ضخامت لایه‌ی نانویی ایجاد شده با قطرهای ۴۰، ۷۰ آنگستروم با زاویه‌ی ۶۰ درجه و سرعت ۱۰۰ آنگستروم بر پیکو ثانیه

همانگونه که در شکل فوق مشاهده می‌گردد نتایج دو شبیه‌سازی بسیار نزدیک به هم می‌باشد. مقدار خطا بین دو شبیه‌سازی برای پخش شدن نانو قطره ۳/۶ درصد می‌باشد.

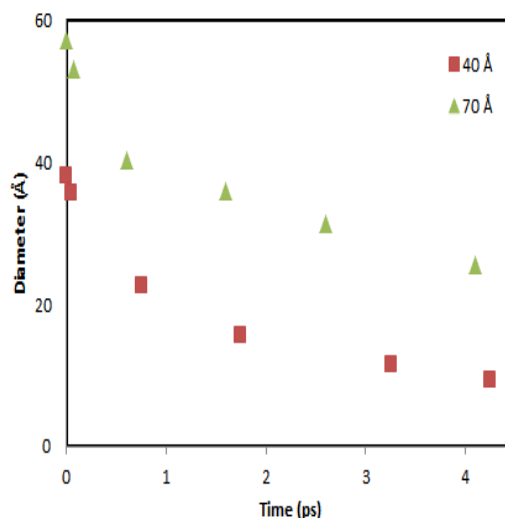
۵. نتایج و بحث

نتایج شبیه‌سازی برخورد نانو قطره به سطح نیمه‌رطوبت‌پذیر نشان می‌دهد که قطر نانو قطره با ضخامت لایه‌ی نانویی ایجاد شده رابطه مستقیم دارد. بدین منظور که افزایش قطر نانو قطره موجب افزایش مولکول‌های تشکیل‌دهنده در نتیجه افزایش ضخامت لایه‌ی نانویی می‌گردد. به دلیل وجود زاویه‌ی تماس دینامیکی، نانو قطره پس از برخورد، بر روی سطح پیشروی می‌کند بنابراین ضخامت لایه‌ی نانویی ثابت پس از پیشروی نانو قطره بر روی سطح حاصل می‌شود.

با توجه به شکل‌های ۳، ۴ این نتیجه حاصل می‌شود که در زاویه‌ی تماس دینامیکی ۶۰ درجه، نانو قطره پیشروی بیشتری بر روی سطح نسبت به زاویه‌ی تماس دینامیکی ۳۰ درجه دارد. در نتیجه برای رسیدن به مقدار ثابت از ضخامت لایه‌ی نانویی ایجاد شده، نانو قطره باید در بازه‌ی زمانی بیشتری با سطح در تماس باشد.

با مقایسه زاویه‌ی تماس دینامیکی نانو قطره با قطر خاص در سرعت ۵۰ آنگستروم بر پیکو ثانیه مشاهده می‌شود که افزایش زاویه‌ی تماس دینامیکی منجر به کاهش ضخامت لایه‌ی نانویی ایجاد شده می‌گردد.

افزایش سرعت برخورد نانو قطره با سطح باعث می‌شود که حداکثر ضخامت لایه‌ی نانویی ایجاد شده در زاویه‌ی تماس دینامیکی بیشتر رخ دهد. همچنین افزایش سرعت برخورد منجر به کاهش پیشروی نانو قطره بر روی سطح در نتیجه کاهش بازه‌ی زمانی نانو قطره با سطح می‌شود.



شکل ۳. ضخامت لایه‌ی نانویی ایجاد شده با قطرهای ۴۰، ۷۰ آنگستروم با زاویه‌ی ۳۰ درجه و سرعت ۵۰ آنگستروم بر پیکو ثانیه

۶. نتیجه‌گیری

- [6] M. Bussmann, J. Mostaghimi, S. Chandra, *Physics of Fluids*, 11(6), 1406-1417, (1999).
- [7] J. Fukai, Y. Shiiba, T. Yamamoto, and O. Miyatake, et al, *Physics of Fluids*, 7(2), 236-247, (1995).
- [8] IS. Bayer, CM. Megaridis, *Journal of Fluid Mechanics*, 558, 415-449, (2006).
- [9] C. K. Chan, H. Peng, G. Liu, and K. McIlwrath, et al, *Nature nanotechnology*, 3(1), 31-35, (2008).
- [10] Sandia National Laboratories, *Lammps User Manual*. Retrieved from <http://lammps.sandia.gov>, (2009).
- [11] S. Asadi, *International Journal of Nano Dimension*, 3(1), 19-26, (2012).

در این تحقیق به بررسی شبیه‌سازی برخورد نانو قطره با سطح صاف (نیمه‌رطوبت‌پذیر) با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداخته شد. اثرات سرعت برخورد سیال، قطر نانو قطره، زاویه تماس دینامیکی بر روی ضخامت لایه نانووی مورد بررسی قرار گرفت و نتایج زیر به دست آمد:

- قطر نانو قطره با ضخامت لایه نانووی ایجاد شده رابطه مستقیم دارد.
- در بررسی پخش شدن نانو قطره بر روی سطح نیمه‌رطوبت‌پذیر این نتیجه حاصل می‌گردد که نانو قطره پس از برخورد بر روی سطح پیشروی داشته سپس به ضخامت لایه نانووی ثابت می‌رسد.
- ایجاد پوشش‌های نانووی تحت تاثیر عوامل قطر نانو قطره، سرعت برخورد و زاویه تماس دینامیکی می‌باشد.
- با مقایسه سرعت برخورد در زاویه تماس دینامیکی ثابت مشاهده می‌گردد که افزایش سرعت برخورد در قطر پایین نانو قطره منجر به کاهش ضخامت لایه نانووی ایجاد شده و در قطر بالای نانو قطره منجر به افزایش ضخامت لایه نانووی ایجاد شده می‌گردد.
- در سرعت برخورد بالای نانو قطره با سطح، بازه زمانی تماس نانو قطره با سطح نیمه‌رطوبت‌پذیر بسیار کوتاه است.
- تاثیرات زاویه تماس دینامیکی بر روی ضخامت لایه نانووی ایجاد شده وابسته به سرعت برخورد نانو قطره است.
- در بررسی پوشش‌دهی نانو قطره مشاهده می‌شود که افزایش زاویه تماس دینامیکی باعث کاهش ضخامت لایه نانووی ایجاد شده می‌شود یعنی زاویه تماس دینامیکی با میزان پوشش‌دهی نانووی رابطه‌ی عکس دارد.

۷. منابع

- [1] M. Pasandideh-Fard, S. Chandra, J. Mostaghimi, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(11), 2229-2242, (2002).
- [2] M. Pasandideh-Fard, V. Pershin, S. Chandra, and J. Mostaghimi, *Journal of Thermal Spray Technology*, 11(2), 206-217, (2002).
- [3] M. Pasandideh-Fard, YM. Qiao, S. Chandra, and J. Mostaghimi, *Physics of Fluids*, 8, 650-659, (1996).
- [4] N. Sedighi, S. Murad, S. Aggarwal, *Atomization and Sprays*, 19(2), 191-205, (2009).
- [5] S. Asadi, M. Pasandideh-Fard, M. Moghiman, *Iranian Journal of Surface Science and Engineering*, 6, 27-42, (2009).