

((یادداشت مهندسی))

## محاسبه ویسکوزیته نانو سیال مدل فرضی SPC آب در دینامیک

## مولکولی

وحید زارعی<sup>۳</sup>

دانشگاه بین‌المللی امام خمینی، قزوین

علیرضا شاطری<sup>۱</sup> و محمدمهدی زارعی کردشولی<sup>۲</sup>

دانشکده مهندسی مکانیک

دانشگاه شهرکرد

(تاریخ دریافت: ۹۴/۱۲/۱۹؛ تاریخ پذیرش: ۹۵/۱۲/۲۵)

## چکیده

در این تحقیق از مدل شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای محاسبه ویسکوزیته نانو سیال حاوی نانو ذرات مس استفاده شده است. در ابتدا، نانو ذرات مس به صورت ناحیه کروی بین نانو سیال پایه آب با مدول سه‌گانه SPC قرار گرفته‌اند. سیستم تحت شرایط مرزی تعیین شده و کد نویسی در نرم‌افزار لمپس و کسر حجمی‌های ۳/۲ و ۴/۴ و ۶/۹ و ۹/۱ درصد تحت حرکت براونی‌اتم‌ها مورد اجرا قرار گرفته است. سه تابع پتانسیل معروف لنارد جونز، کولمب و روش جاسازی اتمی به کار گرفته شده‌اند. از بین روش‌های دینامیک تعادلی و دینامیک غیرتعادلی، روش دینامیک تعادلی و معادله گرین-کوبو برای محاسبه ویسکوزیته به کار گرفته شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که به طور کلی با اضافه شدن نانو ذرات مس به سیال آب و افزایش درصد کسر حجمی، مقدار ویسکوزیته نیز افزایش می‌یابد. نانو سیالات علاوه بر کسر حجمی ذرات تابع، عوامل دیگری، نظیر حرکت براونی و پدیده خوشه شدن دارند که هر یک به نوبه خود باعث تغییراتی در مقدار ویسکوزیته می‌شود. نتایج شبیه‌سازی با کارهای دیگران و مدل پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی مقایسه و مشخص شد که از دقت قابل توجهی برخوردارند.

**واژه‌های کلیدی:** پتانسیل بین‌اتمی، دینامیک مولکولی، ویسکوزیته، معادله گرین-کوبو، نانو سیال، دینامیک تعادلی، پدیده خوشه شدن

## Calculation of the Viscosity of Nanofluid Water SPC Model in Molecular Dynamics

A. Shateri and M.M. Zarei Kurdshouli

Mech. Eng. Department  
Shahrekord University

V. Zarei

Imam Khomeini International University

(Received:9/March/2016; Accepted: 15/March/2017)

## ABSTRACT

This paper presents molecular dynamics modeling for calculating viscosity of nanofluids containing copper nanoparticles. In the first case, the copper nanoparticles were located as a spherical region in water-based fluid module SPC. System under specified boundary conditions, and writing code by LAMMPS software, and nanofluid ratios of 3.2,4.4,6.9 and 9.1 percented by Brownian motion of atoms, was carried out. three popular potential function, Lennard-Jones, Coulomb, and embedded atom method were used. Between equilibrium molecule dynamic, and non-equilibrium molecule dynamic, (EMD) and Green-kubo formula were used to calculate viscosity. The results show that by increasing the amount of volume fraction, viscosity increases. nanofluids in addition to other factors, such as volume fraction of particles in Brownian motion and clustering phenomenon, each in turn causes changes in viscosity. The simulation results were compared with other's works and found that the obtained results are remarkably accurate.

**Keywords:** Pair Potential, Molecular Dynamics, Viscosity, Green-Kubo Equation, Nanofluids, Dynamic Balance, Clustering Phenomenon

۱- استادیار: (نویسنده پاسخگو): shateri@eng.sku.ac.ir

۲- کارشناس ارشد: mmehdizarei1991@gmail.com

۳- کارشناس ارشد: zaree.vahidi66@gmail.com

## فهرست علائم

F	نیروی برهم کنش (N)
F <sub>ex</sub>	نیروی خارجی (N)
k <sub>B</sub>	ثابت بولتزمن (1.3806504e-23kg/ s <sup>2</sup> K)
ke	انرژی جنبشی (J)
m	جرم مولکول (kg)
r <sub>ij</sub>	فاصله بین مولکول i و مولکول j (nm)
T	دما (K)
t	زمان (ns)
v	سرعت (m/s)
x, y, z	مختصات مولکولها
μ <sub>bf</sub>	ویسکوزیته سیال پایه
μ <sub>nf</sub>	ویسکوزیته نانوسیال
h	آنتالپی
σ	مقیاس مسافت بین مولکولی (nm)
τ	زمان مشخصه (ns)
ε	عمق چاه پتانسیل لنارد_ جونز (J)

## ۱- مقدمه

ایده پراکنده سازی ذرات جامد در سیالات، با توجه به بالا بودن رسانش جامدات فلزی و اکسیدهای آن‌ها و کوچک بودن اندازه این ذرات، (حدود ۱ تا ۱۰۰nm) در سال ۱۸۸۱ به وسیله پراکنده سازی ذرات میکرومتری عملی شد [۱-۲]. در سال ۱۹۹۵ در آزمایشگاه ملی آرگون در ایالات متحده امریکا چوی واژه نانو سیال را برای سیالی با نانو ذرات معلق در آن به کار برد [۳]. برحسب کاربرد نانوسیالات آن‌ها را به سه دسته نانوسیالات انتقال حرارت، روان کننده و مغناطیسی تقسیم بندی می کنند. نانوسیالات مغناطیسی که فروسیال نیز نامیده می شود، محلول کلئیدی پایدار است که شامل نانو ذرات مغناطیسی پراکنده شده در یک سیال پایه است [۴].

نانوسیالات در مقایسه با سوسپانسیونها، در مقیاسهای میکرومتر و میلی متر دارای پایداری بهتری بوده، خصوصیات رئولوژیکی بهتر [۵] و به طور قابل ملاحظه ای رسانندگی گرمایی بزرگتری دارند. نانوسیال بسیار شبیه سیال تک فاز عمل می کند تا مخلوط متداول (سیال/جامد)، نانوسیال طبیعتاً دوفازی و گونه ای از مخلوط سیال/جامد است. در سالهای اخیر

بسیاری از پژوهشگران هم به صورت تئوری و هم به صورت آزمایشگاهی اثرات نانوسیالات را بر افزایش انتقال حرارت ابزارهای مهندسی بررسی کرده اند. ایشان همچنین گستره ای از روشهای متنوع آماده سازی، خصوصیات و مدل های مختلف استفاده شده برای محاسبه ویژگی های ترموفیزیکی نانوسیالات (برای مثال رسانندگی گرمایی، ویسکوزیته، چگالی، ظرفیت گرمایی ویژه) را تا به حال استفاده کرده اند. از جمله این روشها استفاده از مخلوط کردن سیالات متداول انتقال حرارت نظیر آب (سیال پایه) و ذرات جامد با ابعاد نانومتری می باشد.

در مسئله بازده انتقال حرارت در تجهیزاتی نظیر مبدل های حرارتی، هدایت حرارتی سیال حامل انرژی و ضریب جابجایی انتقال حرارت نقش اساسی را بر عهده دارند. سیالات متداول در انتقال حرارت و حامل انرژی در صنایع را معمولاً آب، روغن ها و اتیل گلیکول تشکیل می دهند. با افزایش رقابت جهانی در زمینه صنایع مختلف و نقش انرژی در هزینه تولید، این صنایع به شدت به سمت توسعه سیالات پیشرفته و جدید با شاخص های حرارتی بالا پیش می روند.

به خوبی مشخص است که فلزات در شکل جامد خود دارای هدایت حرارتی بسیار بالایی نسبت به سیالات هستند. به عنوان مثال هدایت حرارتی مس در دمای محیط حدود ۷۰۰ برابر آب و ۳۰۰۰ برابر روغن موتور است. از طرفی هدایت حرارتی مواد فلزی نیز بسیار بیشتر از مواد غیرفلزی است. دستاورد جدید نانوفناوری این امکان را فراهم آورده تا بتوان ذراتی با اندازه بسیار کوچک نانومتری تولید و فرآوری کرد. این پیشرفت سبب شد تا در سال ۱۹۹۳ فکر استفاده از نانوذرات فلزی در داخل سیالات حامل انرژی نظیر آب و اتیلن گلیکول ایجاد و موضوع نانوسیالات به عنوان موضوع جدید انتقال حرارت مطرح گردد.

کاهش اندازه ذرات یک جامد که توأم با افزایش تعداد آن‌ها در واحد جرم می باشد، منجر به افزایش سطح مخصوص می گردد. به طوری که سطح مخصوص ذراتی با اندازه نانومتری در حدود ۱۰۰۰ برابر سطح مخصوص ذراتی با ابعاد میکرومتر می باشد. با کاهش ذرات به حدود نانومتر درصد بیشتری از اتم های آن در نزدیکی سطح قرار می گیرند. سطح ذرات در انتقال حرارت مؤثر بوده و استفاده از نانوسیال به افزایش سطح انتقال حرارت منجر می شود. نانوذرات به کار گرفته شده یک

تکامل ساختار در اتصال را می‌دهد که در آزمایش‌ها تقریباً مشاهده آن غیرممکن است [۶].

معادله عمومی حرکت برای  $N$  ذره در سیستم به وسیله معادله زیر بیان می‌شود:

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N F_{ij} = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad i=1,2,3,\dots,N, \quad (1)$$

که  $F_{ij}$  نیروی وارد بر اتم  $i$  به وسیله اتم  $j$  و  $m_i$ ،  $r_i$  جرم و موقعیت اتم  $i$  را نشان می‌دهد. (یکی از محدودیت‌های معادله نیوتن نیاز به معادلات اضافی برای توصیف حرکات چرخشی است.)

بسیاری از نیروهای در بعد ماکرو، با کوچک شدن ذرات و سطح بسیار بالای آن‌ها، تاثیر خود را از دست می‌دهند و جای خود را به نیروهای بین مولکولی می‌دهند. از دید مولکولی، فرضیات جریان ماکرو زیر سوال می‌رود، زیرا رفتار سیال در مقیاس کوچک تغییر می‌کند و مقیاس طول اهمیت پیدا می‌کند. فرضیه پیوستگی در ابعاد مولکولی به علت وجود فواصل بین مولکولی صدق نمی‌کند؛ بنابراین، برای توجیه رفتار سیالات در این بعد، یا مدل‌های و مولکولی که فرضیه پیوستگی در آن نقشی ندارند را با در نظر گرفتن محدودیت‌هایی استفاده می‌کنند.

روش دینامیک مولکولی برای اولین بار در سال ۱۹۵۰ برای مطالعه اثر متقابل ذرات کروی سخت معرفی و باعث فهم بهتر رفتار مایعات و جامدات ساده شد. بدین ترتیب با توجه به پتانسیل‌های موجود در دینامیک مولکولی و ثابت بودن، (می‌توان گفت منحصر به فرد بودن) رفتار مایعات و جامدات، (نیروها و خواص و ...) در شرایط استاندارد، درک و فهم بهتری از آن‌ها به دست می‌آید [۱۰-۷].

پیشرفت‌های مهم بعدی در سال ۱۹۶۴ زمانی که رحمان (از وی به عنوان پدر دینامیک مولکولی یاد می‌شود) شبیه‌سازی را با استفاده از پتانسیل‌های واقعی برای آرگون مایع انجام داد. او در این شبیه‌سازی جریان پوازی حاوی آرگون مایع درون یک نانوکanal را با اعمال نیروی خارجی روی ذرات سیال، با استفاده از تابع پتانسیل مختلف انجام داد [۱۱].

سطح بسیار زیاد برای موضوع انتقال حرارت ایجاد می‌کند و همین عامل یک مزیت بالقوه برای نانوسیال می‌باشد.

مقایسه سطح ایجاد شده برای انتقال حرارت در نانو ذرات با سطح پودرهای متداول میکرومتری بیانگر توانایی و قابلیت زیاد نانو ذرات در افزایش انتقال حرارت و ایجاد سوسپانسیون پایدار می‌باشد. لازم به ذکر است که یکی از مشکلات افزودن ذرات به اندازه میکرو به سیال پایه، باعث ته‌نشینی سریع آن‌ها می‌باشد، که با کاهش اندازه به مقیاس نانو تا حدود زیادی مرتفع می‌گردد.

## ۲- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

دینامیک مولکولی، شبیه‌سازی رایانه‌ای حرکات فیزیکی اتم‌ها و مولکول‌هاست. اتم‌ها و مولکول‌ها برای یک دوره از زمان اثر متقابل دارند و در این دوره حرکت اتم‌ها بررسی می‌شود. در این روش مسیر حرکت مولکول‌ها و اتم‌ها در هرگونه هندسه و سیستم ممکن، با حل عددی معادلات حرکت نیوتن برای یک محفظه از ذرات با اثر متقابل به دست می‌آید. نیروهای بین ذرات و انرژی پتانسیل توسط میدان‌های نیروی مکانیکی مولکولی تعیین می‌شود.

در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، شرایط اولیه سیستم از حالت تعادل دور هست. از این رو اولین مرحله شبیه‌سازی در دینامیک مولکولی بایستی در زمان تعادل انجام گیرد تا سیستم به حالت تعادل خود برسد. هنگام به تعادل رسانی، خواص ترمودینامیکی و ساختاری کنترل شده، تا این‌که در نهایت پایدار می‌شوند.

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی محاسبات عددی مسیر تخمین زده یک اتم یا مولکول است. شبیه‌سازی کلاسیک دینامیک مولکولی بر پایه قانون دوم نیوتن حرکت پتانسیل بین‌اتمی نیوتن پایدار است. با دانستن جرم و پتانسیل بین‌اتمی، موقعیت بعدی در زمان به دست می‌آید.

نتایج روش‌های محاسبه شده، مشخص شدن خواص و ویژگی است مثل ویسکوزیته<sup>۱</sup>.

با توانایی پیش‌بینی موقعیت اتم‌ها در هرگام زمانی، با توجه به قانون دوم نیوتن، دینامیک مولکولی به ما امکان مشاهده نحوه

## ۱-۲- هنگردهای متداول در دینامیک مولکولی

با ثابت نگه داشتن پارامترها امکان شبیه‌سازی هنگردهای مختلف ایجاد می‌شود. هنگرد ها انواع مختلفی دارد که با توجه به نوع کاربرد، یکی از آن‌ها را انتخاب می‌کنند.

### ۱-۱-۲- هنگرد میکروکانونیک

این هنگرد که پیش‌فرض دینامیک مولکولی است، به تعداد، حجم و انرژی ثابت معروف است و به‌سادگی قابل پیاده‌سازی است. در این هنگرد تعداد اتم‌ها، حجم شبیه‌سازی و انرژی کل ثابت است. برای ثابت نگه‌داشتن انرژی کافی است از اعمال نیروهای خارجی در معادله‌های حرکت جلوگیری کرد. بدین‌وسیله انرژی کل سیستم باید ثابت بماند.

### ۲-۱-۲- هنگرد کانونی بزرگ

در این هنگرد که تعداد، فشار و دما ثابت<sup>۲</sup> نیز نامیده می‌شود علاوه بر تعداد ذرات و دمای سیستم، فشار نیز ثابت باقی می‌ماند. تثبیت فشار در شبیه‌سازی به‌مراتب سخت‌تر از تثبیت دماست. در این شبیه‌سازی از روش‌هایی مانند نوز<sup>۳</sup> هور معادله حرکت را به‌گونه‌ای تغییر می‌دهند که به‌طور هم‌زمان دما و فشار ثابت بماند.

ساده‌ترین پتانسیل بین‌اتمی، عکس‌العمل بین دواتم است - که این نوع از پتانسیل با عنوان پتانسیل دوگانه<sup>۴</sup> شناخته می‌شود. پتانسیل‌های دوگانه شامل کولمب، قانون دوم نیوتن، لناردجونز و پتانسیل مورس می‌باشند.

عکس‌العمل بین‌اتمی نانو ذرات به‌وسیله پتانسیل لنارد جونز به‌صورت زیر است:

$$U_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (2)$$

که  $\epsilon$  و  $\sigma$  سیگما به ترتیب پارامترهای انرژی و طول هستند و  $r$  فاصله بین‌اتمی است. پتانسیل لنارد جونز در مقایسه با سایر پتانسیل‌های شبیه‌سازی برای مس هزینه‌های محاسباتی کمتری دارد. در اینجا مولکول‌های آب تحت عنوان مدل بار نقطه ای ساده<sup>۴</sup> که یک مولکول آب سه وجهی صلب باردار

اولین شبیه‌سازی یک سیستم واقعی در سال ۱۹۷۴ توسط رحمان و استفلنر روی آب مایع انجام گرفت. این شبیه‌سازی که در واقع روی مدل‌های موجود برای آب انجام گرفت، با ارائه نمودارها و نتایج هرکدام از مدل‌های آب را با توجه به شرایط و فرضیات مساله موردبررسی قرارداد [۱۲].

در دهه‌ی گذشته به‌طور وسیع از روش دینامیک مولکولی برای شبیه‌سازی بسیاری از پدیده‌های فیزیکی مانند انواع خواص مکانیکی و انواع فرایندهای تولیدی و متالوژی استفاده شده است. به‌طوری‌که دامنه کاربرد آن‌ها حتی به صنایع پیچیده، اعم از شرکت‌های هوافضا نیز رسیده است که از دینامیک مولکولی برای خنک‌سازی قطعات حساس آن‌ها استفاده می‌شود [۱۳].

مارکوس و تامسون روی خواص ترمو فیزیکی مانند ویسکوزیته و چگالی سیالات کاربردی در صنعت، به‌صورت عددی کارکردند و نتایج آن‌ها در زمینه نیروها، از دقت خوب و قابل توجهی برخوردار است [۱۴].

بوتون و همکاران روی خواصی مانند ضریب نفوذ و ویسکوزیته سیال آب کار کردند و بعد از آزمایش و مقایسه، مدل ایده‌الی از نوع مدل مولکولی آب و بهینه‌سازی خواص بالا در سیال ارائه دادند [۱۵].

فرانکی و رومنس روی فرمول‌ها و پارامترهای مربوط به خواص سیالات و مقدار دقیق آن‌ها و یک سری اصلاحیه‌هایی مربوط به شرایط استاندارد در قالب جدول و نمودارها ارائه دادند [۱۶].

رجب پور و همکاران که روی مدل‌سازی نانوسیال آب- مس برای محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه کارکردند، به نتایج قابل قبول، (به این صورت که با تغییرات میزان درصد نانو ذرات مس میزان تغییرات ظرفیت گرمایی ویژه نیز چشمگیر است. آن‌ها درصد تمرکز حجم نانو ذرات مس را تغییر و نتایج به‌دست‌آمده را با کارهای دیگران مقایسه کردند). رسیدند [۱۷].

در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به دلیل گستردگی مبحث، معمولاً بعضی از شرایط و پارامترهای حالت را ثابت و بقیه پارامترهای موردنظر را مورد بررسی قرار می‌دهند. در اصطلاح به این شرایط حکم‌فرما بر مساله هنگرد می‌گویند.

1- Number, Volume, Energy (NVE)

2- Number, Pressure, Temperature (NPT)

3- Pair Potential

4- Simple Point Charge (SPC)

شبهه‌سازی دینامیک مولکولی متشکل از حل عددی معادلات حرکت کلاسیک است. برای این منظور باید همه نیروهای وارد بر اتم‌ها محاسبه شود. بنابراین تعداد محدودی از نانو سیالات را درون محفظه‌ای که اندازه‌های آن در حد نانو است، در نظر گرفته می‌شود و با اعمال شرایط مرزی مختلف، (شار ثابت، دما ثابت و یا عایق بودن) خواص ترموفیزیکی نانوسیال، به دست آورده می‌شود. تابع پتانسیل در داخل سیستم با نیروهای مولکولی می‌تواند پیچیده شود. طبیعت پیچیده آن‌ها به علت اثرات کوانتومی پیچیده در حال وقوع در سطح زیراتمی است. به‌منظور به دست آوردن نتایج قابل قبول در شبهه‌سازی رایانه‌ای دینامیک مولکولی، پتانسیل‌های بین‌اتمی کلاسیک باید به‌صورت قابل‌توجهی اثرات کوانتومی را نمایش دهد. به‌طور معمول تابع پتانسیل تابع مشاهدات تجربی است و همچنین مدل‌سازی و شبهه‌سازی در مقیاس کوانتومی است [۷-۸].

در شبهه‌سازی دینامیک مولکولی به دلیل کار کردن با اعداد بسیار کوچک و برای جلوگیری از افزایش حجم محاسبات و خطاهای ایجادشده از واحدهای کاهیده مانند جدول ۱ استفاده می‌شود.

انرژی پیوندی و فاصله پیوندی بین اتم‌های اکسیژن- هیدروژن- مس در سطح مشترک با یکدیگر بر طبق قانون اختلاط لورنتس- برتولت به‌صورت زیر به دست می‌آید:

$$\sigma_{1-2} = \frac{(\sigma_1 + \sigma_2)}{2}, \quad (3)$$

$$\varepsilon_{1-2} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}. \quad (4)$$

جدول (۱): دستگاه کاهیده لنارد جونز.

واحد کاهیده	کمیت
$F/(\varepsilon/\sigma^2)$	نیرو
$V/(\sigma/\tau)$	سرعت
$E/\varepsilon$	چگالی
$t/(\frac{\sigma m^{1/2}}{\sigma^{1/2}})$	زمان
$L/\sigma$	طول

پارامترهای پتانسیل لنارد جونز برای برهم‌کنش‌های بین‌اتمی در جدول ۲ آمده است.

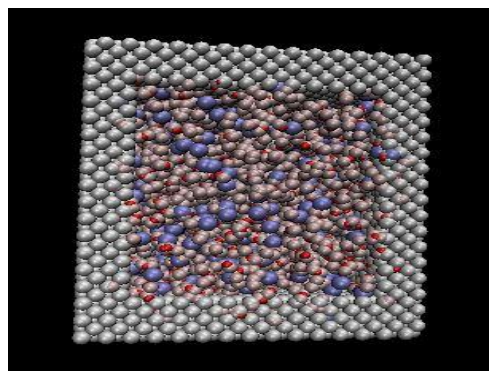
است، فرض می‌شود. این مدل به دلیل سادگی و کارایی محاسباتی در بین شبهه‌سازی دینامیک مولکولی بسیار معروف است. برای محاسبه عکس‌العمل‌های کولمبیک از روش مش ذره ذره<sup>۱</sup> استفاده شده است. به دلیل مشارکت توزیع بار در نیروی تقابل بین ذره‌ای، الگوریتم PPPM برای محاسبه جمله پتانسیل الکتریکی استفاده شده است.

### ۳- اهداف اصلی طرح

در این تحقیق بررسی خواص ترموفیزیکی تعداد محدودی از نانوسیال، (با توجه به کاربرد آن‌ها در بحث صنعت که برای خنک‌سازی لوازم و قطعات پیچیده و حساس شامل ابرکامپیوترها و موارد پزشکی) مشاهده چگونگی رفتار آن‌ها و بررسی ویسکوزیته در محفظه‌ای مربعی، مطابق شکل ۱ تحت شرایط مرزی‌های تعیین شده است.

به‌عبارت‌دیگر تعداد محدودی از نانوسیال ات (به دلیل زیاد بودن واکنش‌ها و نیروهای بین‌مولکولی، تعداد مولکول‌ها را محدود می‌کنند) را در محفظه مربعی، بررسی و داده‌های به‌دست‌آمده را با نتایج کار دیگران مقایسه و نتیجه‌گیری می‌شود.

محفظه مربعی شکل ۱ به این صورت است که سیال موجود آب و نانو ذرات مس که به صورت ناحیه‌ای آبی رنگ است، در بین آب قرار دارد. شرایط مرزی مسئله به این صورت است که دیواره محفظه ثابت و مولکول‌ها باید در شرایط تعادل دینامیکی قرار گیرند تا پارامترهای دلخواه مورد بررسی قرار گیرند.



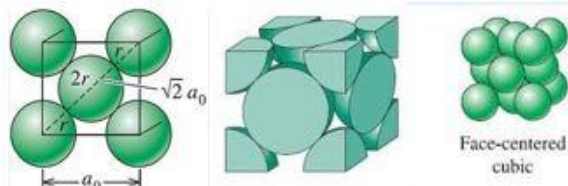
شکل (۱): تصویر سیستم شبهه‌سازی شده در زمان تعادل نانوسیال آب- مس که نانو ذرات مس به‌صورت کره‌های آبی تحت حرکت براونی مشخص شده‌اند.

سرعت اولیه ذرات سیال به صورت تصادفی بر اساس دمای داده شده، به سیستم اعمال شده است. این توزیع تصادفی بر اساس ماکسول- بولتزمن که یک تابع توزیع گاوسی است به سیستم اعمال شده است که برای یک گاز ایده ال این توزیع به صورت زیر است [۱۸-۱۹]:

$$P(v) = \left[ \frac{m}{2\pi k_B T} \right]^{3/2} \exp \left[ -\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2\pi k_B T} \right]. \quad (5)$$

در این تحقیق همچنین از نرم افزار توانمند VMD<sup>۳</sup> استفاده شده است. در واقع خروجی برنامه لمپس به عنوان ورودی نرم افزار VMD محسوب می شود.

VMD همان دینامیک مولکولی دیداری، در واقع یک برنامه تحلیلی و مشاهده مولکولی است که برای سیستم های بیولوژیکی مثل پروتئین، نوکلئیک اسید ها... طراحی شده است. این نرم افزار به وسیله تیم تحقیقاتی دانشگاه ایلینویز آمریکا طراحی شده است در بین برنامه های گراف مولکولی، VMD توانایی بی نظیری در کارآمدی عملکرد روی چندین گیگابایت دینامیک مولکولی را دارد [۲۰].



شکل (۲): سلول واحد با ساختار شبکه مرکز پر \_ وجوه پر

نیروی میدانی روش جاسازی اتمی<sup>۴</sup> بر پایه شبیه سازی ها، یک توصیف کارآمد محاسباتی از ساختار، مکانیک و ویژگی های دمایی سیستم های فلزی که شامل نفوذ، تغییر شکل های پلاستیکی و شکستی می باشد، را ارائه می دهد. در واقع با ارزیابی انرژی و نیروها، حتی برای مجموعه ی زیاد اتم ها در مقایسه با محاسبات اصولی اولیه، عملکرد بهتری دارد. پتانسیل EAM بیانگر مدل مشترک پیوندی اتمی در سیستم های فلزی است [۲۱-۲۳].

در روش جاسازی اتمی انرژی کل یک سیستم به صورت رابطه (۶) تعریف می شود:

جدول (۲): پارامترهای پتانسیل لنارد جونز برای مدل فرضی spc آب.

نوع عکس العمل ها	$\epsilon(kcal / mol)$	$\sigma(A^0)$
مس- مس	۹/۴۳۹	۲/۳۳۷
اکسیژن- اکسیژن	۰/۱۵۲۱	۳/۱۶۶
هیدروژن- هیدروژن	۰/۰۴۶	۰/۴
هیدروژن- اکسیژن	۰/۰۸۳۶	۱/۷۷۵
هیدروژن- مس	۰/۰	۰/۰۰۹
اکسیژن- مس	۱/۲۱۰۵	۱/۵۹۲

#### ۴- روش شبیه سازی

سیستم مورد تحقیق شامل یک مکعب با اندازه  $24A^0 * 24A^0 * 24A^0$  که حاوی حدود ۱۶۰۰ مولکول آب و اتم های مس به صورت بلور و ساختار<sup>۱</sup> مرکز پر-وجوه پر با ثابت بلوری ۳۰۶۱۵ تحت پتانسیل روش جاسازی اتمی و حرکت براونی در مرکز مکعب قرار گرفته اند.

سیستم درهنگرد NPT که تعداد مولکول ها، فشار و دما ثابت است اجرا می شود. Fix water npt در دماهای تعیین شده بر سیستم حکم فرما است. روش دینامیک مولکولی تعادلی بر پایه استفاده از دستور فیکس<sup>۲</sup> برقرار است.

در تعادل دینامیکی از گام زمانی ۱ فمتو ثانیه استفاده شد و داده ها و نمونه ها هر ۲۰۰۰ گام زمانی بدون از دست رفتن اطلاعات نمایش داده می شود.

همان طور که گفته شد مکعب با سطوح مرکزدار یکی از شبکه های کریستالی است که هشت اتم در گوشه های مکعب و شش اتم در مراکز ۶ وجوه مکعب قرار می گیرد. در کل برای این شبکه، تعداد نقاط شبکه به ازای هر سلول برابر  $8*(1/8)+6*(1/2)=4$  می باشد. این شبکه که آلومینیوم، نیکل، مس، طلا، نقره و آهن این گونه ساختاری دارند، دارای بیشترین فشردگی و کمترین فضای خالی در بین شبکه های مکعبی است، (متراکم ترین نوع ساختار بلوری است). بنابراین عدد همسایگی یا عدد کوئوردیناسیون در ساختار FCC برابر با ۱۲ است. شکل ۲ یک ساختار مرکز پر- وجوه پر را نشان می دهد.

3- Visual Molecular Dynamic (VMD)

4- Embed Atomic Method (EAM)

1- Face Center-Cubic (FCC)

2- Fix

از فرمول گرین-کوبو داریم:

$$\mu = \frac{V}{k_B T} \int_0^\infty \langle P_{qz}(0) p_{qz}(t) \rangle dt, \quad (8)$$

که  $\mu$  ویسکوزیته،  $p_{qz}$  به تانسور تنش که مربوط به صفحه‌های XY, XZ و YZ است و به فرم زیر است:

$$p_{qz} = \frac{1}{V} \left[ \sum_i m_i V_{iq}(t) \mathcal{V}_{iz}(t) + \sum_{i \neq j} r_{ijq} f_{ijz}(t) \right], \quad (9)$$

که  $q, z$ ، به جهت‌های  $x, y, z$  اشاره می‌کند [۳۴-۳۵].

### ۵- نتایج

دانشمندان علاوه بر اندازه ذرات، دما عوامل و مکانیسم‌های مهم دیگری در افزایش ویسکوزیته در نانوسیالات را ارائه می‌دهند. کبلینسکی و همکاران [۲۷] چهار عامل دیگر را در افزایش ویسکوزیته نانوسیالات موثر می‌دانند که می‌توان با بررسی آن‌ها رفتار غیرعادی نانوسیالات را توجیه کرد:

- حرکت براونی نانوذرات،
- نانو لایه‌های ایجاد شده در مرز نانوذرات و سیال پایه،
- طبیعت انتقال گرما در نانوذرات و بررسی انتقال فونونی،
- تأثیر خوسه شدن نانوذرات.

سطح مشترک که به صورت لایه نازکی از مایع در اطراف ذره تشکیل می‌شود و می‌تواند به عنوان یک پل یا یک مانع در انتقال گرما عمل کند. با توجه به آزمایش‌های حمیدی و همکاران [۳۶] نشان می‌دهد که این لایه باعث افزایش ویسکوزیته می‌شود و شبیه به جامد هست و ساختمان اتمی این لایه که ضخامت حدود ۵ تا ۶ مولکول دارد (در حد نانومتر) اهمیت بسیار زیادی نسبت به توده سیالی دارد و افزایش ضخامت این نانو لایه در افزایش ویسکوزیته نانوسیالات موثر است.

حرکت براونی در مدل همپلتون در نظر گرفته نمی‌شود و سیال در حالت ایستا و ساکن توسط ثابت نفوذ ذره مشخص می‌شود که از رابطه زیر وجود دارد:

$$D = \frac{K_B T}{3\pi\eta d}. \quad (11)$$

$$E_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{ij} v(r_{ij}) + \sum_i F(\bar{\rho}_i), \quad (6)$$

که در اینجا،  $V(r_{ij})$  یک تابع پتانسیل دوگانه است به عنوان یک تابع فاصله  $i$  بین اتم  $i$  و  $j$  عمل می‌کند و  $F$  به عنوان انرژی جاسازی یک تابع چگالی الکترونی میزبان  $\bar{\rho}_i$  که به قسمت  $i$  به وسیله اتم‌های دیگر موجود در سیستم القا می‌شود، عمل می‌کند و داریم:

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho(r_{ij}), \quad (7)$$

که در آن،  $\rho(r)$  تابع چگالی الکترون است [۲۰-۲۱].

نتایج مطالعات دهه اخیر بسیاری از محققان در زمینه انتقال حرارت و ویسکوزیته در دینامیک مولکولی حاکی از افزایش چشمگیر خواص ترموفیزیکی ذرات معلق نسبت به سیال پایه است. محققان بسیاری رابطه حرکت براونی نانو ذرات در سیال را با ویسکوزیته بررسی کردند و دریافتند که حرکت براونی با ایجاد میدان سرعت وسیع در سیال احاطه‌کننده و خوشه‌ای شدن نانو ذرات که هم مسیری برای انتقال حرارت و مقاومت اتم‌ها در برابر برش ایجاد می‌کنند [۳۰-۲۴].

خواص دمایی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌تواند مشخص شود. دو روش دینامیک تعادلی<sup>۱</sup> و دینامیک غیرتعادلی<sup>۲</sup> برای مشخص کردن خواص دمایی استفاده می‌شود. روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی برای به دست آوردن خواص انتقال دمایی استفاده می‌شود، در حالی که استفاده از شبیه‌سازی تعادلی تنها برای به دست آوردن خواص دمایی استفاده می‌شود. شبیه‌سازی NEMD معمولاً از شبیه‌سازی EMD سریع‌تر است در حالی که شبیه‌سازی EMD به محاسبه بالای تابع هم تطابقی<sup>۳</sup> بستگی دارد. شبیه‌سازی NEMD در محاسبه تعادلات دمایی، توزیع‌های دمایی و شرایط مرزی در سیستم‌ها با مسیرهای متوسط آزاد تناقضاتی دارد. [۳۳-۳۱].

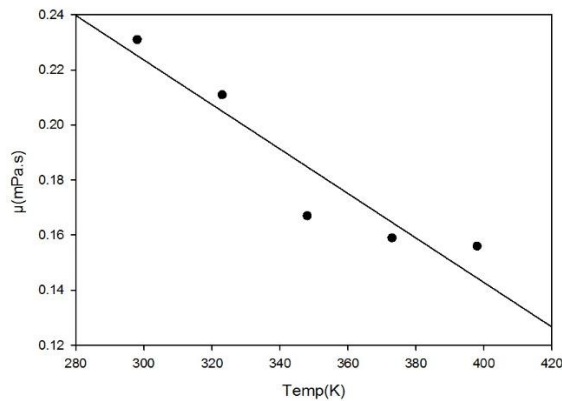
روش جایگزین برای روش غیرتعادلی، روش تعادلی است. هیچ‌گونه اختلاف دمایی به سیستم در شبیه‌سازی EMD اعمال نمی‌شود، اما از پیش‌بینی حرکت اتم‌ها برای مشخص کردن خواص دمایی استفاده می‌شود.

1- Equation Molecule Dynamic (EMD)

2 - Non Equation Molecule Dynamic (NEMD)

3 - Autocorrelation

باید به این نکته نیز توجه کرد که نحوه مقادیر حساب شده در اینکروپرا با نحوه حساب کردن مقادیر از طریق دینامیک مولکولی که روش کلاسیک است با هم فرق می کنند و به طور کلی و شرایط و فرضیات آنها با هم متفاوت است. در دینامیک مولکولی از پیوستگی به دلیل فاصله بین مولکولها صرف نظر می شود. شبیه سازی های دینامیک مولکولی به محاسبه کامپیوتری بالای تابع هم تطابقی فشار بستگی دارد و تعادلات دمایی و توزیع های دمایی و شرایط مرزی در سیستم با مسیرهای متوسط آزاد تناقضاتی دارد. به همین دلیل در دماهای خاص، سطح انرژی هایی ثابتی در نمودار پیدا می کند.



شکل (۳): پیش بینی تغییرات ویسکوزیته آب برای

دماهای مختلف بر اساس شبیه سازی تعادل دینامیک مولکولی

با توجه به کدنویسی برنامه و هندسه و روش شبیه سازی مبنی بر تعریف ناحیه کروی حاوی نانوذرات مس در محفظه سیال آب با شعاع های انتخابی و درصدهای حجمی خاص شامل ۳،۲ و ۴،۴ و ۶،۹ و ۹،۱ درصد انتخاب گردید و مقدار ویسکوزیته در دماهای مختلف به صورت نمودارهای شکل ۴ و ۵ و ۶ و ۷ درآمد. از بررسی نمودارها می توان دریافت که با افزایش دما و کاهش درصدهای حجمی نانو ذرات، مقدار ویسکوزیته کاهش پیدا می کند، ولی همانند نمودار شکل ۳ شامل بی ثباتی و انحراف هایی است. از طرفی با توجه به کار هو و همکاران [۳۸] که به بررسی انتقال گرما در سه نوع محفظه مربعی با ابعاد مختلف به همراه اندازه گیری تجربی کلیه خواص ترموفیزیکی نانوسیال پرداختند و اظهار داشتند که افزایش یا کاهش غیرعادی انتقال گرما را تنها با خواص ترموفیزیکی نانوسیال به طور ساده نمی توان توضیح داد. آن ها دلایل ممکن برای رفتار غیرعادی را مورد بررسی قرار دادند و توضیح دادند

$K_B$  ثابت بولتزمن،  $\eta$  ویسکوزیته سیال،  $d$  قطر ذره و  $T$  نیز دما می باشد. با این معادله می توان تأثیر حرکت براونی روی ویسکوزیته را تخمین زد. تأثیر حرکت براونی در ایجاد خوشه بسیار مهم بوده و این حرکت از طریق افزایش احتمال تشکیل خوشه در اثر برخورد نانوذره، باعث افزایش ویسکوزیته می شود [۲۷]. در انتقال گرما به وسیله فونون هرچه درصد حجمی ذره بالاتر و ذره کوچک تر باشد فاصله بین ذرات کمتر می شود و در حقیقت در جامدات کریستالی عامل اصلی افزایش ارتعاشات شبکه ای فونون هایی که به صورت بی نظم و تصادفی حرکت می کنند، حرکت براونی ذرات جامد است که باعث نزدیکی ذرات و اثر فونون ها می شود.

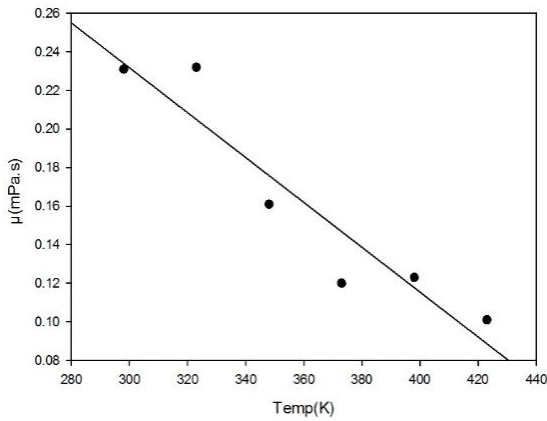
بر اثر جذب نیروهای واندروالسی، حرکت براونی با ایجاد میدان سرعت وسیع در سیال احاطه کننده، نانو ذرات خوشه را به وجود می آورد که در اثر این پدیده، محل عبوری با مقاومت گرمایی کمتر برای انتقال گرما به وجود می آید. البته پدیده خوشه شدن از دو جهت ممکن است اثر منفی روی نانوسیال داشته باشد. این پدیده با ایجاد توده های بزرگ ممکن است باعث عدم پایای سوسپانسیون شود و همچنین با ایجاد نواحی خالی از نانو ذرات در مایع و بالا رفتن مقاومت گرمایی باعث کاهش انتقال گرما شود. خوشه شدن باعث بالا رفتن درصد حجمی می شود و هرچه درصد حجمی نانوذره بیشتر باشد افزایش بیشتری در ویسکوزیته نانوسیال مشاهده می شود؛ که علت آن هم خوشه های نامتراکم ترو افزایش درصد حجمی موثر می باشد. در خوشه های آزادتر (شل تر) ذرات به وسیله نانو لایه ای از مایع، احاطه می شوند که این لایه تأثیر به سزایی در افزایش ویسکوزیته خوشه ای دارد.

نمودار شکل ۳ به پیش بینی ویسکوزیته سیال پایه آب بدون حضور نانو ذرات مس می پردازد. نمودار برای مقادیر دمایی مختلف و از ۲۹۸ درجه کلوین شروع می شود.

با توجه به نمودار با افزایش دما، ویسکوزیته کاهش می یابد. با توجه به مقادیر مرجع خوانده شده از اینکروپرا و موسسه فناوری استاندارد [۳۷]، که نشان دهنده کاهش ویسکوزیته با افزایش دما و تکرار این الگو تا مقادیر خاص دمایی و بعد افزایش ویسکوزیته است، نمودار زیر دارای الگویی مانند اینکروپراست و از دقت خوبی برخوردار است. ولی در چند نقطه دارای بی ثباتی و یا عدم تکرار الگوست.

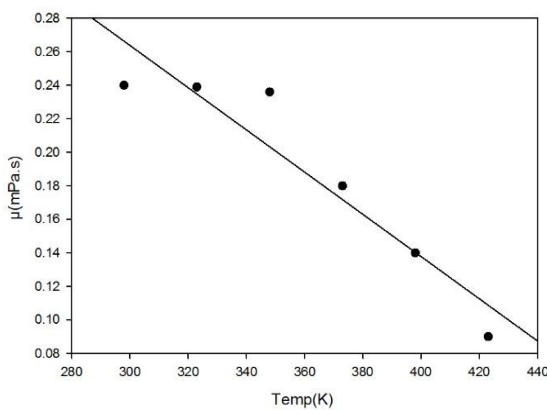


مقادیر مربوطه، ماتریس‌هایی با درایه‌های بسیار زیاد تشکیل می‌شود که این درایه‌ها خطای محاسبات را افزایش می‌دهد از این رو تفاوت بین مقادیر تا حدودی عادی است



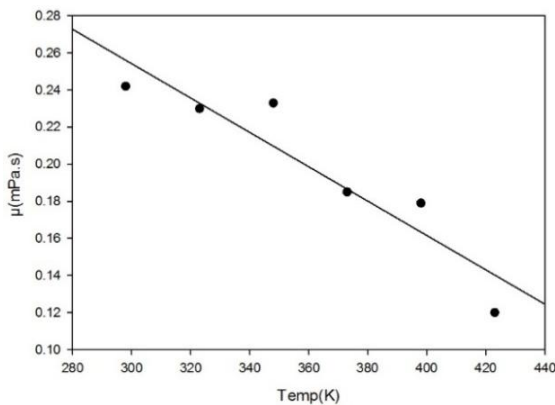
شکل (۴): پیش‌بینی تغییرات ویسکوزیته نانوسیال

آب\_مس با کسر حجمی ۳/۲ درصد برحسب دماهای مختلف



شکل (۵): پیش‌بینی تغییرات ویسکوزیته نانوسیال آب\_مس

با کسر حجمی ۴/۴ درصد برحسب دماهای مختلف



شکل (۶): پیش‌بینی تغییرات ویسکوزیته نانوسیال آب\_مس

با کسر حجمی ۶/۹ درصد برحسب دماهای مختلف

که اثر کسر حجمی متغیر بر اثر انتقال نانو ذرات به وجود آید تاثیر مهمی در انتقال گرما دارد.

فرض می‌شود ویسکوزیته مؤثر نانوسیال برابر است با مجموع ویسکوزیته سیال پایه و ویسکوزیته ناشی از وجود ذرات نانو در سیال پایه که داریم:  $\mu = \mu_{nf} + \mu_{pf}$ . ویسکوزیته ناشی از وجود ذرات نانو در سیال پایه را ویسکوزیته ظاهری نامید.

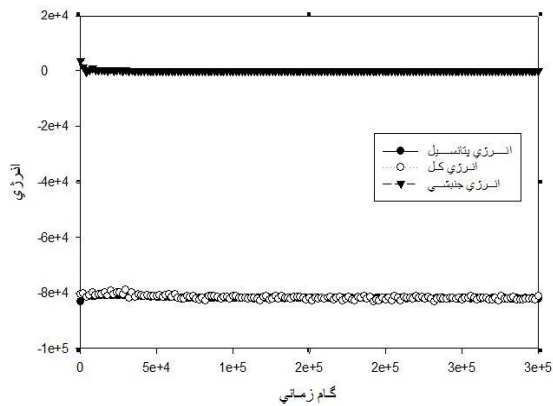
سرعت نسبی بین سیال پایه و ذرات نانو باعث ایجاد تنش برشی در اطراف ذرات می‌گردند که این تنش بین ذرات جامد و سیال در جریان‌های تک فاز وجود ندارد. با به دست آوردن تنش برشی ناشی از این نیرو می‌توان ویسکوزیته ظاهری را محاسبه کرد. مکانیسم‌های متعددی وجود دارند، که باعث ایجاد سرعت نسبی بین ذرات نانو و سیال پایه می‌شوند که مهم‌ترین آن‌ها ناشی از حرکت براونی است.

الگوی نانوسیال برای درصد کسر حجمی کلی مشخصی برقرار است. هر چه در صد بالاتر رود کسر حجمی بالاتر و بعد از مقدار خاصی باعث پدیده خوشه شدن و افزایش وزن مولکولی که به نوبه خود باعث افزایش ویسکوزیته می‌شود. برای ویسکوزیته در جهت های X,Y,Z تعاریف مشابهی وجود دارد، اما برای یک ماده همگن ویسکوزیته مستقل از جهت انتقال گرما و حرکت است، یعنی  $\mu_x = \mu_y = \mu_z = \mu$ . اما با توجه به تحلیل کد نویسی و خروجی برنامه لمپس و این که  $\mu_{11} = \mu_{22} = \mu_{33}$  است، می‌توان نتیجه گرفت که در بعضی شرایط و دماهای خاص و کسرهای حجمی، از همگن در نظر گرفتن نانوسیال باید خودداری کرد و نانوسیال را دو فاز می‌گیرند و این نابرابری ویسکوزیته در جهت های مختلف نشان دهنده گرادیان‌های دمایی مختلف در هر دیواره است که باعث عدم توزیع مولکول‌ها و انتقال آن‌هاست.

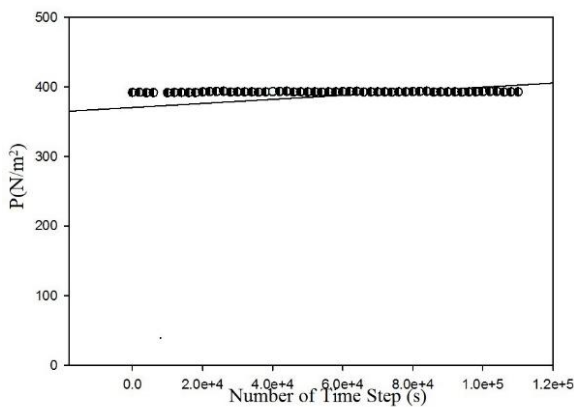
انباشتگی نانوذرات در جهت گرادیان دمای منفی باعث به وجود آمدن گرادیان کسر حجمی می‌شود، در حالی که پخش براونی باعث پخش نانوذرات و یا ایجاد شار جرمی در جهت گرادیان کسر حجمی منفی می‌شود، که باعث عدم ثبات در نمودارهای ویسکوزیته است.

در دینامیک مولکولی به خاطر زیاد بودن نیروهای بین مولکولی و پیچیده بودن محاسبات آن‌ها، برای حساب کردن

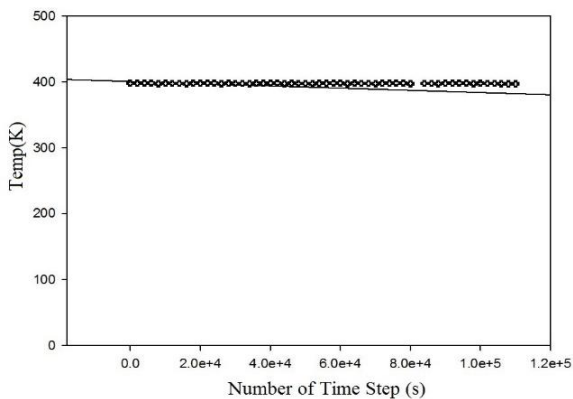
و انرژی جنبشی تابع نیروی خارجی اعمال بر سیستم است. نتایج نشان می‌دهد که با پیشرفت زمانی انرژی سیستم شبیه‌سازی همگرا می‌شود و این نشانه به تعادل رسیدن سیستم است.



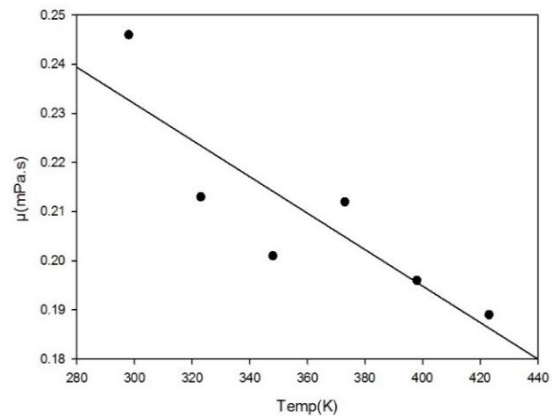
شکل (۹): انرژی کل و انرژی پتانسیل و انرژی جنبشی سیستم برحسب گام زمانی



شکل (۱۰): تغییرات فشار برحسب گام زمانی در طول زمان تعادل

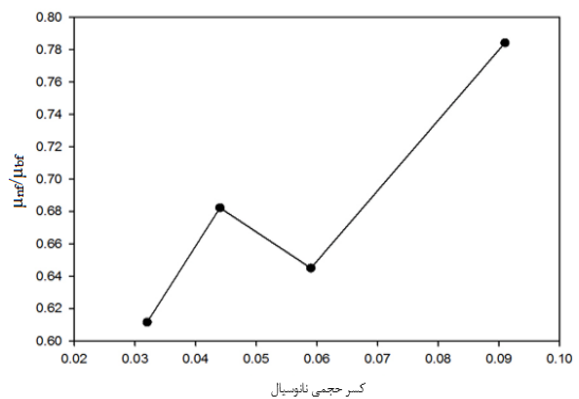


شکل (۱۱): تغییرات دما برحسب گام زمانی در طول زمان تعادل



شکل (۷): پیش‌بینی تغییرات ویسکوزیته نانوسیال آب\_مس با کسر حجمی ۹/۱ درصد برحسب دماهای مختلف

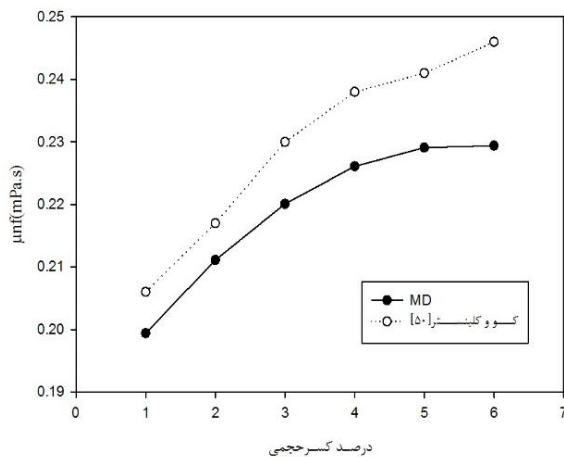
در نمودار شکل ۸ که نسبت ویسکوزیته نانوسیال به ویسکوزیته سیال پایه است، با افزایش درصد کسر حجمی نسبت  $\mu_{nf}/\mu_{bf}$  افزایش می‌یابد. این انتظار می‌رود که تأثیرات حرکت براونی با افزایش دما بیشتر می‌شود.



شکل (۸): نسبت ویسکوزیته نانوسیال به سیال پایه بر اساس شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

پتانسیل لنارد جونز دارای توزیع چگالی غیریکنواخت می‌باشد. گرچه مدل پتانسیل لنارد جونز ۹-۶ باعث ایجاد اختلاف در مشخصات هیدرودینامیکی سیستم می‌شود اما اعمال این مدل باعث همگرایی دیرتر نتایج می‌شود، لذا ضرایب پتانسیل نیمه تجربی، باعث افزایش زمان محاسبات می‌شود [۳۹].

اوج مقدار سرعت مولکول‌ها برای پتانسیل لنارد جونز ۹-۶ بیشتر از مدل‌های دیگر است، که این باعث افزایش انرژی جنبشی نسبت به مدل‌های دیگر است. انرژی کل سیستم حاصل جمع انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل مولکول‌ها می‌باشد



شکل (۱۳): نمودار تغییرات ویسکوزیته بر حسب درصد کسری حجمی های مختلف براساس دیگر مراجع

۷- مراجع

1. CHOI, S.U.S. "Enhancing Thermal Conductivity of Fluid with Nanoparticles Development and Applications of Non - Newtonian Flow", Vol. 66, p.99, 1999.
2. Zhu, D., li, X., WANG, N., Wang, X., Gao, J. Curr. APPL.Phys(2009)
3. CHOI, S.U.S. "Enhancing Thermal Conductivity Of Fluid With Nanoparticles Development And Applications Of Non Newtonian Flow", Asme Int. Mech. Eng. congress and Exposition, San Fransisco, USA, (1999).
4. Viota, J.L., Caballero, F.G., Duran, J.D.G. and Delgado, A.V J, Colloid Interface Sci. (2008)
5. Beskok, A. karniadakis, G. "Micro Flow and Nano Flow Fundemantal and Simulation", publication of the book Elsevier,2003.
6. Alder, B.J., Wainwright, T.E.J. "Phase Transition for a Hard Sphere System", J. chem. Phys. Vol.27, pp.1208-1209,1957.
7. Alder, B.J., Wainwright, J. "Studies in Molecular Dynamics. General Methods", j. chem. Phys. Vol.31, pp.459-466, 1959.
8. Allen, M.P. and Tildesley, D.J. "Computer Simulation of Liquids", Clarendon Press. Oxford, 1978.
9. Abraham, F.F. "Computational Statical Mechanics, Methodology, Applications and Supercomputing", J. Advances in Physics,1988.
10. Rafii Tabar, H. "Modelling the Nano Scale-Phenomena in Condensed Matter Physics Via Computer -based Numerical Simulations", Physics Report, 2001.
11. Rahman, A. "Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon", physical review, pp. A405-A411,1964.

۶- نتیجه گیری

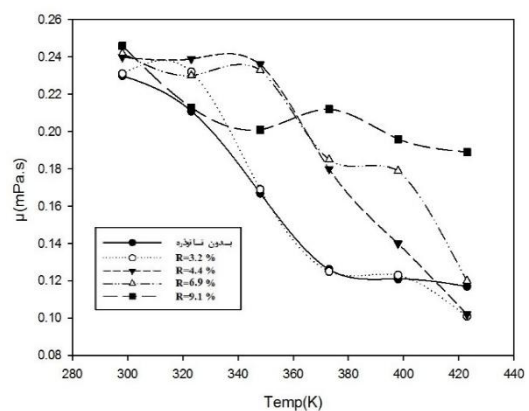
این مقاله ارائه دهنده پیشرفت های اخیر در تحقیقات روی ویسکوزیته در نانوسیالات با استفاده از روش دینامیک مولکولی می باشد. در این مقاله مس به عنوان نانوذره جهت بررسی ویسکوزیته در محفظه ای حاوی سیال آب که مس را در وسط محفظه پوشانده و در برگرفته به کار برده شده است. ویسکوزیته با افزایش دما و کاهش کسر حجمی کاهش می یابد ولی دارای انحرافات است که در یک جمع بندی کلی می توان ویسکوزیته نانوسیال را تابع ویسکوزیته نانوسیال، خلوص نانوسیال، نوع نانوسیال، خواص سطحی و دقیق نانوذره، نوع سیال و نانوذره، ظرفیت گرمایی ذره، جز حجمی مؤثر ذره، نوع پوشش ذره، زاویه چرخش خوشه و مقدار اسیدیته نانوسیال دانست.

با استفاده از نتایج به دست آمده می توان نتیجه گرفت که روش تعادل دینامیک مولکولی که از روش گرین\_کوبو استفاده می کند قادر به پیش بینی ویسکوزیته نانوسیال آب\_مس است.

نتایج حاصل اگر به صورت مفصل مورد تحلیل و بررسی قرار گیرند، می توانند در آینده راه کارهای جدیدی را ایجاد کنند:

الف- در آینده پزشکی جهت بررسی و فرستادن محفظه به قسمت های مختلف بدن، بافت ها و غده های درون اندام و یا حتی زمینه ساز تحقیقات در مورد DNA و غده های سرطانی قرار گیرد.

ب- در صنعت برای خنک سازی قطعات بسیار ریز و حساس در رایانه ها و پردازشگرها استفاده شود.



شکل (۱۴): نمودار کلی پیش بینی تغییرات ویسکوزیته نانوسیال آب\_مس با کسرهای حجمی مختلف برای دماهای متفاوت و بر اساس شبیه سازی تعادل دینامیک مولکولی

32. Muller-Plathe, F. and Reith, D. "Cause and effect Reversed in Non-Equilibrium Molecular Dynamics: an Easy Route to Transport Coefficients", Computational and Theoretical Polymer Science, Vol. 9, No's. 3-4, pp. 203-209, 1999.
33. Walker, E.A. "Influence Of Phonon Modes On The Thermal Conductivity Of Single-Wall, Double-Wall, and Functionalized Carbon Nanotubes", Faculty of Graduate School of Vanderbilt University, 2012.
34. Hoheisel, C. "Theoretical Treatment of Liquids and Liquid Mixture, Elsevier New York, 1993.
35. Eapen, J. Li, J., and Yip, S. "Phys. Rev. Lett.", Vol. 98, 028302, 2007.
36. Hamidi, A. Amrollahi, A. Rashidi, A. "Analysing the Mathematical Models to Calculate the Thermal Conductivity of Nanofluids", Iranian Chemical Engineering Journal, Vol. 8, No. 40, 2009.
37. National Institute Of Standards And Technology, Thermophysical Properties Of Fluid Systems, [Http://Webbook.Nist.Gov/Chemistry/Fluid/](http://Webbook.Nist.Gov/Chemistry/Fluid/)
38. Ho, C.J., Liu, W.K., Chang, Y.S., Lin, C.C. "Natural Convection Heat Transfer of Alumina-Water Nanofluid in Vertical Square Enclosures: An Experimental Study", Int. J. Thermal Sciences, Vol. 49, pp. 1345-1353, 2010.
39. Aminfar, H. and Razmara, N. "Molecular Dynamics Simulation of Liquid Argon Flow in Nanochannels using Different Potential Function", Modarres Mechanical Engineering, Vol. 13, No. 6, pp. 114-125, 2015 (In Persian).
12. Stiflinger, F.H. and Rahmani, A. "Improved Simulation of Liquid Water by Molecular Dynamics", The J. chem. Phys., Vol 60, pp.1545-1557, 1974.
13. <http://lammmps.sandia.gov>
14. Martin, G. and Thompson, A. P. "Industrial Property Prediction using Towhee and LAMMPS", Sandia National Laboratories, 2003.
15. Botan, A., Tazi, S., Rotenberg, B., and Turq, P. "Diffusion Coefficient Shear Viscosity of Rigid Water Models", CNRS and UPMC Universe Paris, 2012.
16. Franky, M. and Rummens, A. "A Critical Evaluation of Lennard -Jones and Stockmayer Potential Parameters and of Some Correlation Methods", University of Regina, 1976.
17. Rajabpor, A., Yousefi, F. "Molecular Dynamic Simulation of the Specific Heat Capacity of Water-Cu Nanofluids", Int. nano letters, 2013.
18. Bakhshan, Y. and Shadloo Jahromi, A. "Molecular Dynamics Simulation of Surface Specifics Effects on the Nano scale fluid flow", Modarres Mechanical Engineering, Vol. 15, No. 5, pp. 176-184, 2015 (In Persian).
19. Allen, M. P. and Tildesley, D. J. "Computer Simulation of Liquid Oxford University Press Oxford, 1989.
20. [sandia.gov/sjplimp/VMDTUTORIAL.HTM](http://sandia.gov/sjplimp/VMDTUTORIAL.HTM)
21. Daw, M. S. and Baskes, M. I. "Phys. Rev. B29644", 1984.
22. Mishin, Y. "Handbook of Materials Modeling S Yip", (The Netherlands: Springer), Vol. 2, pp. 459-463, 2005.
23. Voter, A.F. John Wiley & Sons, "Intermetallic Compounds", New York, Vol. 1, No. 4, p.77.83, 1994.
24. Wang, X. and Xu, X. "Thermophys. and Heat Transfer", Vol. 13, pp. 474-480, 1999.
25. Eastman, J.A., Choi, S.U.S., Li, S., Yu, W., and Thompson, L.J. "Appl. Phys. Lett.", Vol. 78, pp. 718-720, 2001.
26. Patel, H.E., Das, S. K., Sundararajan, T., Nair, A. S., George, B., and Pradeep, T. "App. Phys. Lett.", Vol. 83, pp. 2931-2933, 2003.
27. Keblinski, P., Phillpot, S.R., Choi, S.U.S., and Eastman, J.A. "Mechanisms of Heat Flow in Suspensions of Nano-sized Particles (nanofluids)", Int. J. Heat Mass Transfer; Vol. 45, pp.855-863, 2002.
28. Jang, S. P. and Choi, S.U.S. "Appl. Phys. Lett.", Vol. 84, pp.4316-4318, 2004.
29. Kumar, D. H., Patel, H. E., Kumar, V.R.R., Sundararajan, T., Pradeepand, T., and Das, S. K. "Phys. Rev. Lett.", Vol. 93, 2004.
30. Prasher, R., Bhattacharya, P., and Phelan, P. E. "Phys. Rev. Lett.", Vol. 94, 2005.
31. Fourier, J., "The Analytical Theory of Heat", London: Cambridge, 1878.