بررسی اثر هندسی دیواره های نانوکانال بر شارش آب به روش دینامیک مولکولی

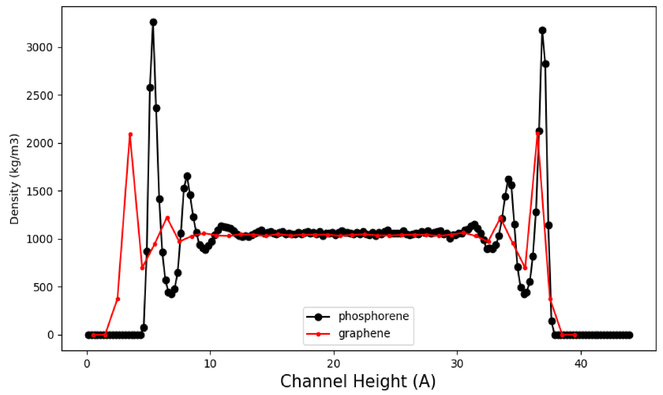
ترکمن، مهران[۱] ، حمزه‌پور، حسین[۱]، منظورالاجداد، کاظم[۱]، سرابادانی، جلال[۲]
[۱] گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی ، تهران، ایران
[۲] پژوهشکده علوم نانو، پژوهشگاه دانشهای بنیادی، تهران، ایران

مقدمه

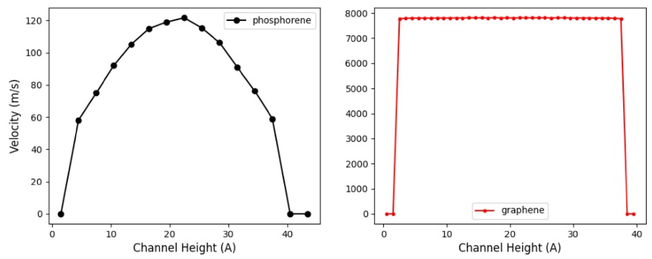
با گسترش مطالعات و امکانات شبیه‌سازی و آزمایشگاهی، تحقیقات وسیعی بر روی مواد در ابعاد نانو آغاز شده است و سبب پیدایش زمینه‌های مطالعاتی تازه‌ای در علوم شده است. در فیزیک سیالات نیز در این دو دهه مطالعات زیادی در زمینه حرکت، تغییرات دی‌الکتریک، ویسکوزیته، جداسازی یون و ... سیال از میان کانال های در ابعاد نانو انجام شده است. معادلات رایج نویر–استوکس پاسخگوی رفتار سیالات در نانوکانال ها نمی‌شوتد. با کوچک شدن ابعاد، اثر سطح بر حجم غلبه پیدا میکند. نیروهای بین مولکولی از جمله برهمکنش سیال و دیواره از اهمیت بیشتری برخوردار می‌شوند و بنابراین خواص مختلف دیواره مانند جنس سطح، آب دوستی و آبگریزی، حرکت سیال در نانوکانال‌ها را به شدت تحت تاثیر قرار می‌دهد. مطالعات زیادی بر روی حرکت سیال پرداخته اند. در این پژوهش به بررسی اثر هندسه دیواره بر شارش آب در نانوکانال پرداخته ایم.

روش

در ابتدا دو صفحه گرافن و فسفرن ٦٠ ×٦٠ آنگستروم با فاصله ٤٠ آنگستروم از هم قرار دادیم و این فاصله را با استفاده از مدل TIP3P آب با چگالی $1gr/cm^3$ پر کردیم. شرایط مرزی دوره ای در هر سه راستا در نظر گرفته شده و برای جلوگیری از اثرات سیستم و اولین تصویرهای پریودیک آن، راستای z را دو برابر ارتفاع بین دو صفحه در نظر گرفتیم. برای توصیف هر چه بهتر این پدیده از گام زمانی ۱ فمتوثانیه استفاده کردیم و با استفاده از همسانگرد کانونیکال (NVT) و ترموستات نویزهوفر دمای سیستم را بر روی ۳۰۰ کلوین ثابت نگه داشتیم. در ابتدا برای به تعادل رساندن سیستم شبیه سازی دینامیک مولکولی در غیاب نیروی خارجی به مدت ۱۰۰ پیکوثانیه انجام شد و بعد از آن با اعمال نیروی $2.5 \times 10^{-3}\ kcal/(mol \times A)$ در راستای ایکس به اتم های اکسیژن، اجازه شارش به مولکول‌های آب را به مدت ۲ نانوثانیه دادیم.



شکل۱
پروفایل چگالی آب برای دو کانال با جنس دیواره های فسفرن و گرافن



شکل ۲
نمودار سرعت حرکت سیال آب در عرض کانال برای دو نانوکانال مختلف از جنس فسفرت و گرافن

نتایج

در ابتدا به بررسی پروفایل چگالی آب در این دو نانوکانال می‌پردازیم. همانطور که در شکل اول مشاهده می‌شود آب بصورت لایه ای درآمده است. در مرحله بعد به مقایسه سرعت در این نانو کانال‌ها می‌پردازیم. همانطور که در شکل دوم مشخص است در نانوکانال گرافن بصورت خط درآمده است و در فسفرن بصورت سهمی شده است.

تحلیل نتایج

در شکل اول همانطور که مشاهده می‌شود آب بصورت لایه‌ای درآمده است ولی به دلیل اینکه فسفرن (نمودار مشکی) آب دوستی بیشتری نسبت به گرافن (نمودار قرمز) دارد پیک های مربوط به فسفرن در نزدیک دیوار ها بیشتر از گرافن است. و هر دو در قسمت میانی به چگالی $1000\ kg/m^3$ می‌رسند. در شکل دوم در نانو کانال گرافن (نمودار سمت چپ) به علت آبگریزی گرافن نمودار بصورت خط صاف است ولی در نانو کانال فسفرن (نمودار سمت راست) به دلیل شکل هندسی فسفرن و آب دوستی آن نمودار به شکل سهمی و پوآزی شده است. نکته مهم دیگر اختلاف سرعت حرکت آب در گرافن و فسفرن است که در نانو کانال گرافن سرعت آب بیش از ٦٠ برابر بزرگ تر از سرعت آب در نانوکانال فسفرن لست که دلیل این موضوع هم آب دوستی بیشتر فسفرن سبت به گرافن است..

مراجع

- [1] D. Kim, E. Darve, "*Molecular dynamics simulation of electro-osmtic flows in rough wall nanochannels,*" *Phys. Rev. E* **73,** 051203 (2006).
- [2] Chen, X, " Nanoscale fluid transport: size and rate effects," *Nano Lett.* **8,** 2988–2992 (2008).
- [3] B. Liu, R. Wu, A. W. K. Law, X. Q. Feng, L. Bai, K. Zhou; "*Channel morphology effect on water transport through grapheme bilayers,*" *Scientific Reports* **6,** 38583 (2016).

Investigation of the effect of nanochannel wall geometry on water flow by MD method

Torkaman, Mehran[1] , Hamzehpour, Hossein[1] , Manzoor, Kazem[1] , Sarabadani, Jalal[2]

[1] *Department of Physics, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran*

[2] *School of Nano Science, Institute for Research in Fundamental Sciences(IPM),19395-5531 Tehran, Iran*

Introduction

With the expansion of studies and simulation and laboratory facilities, extensive research on nanoscale materials has begun and has led to the emergence of new fields of study in science.in these two decades, many studies have been done in the field of motion, dielectric changes, viscosity, ion separation, etc. of fluids through nanoscale channels. Common Neuer-Stokes equations do not answer the behavior of fluids in nano channels. As the dimensions shrink, the surface effect dominates the volume. Intermolecular forces, including fluid-wall interactions, are becoming more important; Therefore, different wall properties such as surface material, hydrophilicity and hydrophobicity strongly affect the fluid movement in nano channels. In this study, we investigated the effect of wall geometry on water flow in nanocanals.

Method

First, we placed two plates of graphene and phosphoren 60 × 60 angstroms with a distance of 40 angstroms and We filled this gap using the TIP3P model of water with a density of $1\ gr/cm^3$. Periodic boundary conditions are considered in all three directions and to prevent the effects of the system and its first periodic images, we considered the z direction twice the height between the two planes.To better describe this phenomenon, we used a time step of 1 femtosecond and used a canonical isotropic (NVT) and Nose-Hoover thermostat to keep the system temperature constant at 300 Kelvin.

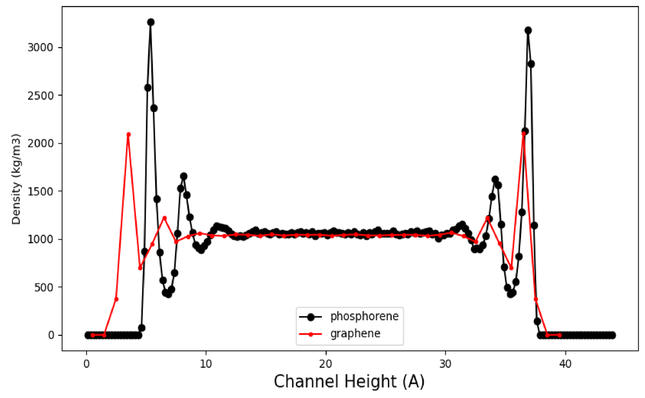


Figure 1
Water density profile for two channels with phosphoren and graphene wall material

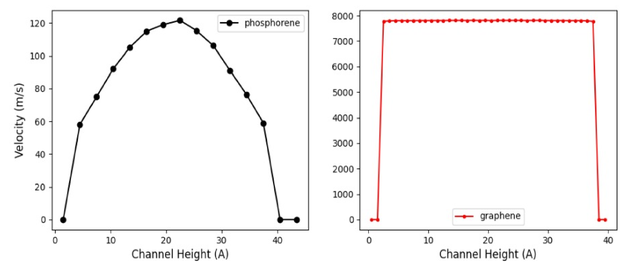


Figure 2
Diagram of the velocity of water fluid across the channel for two different nanochannels of phosphoren and graphene

Results

We first examine the water density profile of these two nano channels. As can be seen in the first figure, the water is layered. In the next step, we will compare the velocities in these nano channels. As shown in the second figure, velocity is linear in the graphene nano channel and parabolic in phosphoren.

Discussion

In the first figure, as can be seen, the water is layered but because phosphoren (black graph) is more hydrophilic than graphene (red graph), phosphoren peaks near walls are higher than graphene. And both in the middle part reach a density of $1000\ kg/m^3$. In the second figure, in the graphene nano channel (graph on the left), due to the hydrophobicity of graphene, the graph is a straight line but in the phosphoren nano channel (diagram on the right), due to the geometric shape of phosphoren and its hydrophilicity, the diagram has become parabolic.

References

- [1] D. Kim, E. Darve, "*Molecular dynamics simulation of electro-osmtic flows in rough wall nanochannels," Phys. Rev. E* **73,** 051203 (2006).
- [2] Chen, X, " Nanoscale fluid transport: size and rate effects," *Nano Lett.* **8,** 2988–2992 (2008).
- [3] B. Liu, R. Wu, A. W. K. Law, X. Q. Feng, L. Bai, K. Zhou; "*Channel morphology effect on water transport through grapheme bilayers," Scientific Reports* **6,** 38583 (2016).