علوم و مهندسی سطح۳۲(۱۳۹۶)۵۰-۴۱

شبیه‌سازی برخورد نانو قطره به سطح مورب در فرآیند ایجاد پوشش‌های نانویی توسط دینامیک مولکولی

سعید اسدی

دانشیار گروه مکانیک ، دانشکده مهندسی، دانشگاه پیام نور، ایران

(دریافت مقاله ۹۵/۰۴/۰۷- پذیرش مقاله ۹۶/۰۲/۰۳)

چکیده

پوشش دادن سطوح توسط نانوذرات، کاربردهای وسیعی در صنعت دارد. بسیاری از سطوح بصورت مورب در مقابل نازل پاشش قرار می‌گیرند که باعث برخورد مایل نانو قطره با سطح می‌شود. در این مطالعه، توسط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، برخورد نانو قطره با یک سطح مورب بررسی شده و میزان پخش قطره روی سطح مورب و در زوایا و سرعت‌های برخورد متفاوت، مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که نسبت پخش شدن نانو قطره برروی سطح، با افزایش زاویه برخورد، اندکی زیاد شده ولی با افزایش سرعت برخورد، بشدت افزایش پیدا می‌کند. نتایج نشان می‌دهد که تاثیر پارامترهای موثر در پاشش‌های حرارتی، مانند سرعت و زاویه برخورد در پاشش پلاسمایی، که در ابعاد میکرو صورت می‌گیرند، برای پاشش‌های نانویی قابل تعمیم نیست. از مدلسازی در ابعاد نانو می‌توان برای پیش‌بینی چگونگی پوشش‌های نانویی استفاده نمود و همچنین از آن برای کاهش هزینه‌های آزمایشگاهی و یا بررسی فرآیندهای پوشش سطوح در این ابعاد استفاده کرد.

واژه‌های کلیدی: *شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، نانو پوشش‌ها، نانو قطره سطح مورب.*

Simulation of Nanodroplet Impact on an Oblique Surface in Nano Coating Processes by Molecular Dynamics

Saeid Asadi

Associate Professor, Department of Mechanical Engineering, Payame Noor University, Iran

(Received 27 June 2016, accepted 23 April 2017)

Abstract

Nanoparticle coatings have wide range applications in industries. Many surfaces are placed obliquely in front of the spray nozzle that nanodrops collide oblique with the surface. In this paper, the impact of nanodroplets on an oblique surface has been simulated by means of molecular dynamics. Particular attention has been paid to the study of the spreading on the various angles and impact velocities. The results show that nanodroplet spread has increased slightly by increasing the collision angle, but increased greatly with increasing velocity. The results show that the effect of thermal spraying parameters, such as speed and angle of incidence in plasma spraying, is not applicable in the case of nano coating. These results can be used to predict nano coating state as well as to reduce the cost of experiments or study the new processes in these dimensions.

Keywords: *Molecular dynamics simulation, Nano coatings, Nanodroplet, Oblique surface.*

E-mail of Corresponding author: *s_asadi@pnu.ac.ir.*

مقدمه

پوشش دادن سطوح در ابعاد نانو کاربرد وسیعی در تکنولوژی روز دنیا دارد. از جمله می‌توان پوشش‌دهنده های فلزی وغیر فلزی(بصورت حرارتی و یا غیرحرارتی)، جت پرینترها، اسپری پرینترها، سنتز دی ان ای، سنتز داروهای جدید، ساخت سلول‌های جدید خورشیدی و بسیاری از موارد دیگر را نام برد. چگونگی برخورد نانو قطره با سطح نقش مهمی در خواص پوشش ایجاد شده دارد[۱, ۲]. در پوشش دادن سطح با نانو قطرات، قسمت عمده‌ای از قطرات بصورت مایل به سطح برخورد کرده و برروی آن پخش می‌شوند[۳, ٤]. از طرفی بررسی چگونگی پخش شدن قطره برروی سطح در ابعاد نانو، به دلیل ناپیوسته بودن محیط، با شبیه‌سازی‌های دینامیک سیال امکان پذیر نبوده و فقط توسط مطالعه دینامیک مولکولی(MD[1]) امکان‌پذیر است[۵, ٦].

دینامیک مولکولی بعنوان یک ابزار مناسب برای شبیه‌سازی فرآیندها در ابعاد نانو توسعه یافته است. با توسعه فن‌آوری شبیه‌سازی کامپیوتری، بدست آوردن اطلاعات مهم از شبیه‌سازی کامپیوتری ممکن شده است به گونه‌ای که بدست آوردن همان اطلاعات از طریق تجربه و آزمایش سخت وگاهی غیر ممکن است. استفاده از مزایایی مانند ارایه راه کار برای محققان، هدایت آزمایش، کاهش آزمایش‌های کورکورانه و کاهش هزینه های ناشی از آزمایش، جزو موارد مهم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است. بررسی مقالات و منابع نشان می‌دهد که تاکنون مطالعه برخورد نانو قطره به سطح مورب انجام نشده است، اگرچه مطالعات وسیعی برای برخورد قطرات میکرو در پاشش‌های حرارتی و پلاسمایی صورت گرفته است. اسدی و همکاران شبیه‌سازی عددی و مدل تحلیلی برخورد مایل میکرو قطره با سطح زیرلایه در فرآیند لایه‌نشانی به روش پاشش حرارتی را مطالعه کرده‌اند[۷]. آن‌ها از روش‌های CFD[2] استفاده کرده و در محیط پیوسته مطالعات خود را انجام داده‌اند. سپس اسدی و همکاران تاثیر زاویه را در رفتار میکرو قطره به هنگام برخورد با سطح جامد، از جمله تغییر شکل، پخش شدن و یا حتی جدا شدن قطره از روی سطح بررسی کردند[۸]. در مقاله آن‌ها اثر زاویه تماس در برخورد قطره با سطح، مطالعه و مدل‌سازی شده است. آن‌ها ابتدا با استفاده از تئوری سینتیک مولکولی، رابطه‌ای برای تعیین زاویه تماس دینامیکی قطره با سطح به دست آوردند، سپس آنرا در شبیه‌سازی عددی قطره با سطح به کار برده و برپایه آن مدل عددی را اصلاح کردند. در آن مطالعه نیز آن‌ها از شبیه‌سازی CFD استفاده کردند. در ادامه، اسدی برخورد عمودی نانو قطره باسطح صاف را توسط روش CFD-MK[3] بررسی نمود[۹]. اگرچه وی از روش دینامیک مولکولی استفاده نکرده بود ولی نتایج آن تشابه خوبی با نتایج صدیقی داشت[۱۰]. صدیقی پخش شدن نانو قطره را بر روی سطح شبیه‌سازی نموده و تغییرات زوایای تماس در حین برخورد قطره با سطح را به دست آورده بود. آن‌ها از انواع سطوح رطوبت‌پذیر، رطوبت‌ناپذیر و نیمه رطوبت‌پذیر در شبیه‌سازی خود استفاده کرده بودند[۱۰, ۱۱].

بررسی منابع و مقالات گذشته نشان‌دهنده فقدان مطالعه و عدم وجود داده‌های منتشر شده در مورد برخورد نانوقطره به سطح مورب است. بنابراین در راستای مطالعات گذشته که ایجاد پوشش در ابعاد میکرو بررسی شده بود، نیاز است که برخورد قطرات در ابعاد نانو و ایجاد پوشش‌های نانویی در پاشش‌های مورب نیز بررسی گردد. در این حالت به دلیل این‌که محیط از حالت پیوسته خارج شده و ناپیوسته می‌شود، استفاده از روش‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی الزامی است. در این تحقیق برخورد قطره نانو به سطح مورب توسط شبیه‌سازی دینامیک

[1] Molecular Dynamics

[2] Computational fluid dynamics

[3] Computational fluid dynamics- molecular kinetic

مولکولی مطالعه شده است. همچنین تاثیر زوایای و سرعت‌های مختلف برخورد قطره، تجزیه و تحلیل شده و نتایج حاصله ارایه گردیده است.

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

دینامیک مولکولی یک روش شبیه‌سازی مهم در ابعاد نانو برای ارزیابی و پیش بینی ساختار و خواص مواد است که در آن شبیه‌سازی حرکت و تعامل اتم‌ها و مولکول‌ها توسط کامپیوتر انجام می‌گیرد[۱۲-۱۵]. در طول شبیه سازی، هر اتم در حال حرکت با توجه به مکانیسم نیوتنی، تحت میدان پتانسیلی است که توسط همه اتم‌های همسایه تشکیل شده است. بعبارتی، روش دینامیک مولکولی یک نوع شبیه‌سازی بوسیله اعمال میدان نیرو و معادله حرکت نیوتن است.

میدان نیرو که پایه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است وابسته به انرژی پتانسیل مولکول‌ها و فاصله بین هر دو مولکول است. برای مقاصد مختلف، میدان نیرو را می‌توان به اشکال گوناگون, با دامنه و محدودیت‌های مختلف تقسیم کرد. پتانسیل لنارد - جونز بطور گسترده‌ای بصورت تابع پتانسیلی میدان نیرو استفاده می‌شود که بشکل زیر است:

$$U(r) = 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^{6}] \qquad (۱)$$

در اینجا $U(r)$ پتانسیل مولکول‌ها در مقدار r بوده و r فاصله بین مولکول‌ها است. ε نشان دهنده عمق چاه پتانسیل وσ فاصله‌ای است که در آن پتانسیل بین ذرات صفر است [۱۶].

در شبیه‌سازی از ترموستات لانگوین برای ثابت نگهداشتن دمای لایه نازک طبق معادله $T = 0.793\,\varepsilon k_B$ استفاده شده است که در آن T درجه حرارت و k_B ثابت بولتزمن هستند[۱۷, ۱۸].

دینامیک ذرات توسط معادله دوم نیوتن و به شکل زیر است تعریف می‌شود:

$$F = ma \;,\; F = m\frac{dv}{dt} \;,\; F = m\frac{d^2r}{d^2t} \qquad (۲)$$

که در آن r مقدار جابجایی، v سرعت و a شتاب اتم است. اساس شبیه‌سازی دینامیک مولکولی محاسبه موقعیت و سرعت گام به گام اتم یا مولکول است، و درنهایت به دست آوردن محل جدید اتم یا مولکول مورد نظر است. روش‌های زیادی برای حل معادلات حرکت نیوتن وجود دارند، روش ورلت[4] در بسیاری از برنامه های شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفته است که به روش قورباغه جهنده[5] معروف است و معادلات آن بشکل زیر است.

$$\vec{v}_i\left(t+\tfrac{1}{2}\delta t\right) = \vec{v}_i\left(t-\tfrac{1}{2}\delta t\right) + \vec{a}_i(t)\delta t \qquad (۳)$$

$$\vec{v}_i(t+\delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i\left(t+\tfrac{1}{2}\delta t\right)\delta t \qquad (٤)$$

که در آن $\vec{r}_i$ مقدارجابجایی، $\vec{v}_i$ سرعت، $\vec{a}_i$ شتاب و δt گام زمانی[6] است. $\vec{a}_i(t)$ از موقعیت $\vec{r}_i(t)$ در زمان t به آسانی محاسبه می‌شود. اگر $\vec{v}_i\left(t-\frac{1}{2}\delta t\right)$ و $\vec{r}_i(t)$ را بدانیم ، آنگاه می‌توانیم سرعت را در زمان $t+\frac{1}{2}\delta t$ از دو معادله اخیر بدست آوریم. و درنهایت سرعت در زمان t می‌تواند از معادله زیر محاسبه شود:

$$\vec{v}_i(t) = \tfrac{1}{2}\left[\vec{v}_i\left(t+\tfrac{1}{2}\delta t\right) + \vec{v}_i\left(t-\tfrac{1}{2}\delta t\right)\right] \qquad (۵)$$

این الگوریتم در بسیاری از برنامه‌های شبیه‌سازی بکاربرده می‌شود چرا که در آن تنها نیاز به دانستن سرعت در زمان $t-\frac{1}{2}\delta t$ و موقعیت در زمان t است، که فضای کمتری را بر روی کامپیوتر اشغال می‌کند و از طرفی یک روش پایدار است[۱۳, ۱٦]. در شبیه‌سازی انجام شده در این تحقیق از گروه NVE استفاده شده است که در آن N تعداد اتم‌ها، V حجم سیستم ، E انرژی سیستم بوده و ثابت هستند[۱۳, ۱٤, ۱٦]. لازم به ذکر است که تعداد مولکول‌های تعیین شده در جعبه‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ثابت است، به این معنی که اگر برخی از

[4] Verlet
[5] Leap forg
[6] Timestep

مولکول‌ها از جعبه خارج شوند، به همان تعداد مولکول به جعبه وارد می‌شود. بنابراین چگالی سیستم نباید تغییر کند. حجم-ثابت در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بسیار مهم است که در اینجا نیز بدین گونه عمل شده و حجم ثابت در نظر گرفته شده است[١٦].

ترشوندگی توانایی یک مایع برای تر کردن سطح جامد است وآنرا می‌توان بوسیله موازنه نیروهای بین سطح, مایع و گاز بدست آورد. کار چسبندگی انرژی مورد نیازی است که برای جداکردن دو سطح(مثلا سطح مایع از جامد) مورد نیاز است و از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$W_a = \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_{12} \qquad (٦)$$

که γ_1 و γ_2 بترتیب کشش سطحی سطوح ١ و ٢ هستند، γ_{12} کشش سطحی بین سطح ١ و سطح ٢ است[٧, ٨]. مقدار ترشوندگی بوسیله زاویه تماس θ بیان می‌گردد که θ زاویه تقاطع بین خط مماس مایع و سطح جامد است. هنگامی که مایع به تعادل می رسد، θ از رابطه زیر بدست می‌آید:

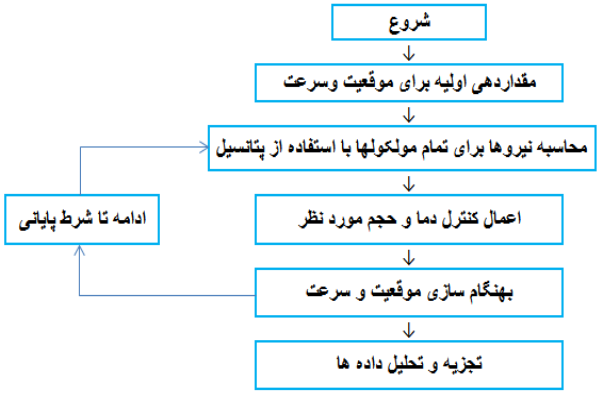
$$\gamma_s = \gamma_{SL} + \gamma_L \cos\theta \qquad (٧)$$

که در آن γ_s کشش سطحی بین سطح جامد و بخار است و γ_{SL} کشش سطحی بین سطح جامد و مایع است و γ_L کشش سطحی بین مایع و بخار بوده و θ زاویه تماس است[٨].

الگوریتم شبیه‌سازی **دینامیک مولکولی**

دینامیک مولکولی نوعی از شبیه‌سازی کامپیوتری است که با استفاده از قوانین شناخته شده در فیزیک، حرکت اتم‌ها و مولکول‌ها را در اثر تقابل با یکدیگر نشان می‌دهد[١٢, ١٤, ١٦].

مراحل مهم در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در شکل ١ نشان داده شده است:



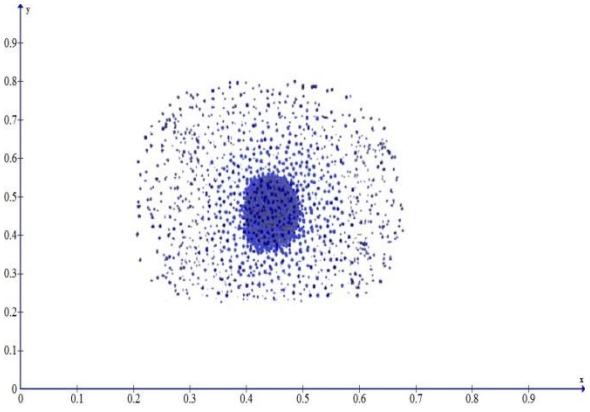
شکل ١. الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی.

قانون لاپلاس و شعاع مایع

قبل از شبیه‌سازی، مکعب‌های مایع بعنوان یک شبکه FCC اتمی را درنظر گرفته که بترتیب با طول‌های ٥ ، ١٠ ، ١٧ ، ٢٣ و ٣٠ نانومتر ساخته شده و بترتیب حاوی ١٠٨ ، ٥٠٠ ، ١٠٩٩ ، ٢٤٥٧ و ٤٦٣١ مولکول است.

در کد ضرایب پتانسیل لنارد جونز برابر با $\varepsilon = 1.05 \times 10^{-21}\ J$ و $\sigma = 0.45\ nm$ تنظیم شده که پارامترهای لنارد جونزی مولکول‌های CO_2 هستند. شعاع برش درآن برابر $2.5\ \sigma$ و اندازه گام زمانی برابر ٠/١٣ پیکوثانیه در نظر گرفته شده است، هنگامی‌که معادله یانگ-لاپلاس برای این شبیه‌سازی تنظیم شود مقدار مایع درمکعب پیدا می‌شود.

لازم بذکر است که در حالت تعادل، همانند آنچه که در شکل٢ مشخص گردیده، مکعب مایع به یک کره مایع تبدیل می‌شود.



شکل ۲. تعادل ٤٦٣١ مولکول.

شکل ۲ نشان می‌دهد که مایع طی چند نانو ثانیه از مکعب به شکل کروی درمی‌آید، که در آن چندین اتم نیز بطور جداگانه کره را احاطه کرده‌اند. از آنجا که تنها چند هزار اتم در کره وجود دارد تجمع کاملا کروی نخواهد بود. اما با افزایش تعداد اتم‌ها، شکل قطره کروی‌تر می‌شود ولی با افزایش تعداد اتم‌هایی که در شبیه‌سازی شرکت می‌کنند، زمان اجرای برنامه بسیار افزایش خواهد یافت.

از طریق معادله زیر تنش سطحی حاکم بدست می‌آید که مقدارآن $\gamma = 0.005704$ N/m است:

$$\gamma = (1.1 \pm 0.01)\varepsilon\sigma^{-2} \qquad (۸)$$

جدول ۱. شعاع و فشار قطره درحالت تعادل.

گام زمانی	۱۰۰۰۰۰	۱۰۰۰۰۰	۱۰۰۰۰۰	۲۰۰۰۰۰	۲۰۰۰۰۰
γ	/۰۵۷۰٤	۰/۰۵۷۰٤	۰/۰۵۷۰٤	۰/۰۵۷۰٤	۰/۰۵۷۰٤
R	غیرکره	شبه کره	بی ثبات	۰/۲۰٤۱	۰/۲۵٦٦
ΔP				۰/۵٦۰۰	۰/٤٤٤
خطا				۰/۳۹٪	۰/۰۳٤٪
	۱۰۸	۵۰۰	۱۰۹۹	۲٤۵۷	٤۵۳۱

در جدول ۱ مشاهده می‌شود هنگامی که تعداد مولکول‌ها به اندازه کافی زیاد باشد، فشار و شعاع با توجه به "قانون لاپلاس" قابل اندازه‌گیری و درصد خطا پایین است.

$$P_{out} - P_{in} = \frac{2\gamma}{R} \qquad (۹)$$

که در آن P_{out} فشار خارج، P_{in} فشار داخل، γ کشش سطحی و R شعاع قطره است.

$$E = \left|\left(\Delta P - \frac{2\gamma}{R}\right)/\Delta P\right| \times 100\% \qquad (۱۰)$$

خطا در جدول فوق از فرمول زیر محاسبه می‌شود.

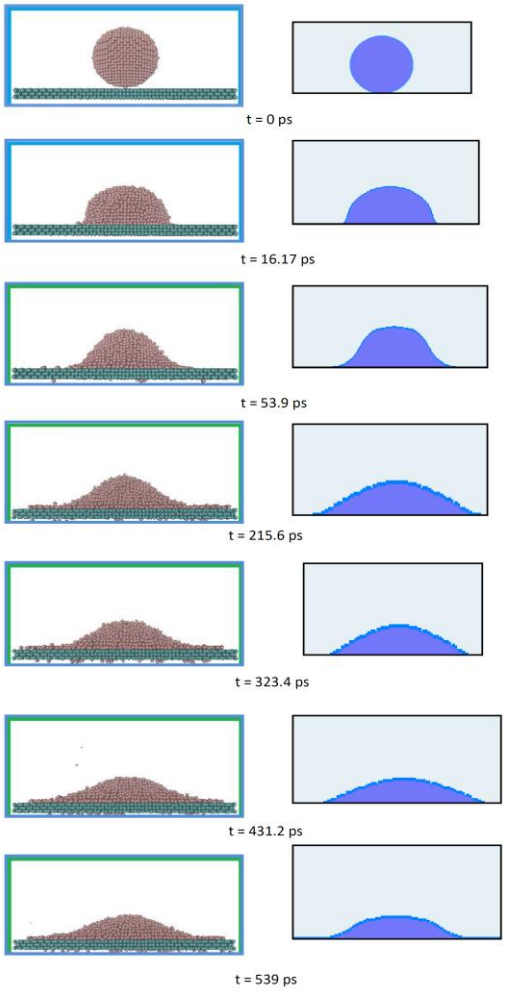
قانون لاپلاس در سطح ماکروسکوپی قابل استفاده و معنی دار است، اگر مدل متناسب با قانون لاپلاس باشد، خواص فیزیکی مشابه با مدل ساخته شده در سطح ماکروسکوپی است. از جدول ۱ مشاهده می‌شود که وقتی تعداد اتم‌های مایع بیش از ۲٤۵۷ عدد است، می‌توان آن را در شبیه‌سازی مورد استفاده قرارداد تا خواص ماکروسکوپی را برای فرآیند فیزیکی بدست آورد. هنگامی که تعداد اتم‌ها بسیار کم است، مانند ۱۰۸ اتم، اتم‌ها به اطراف و در همه جا پراکنده خواهند شد و به شکل یک کره جمع نخواهند شد. زمانی که تعداد اتم‌ها را به ۵۰۰ عدد افزایش دهیم وضع بهتر است و اتم‌ها مانند شکل کره جمع آوری می‌شوند اما پایدار نیستند و بسیاری از اتم‌ها به بیرون از کره می‌روند و سپس برمی‌گردند. اگر در مورد ۱۰۰۰ اتم اینکار را انجام دهیم، لبه منطقه اتم‌ها شبیه یک کره است اما فشار هنوز به ثبات نمی‌رسد.

نتایج بدست آمده و تجزیه و تحلیل آن‌ها

اعتبار سنجی شبیه‌سازی

در این قسمت، نتیجه شبیه‌سازی را با مطالعات اسدی مقایسه شده است. اسدی از روش(CFD-MK) برای شبیه‌سازی برخورد قائم نانو قطره با قطر ٦ نانومتر و سرعت ۱/۲۵ متر بر ثانیه استفاده کرده است[۹].

با توجه به شکل ۳ می‌توان مشاهده کرد که نتایج حاصل از برخورد قائم بسیار نزدیک به هم بوده، بنابراین نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پیش‌بینی مناسبی از برخورد نانوقطره را ارایه می‌دهد. حداکثر مقدار خطا برای حداکثر ارتفاع قطره(از صفحه تا نوک قله قطره) ۳ درصد و حداکثر مقدار خطا برای خط تماس قطره با سطح(مقدار پخش شدن قطره روی سطح) برابر ۷ درصد است.



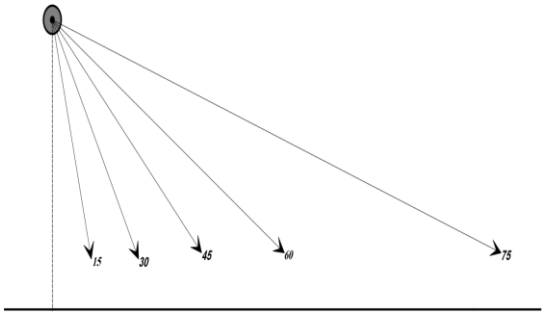
(ب) (الف)

شکل ۳. برخورد نانو قطره به قطر ٦ نانومتر با سرعت ۱/۲۵ متربرثانیه به سطح صاف.
الف – شبیه‌سازی انجام شده در این تحقیق
ب – شبیه‌سازی انجام شده توسط اسدی[۹]

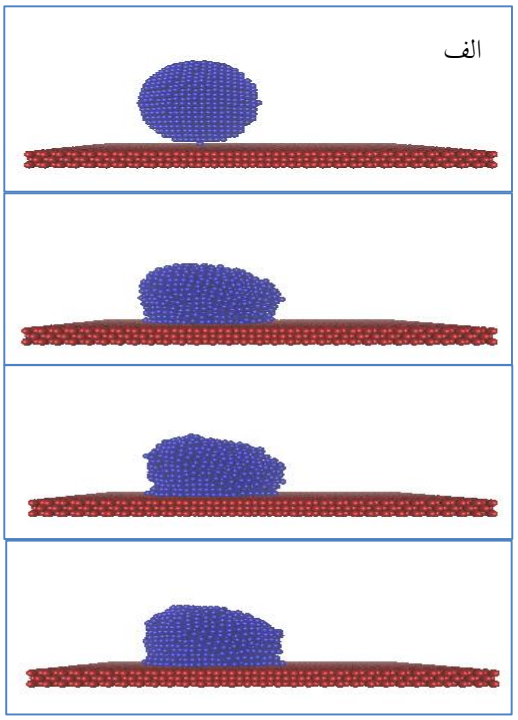
پخش شدن نانوقطره روی سطح جامد مورب

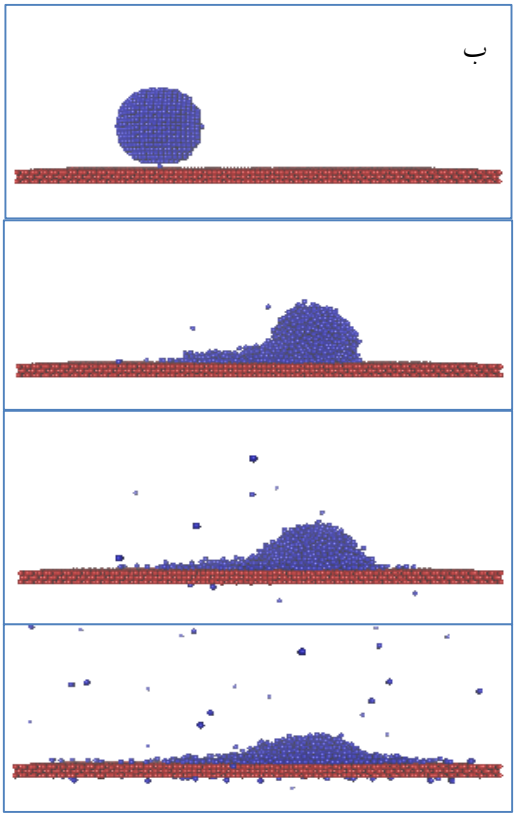
برای محاسبات، اندازه هر گام زمانی ۰/۱۳ پیکوثانیه و شعاع برش σ ۲/۵ در نظر گرفته شده است. قطر ابتدایی قطره مورد بحث ۵ نانومتر در نظر گرفته شده و تغییر این قطر پس از برخورد با دیواره جامد مورب و میزان گسترش و پهن شدن آن روی سطح در زوایای برخورد ۱۵،۳۰،٤۵،٦۰ و ۷۵ درجه از راستای قائم مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. درواقع، سطح به صورت افقی، و برخورد قطره نسبت به سطح زاویه‌دار است که همانند برخورد یک قطره به سطح مورب است(شکل ٤).

در شبیه‌سازی، برخورد مایل نانو قطره آرگون به یک سطح جامد بررسی شده است. این شبیه‌سازی برای زوایای برخورد نشان داده شده در شکل ٤ و در هر زاویه با سرعت‌های ۱, ۱/۵ و ۲ متر بر ثانیه انجام شده است. دو نمونه از برخورد نانو قطره باسطح، از لحظه شروع تا به تعادل رسیدن قطره، انتخاب شده و نتایج آن ارایه گردیده است(شکل‌های ۵- الف و ب). شکل‌های استفاده شده همگی عکس‌هایی هستند که در زمان‌های مختلف و در حین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی توسط نرم افزار vmd از محیط شبیه‌سازی استخراج شده است.



شکل ٤. زوایای برخورد نانو قطره به سطح جامد.





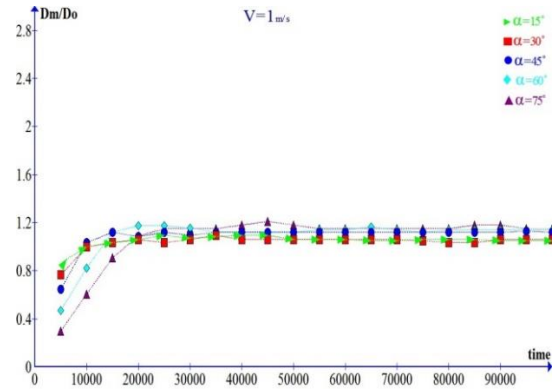
شکل ۵. الف) برخورد نانو قطره به سطح جامد با سرعت ۱ متربرثانیه و زاویه ۱۵ درجه، ب) برخورد نانو قطره به سطح جامد با سرعت ۲ متربرثانیه و زاویه ۷۵ درجه.

مقایسه تغییرات پخش شدن نانوقطره برروی سطح جامد

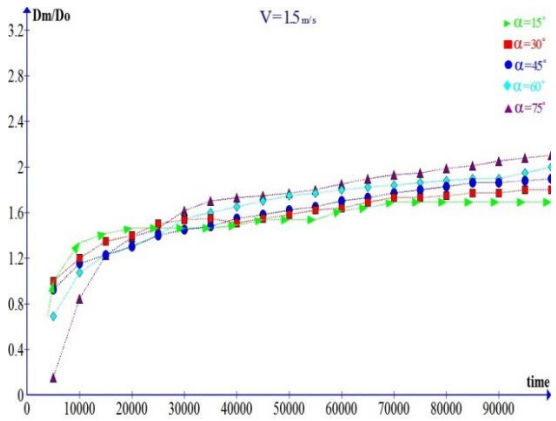
از شبیه‌سازی انجام شده، تاثیر تغییرات سرعت و زاویه برخورد در پخش شدن قطره روی سطح، قابل مشاهده است. برای تحلیل داده‌ها، تغییر قطر نانوقطره در هنگام برخورد به سطح و پخش شدن آن، نسبت به قطر اولیه، محاسبه شده و رسم گردیده است. بنابراین از نسبت D_m/D_o استفاده شده است که در آن D_m حداکثر قطر پخش شدن پس از برخورد و D_o قطر اولیه نانوقطره است. نانوقطره به قطر ۵ نانومتر با سرعت‌های برخورد ۱، ۱/۵ و ۲ متربرثانیه در نظر گرفته شده و تاثیر تغییر زاویه برخورد از ۱۵ درجه تا ۷۵ درجه بر روی مقدار D_m/D_o ، بررسی شده است، بعبارتی تاثیر زاویه و سرعت برخورد در میزان پخش شدن نانوقطره برروی سطح مطالعه گردیده است(شکل‌های ٦ الی ۱۳). در شکل های ٦ الی ۸ برخورد نانوقطره در سرعت های ثابت و زوایای برخورد مختلف رسم شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌گردد در سرعت‌های کم مانند ۱ m/s، زاویه برخورد قطره تاثیری بر روی میزان پخش شدن قطره برروی سطح ندارد. بعبارتی سطح پوشش داده شده توسط نانو قطره نسبت به قطر قطره در این سرعت، با زوایای متفاوت برخورد، تقریبا ثابت است. با افزایش سرعت برخورد نانوقطره باسطح، تاثیرات زاویه برخورد برروی میزان پخش شدن قطره افزایش می‌یابد. در این حالت هرچه میزان زاویه برخورد بیشتر شود، میزان پخش شدن قطره بیشتر می‌گردد.

در شکل‌های ۹ الی ۱۳ برخورد نانو قطره در زوایای ثابت و با سرعت‌های گوناگون مشاهده می‌شود. شکل ۹ نشان می‌دهد که در زاویه برخورد ۱۵ درجه با افزایش سرعت برخورد میزان پخش شدن قطره به شدت و تا بیش از سه برابر افزایش پیدا کرده است. شکل‌های بعدی نشان می‌دهد که اگر چه زاویه برخورد را افزایش می‌دهیم

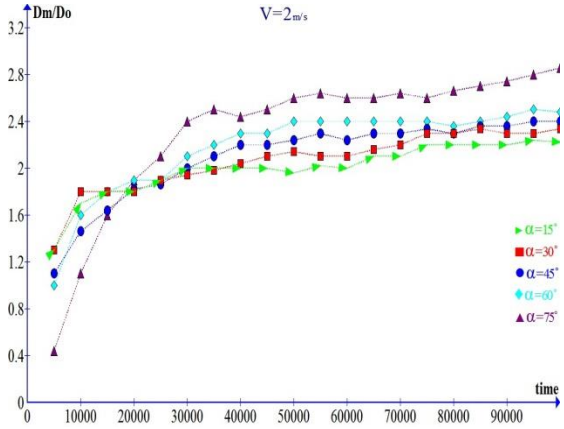
(شکل‌های ۱۰ الی ۱۳) ولی تاثیری در افزایش سطح پخش شدن قطره مشاهده نمی‌گردد. مشاهده می‌شود که سرعت در هر زاویه مورد نظر پارامتر تعیین کننده پخش شدن قطره است. بنابراین تاثیر سرعت برخورد نسبت به زاویه برخورد بر روی پخش شدن نانو قطره، بسیار زیاد است. این نتیجه گیری در ابعاد میکرو مشاهده نگردیده است، برای مثال برخورد قطرات میکرو در پاشش‌های پلاسمایی، چنین رفتاری را از خود نشان نمی‌دهند[۹]، بنابراین نمی‌توان تجربیات پاشش‌های حرارتی کنونی را بطور کامل در مقیاس نانو به کار برد.



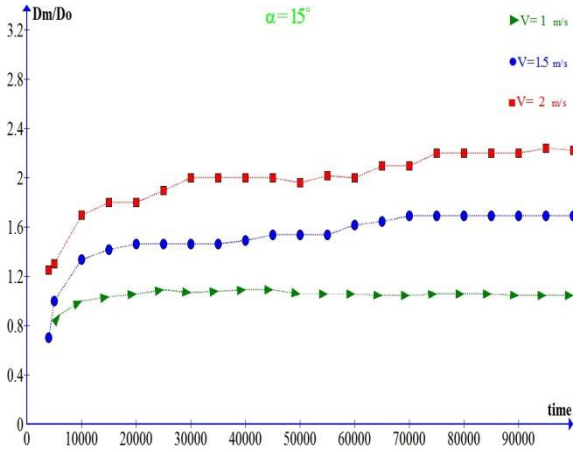
شکل ٦. تغییرات نسبت گسترش نانوقطره برروی سطح در مراحل مختلف زمانی با زوایای برخورد ۱۵ تا ۷۵ درجه و با سرعت ۱ متربرثانیه.



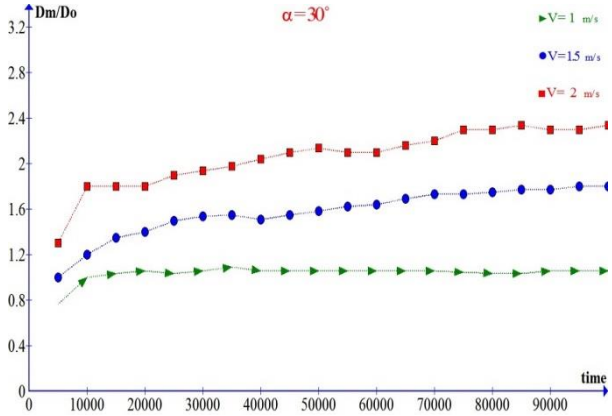
شکل ۷. تغییرات نسبت گسترش نانوقطره برروی سطح در مراحل مختلف زمانی با زوایای برخورد ۱۵ تا ۷۵ درجه و با سرعت ۱/۵ متربرثانیه.



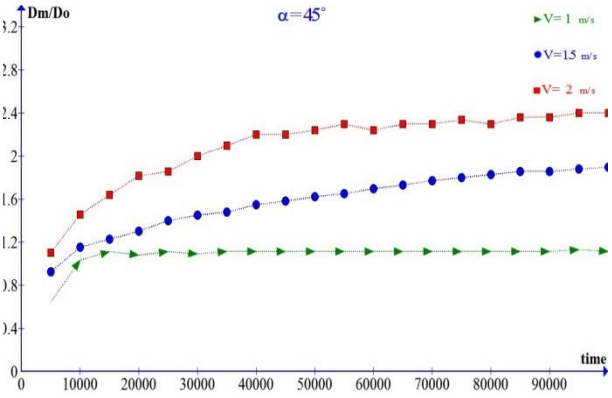
شکل ۸. تغییرات نسبت گسترش نانوقطره برروی سطح در مراحل مختلف زمانی با زوایای برخورد ۱۵ تا ۷۵ درجه و با سرعت ۲ متربرثانیه.



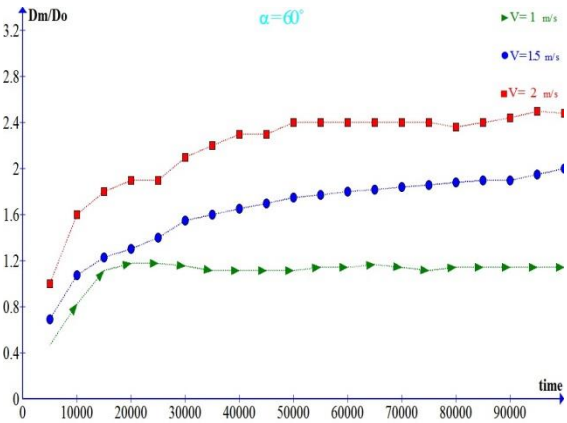
شکل ۹. تغییرات نسبت پخش شدن نانوقطره برروی سطح در مراحل مختلف زمانی با سرعت‌های برخورد ۱، ۱/۵ و ۲ متربرثانیه تحت زاویه ۱۵ درجه.



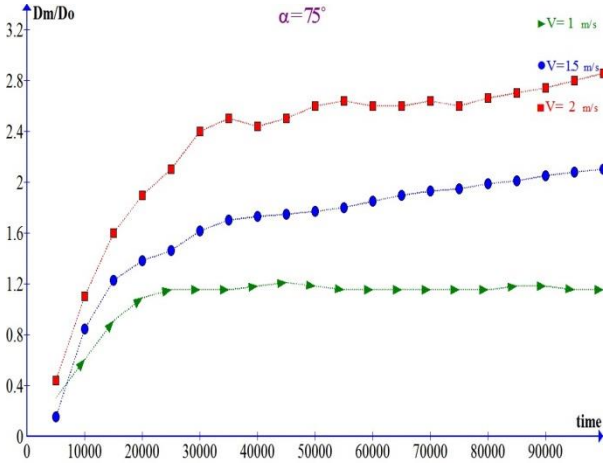
شکل ۱۰. تغییرات نسبت پخش شدن نانوقطره برروی سطح در مراحل مختلف زمانی با سرعت‌های برخورد ۱, ۱/۵ و ۲ متربرثانیه تحت زاویه ۳۰ درجه.



شکل ۱۱. تغییرات نسبت پخش شدن نانوقطره برروی سطح در مراحل مختلف زمانی با سرعت‌های برخورد ۱, ۰/۵ ۱و ۲ متربرثانیه تحت زاویه ۴۵ درجه.



شکل ۱۲. تغییرات نسبت پخش شدن نانوقطره برروی سطح در مراحل مختلف زمانی با سرعت‌های برخورد ۱, ۰/۵ ۱و ۲ متربرثانیه تحت زاویه ۶۰ درجه.



شکل ۱۳. تغییرات نسبت پخش شدن نانوقطره برروی سطح در مراحل مختلف زمانی با سرعت‌های برخورد ۱, ۰/۵ ۱و ۲ متربرثانیه تحت زاویه ۷۵ درجه.

نتیجه‌گیری

در این تحقیق برخورد نانو قطره به سطح جامد مورب، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، مورد مطالعه قرار گرفته است. ابتدا روش دینامیک مولکولی شرح داده شده و مشخص گردید که تعداد اتم‌های شرکت کننده در شبیه‌سازی باید به تعداد لازم برسد تا کشش سطحی ماکروسکوپیک درآن بدست آید. نتایج برخورد نانوقطره در پنج زاویه برخورد ۱۵، ۳۰، ۴۵، ۶۰ و ۷۵ درجه و در سه سرعت برخورد ۱، ۱/۵ و ۲ متر برثانیه رسم گردیده و مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که نسبت پخش شدن نانو قطره برروی سطح، با افزایش زاویه برخورد، اندکی افزایش دارد، ولی با افزایش سرعت بشدت افزایش پیدا می‌کند. این نتیجه گیری در مقیاس نانو، با آنچه در مقیاس میکرو اتفاق می‌افتد، متفاوت است. بنابراین در تولید پوشش‌های نانویی، سرعت برخورد عامل مهم‌تری نسبت به زاویه برخورد بوده و باید سرعت مناسب برخورد مایل قطره به سطح را بهینه‌سازی کرد تا بیشترین کارایی را در میزان پخش شدن قطره برروی سطح به دست آورد.

مراجع

1. X. Li, Y. Chen, S. Mo, L. Jia, X. Shao, *Effect of surface modification on the stability and thermal conductivity of water-based SiO 2-coated graphene nanofluid*, Thermochim. Acta, 595 (2014) 6-10.

2. W. Yu, D. France, S. Choi, J. Routbort, Review and assessment of nanofluid technology for transportation and other applications, Argonne National Laboratory (ANL), 2007.

3. J.C. Thies, E. Currie, G.J. Meijers, K. Gan, Method of preparing nano-structured surface coatings and coated articles, Google Patents, 2011.

4. P. Fauchais, A. Vardelle, *Innovative and emerging processes in plasma spraying: from micro-to nano-structured coatings*, J. Phys. D: Appl. Phys., 44 (2011) 194011.

5. M.E. Tuckerman, G.J. Martyna, *Understanding modern molecular dynamics: techniques and applications*, The Journal of Physical Chemistry B, 104 (2000)159-178.

6. X. Nie, S. Chen, M. Robbins, *A continuum and molecular dynamics hybrid method for micro-and nano-fluid flow*, J. Fluid Mech., 500(2004)55-64.

7. S. Asadi, M. Passandideh-Fard, M. Moghiman, *Numerical and analytical model of the inclined impact of a droplet on a solid surface in a thermal spray coating process*, Iran. J. Surf. Eng., (2011).

8. S. Asadi, M. Passandideh-Fard, M. Moghiman, *The effect of contact angle on droplet impact onto a solid surface*, Iran. J. Surf. Eng., (2011).

9. S. Asadi, *Simulation of nanodroplet impact on a solid surface*, Inter. J. Nano Dim., 3(2012)19-26.

10. N. Sedighi, S. Murad, S.K. Aggarwal, *Molecular dynamics simulations of spontaneous spreading of a nanodroplet on solid surfaces*, Fluid Dynamics Research, 43(2011).

11. N. Sedighi, S. Murad, S. Aggarwal, K,, *Molecular dynamics simulations of spontaneous spreading of a nanodroplet on solid surfaces*, fluid dynamics research, 43 (2011)1-23.

12. A. Satoh, Introduction to practice of molecular simulation : molecular dynamics, Monte Carlo, Brownian dynamics, Lattice Boltzmann, dissipative particle dynamics, Elsevier, Amsterdam ; Boston, (2011).

13. H. Fukumura, Molecular nano dynamics, Wiley-VCH, Weinham, (2009).

14. M. Griebel, S. Knapek, G.W. Zumbusch, Numerical simulation in molecular dynamics: numerics, algorithms, parallelization, applications, Springer, Berlin, (2007).

15. H. Yu, Molecular dynamics simulations of wear processes, Arizona State University, (2003).

16. D.C. Rapaport, The art of molecular dynamics simulation, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, UK ; New York, NY, (2004).

17. G. He, N. Hadjiconstantinou, *A molecular view of Tanner's law: molecular dynamics simulations of droplet spreading*, J. Fluid Mech., 497 (2003) 123-132.

18. G. He, M.O. Robbins, *Simulations of the static friction due to adsorbed molecules*, Physical Review B, 64 (2001) 035413.