

مطالعه برگشت نانو قطره در برخورد به سطح توسط شبیه‌سازی

دینامیک مولکولی

سعید اسدی

دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه پیام نور، صندوق پستی ۴۶۹۷-۱۹۳۹۵، تهران، ایران

سجاد حیدرپور کیایی

دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مکانیک، واحد لاهیجان، دانشگاه آزاد اسلامی، صندوق پستی ۱۶۱۶، لاهیجان، ایران

(دریافت مقاله: ۹۸/۱۱/۲۸ - پذیرش مقاله: ۹۹/۱۱/۰۷)

چکیده

پوشش‌های نانویی به علت مقاومت بالا در برابر خوردگی و حرارت، کاربرد وسیعی در سال‌های اخیر پیدا کرده‌اند. برگشت نانو قطره پس از برخورد به سطح، یکی از مهمترین پارامترها در ایجاد پوشش‌های نانویی ناقص و خراب می‌باشد. جدایش و یا برگشتن نانو قطره از روی سطح بستگی به عوامل فیزیکی مختلفی دارد که از مهمترین آن‌ها می‌توان به قطر، سرعت و زاویه برخورد نانو قطره به سطح اشاره کرد. هدف از انجام این پژوهش، بررسی پدیده برگشت نانو قطره از روی سطح و بررسی روش‌های جلوگیری از آن برای ایجاد پوشش‌های یکنواخت و با کیفیت می‌باشد. در این تحقیق از مدل‌سازی دینامیک مولکولی در ابعاد نانو، برای شبیه‌سازی فرآیند برگشت نانو قطره از روی سطح استفاده شده است. ابتدا نانو قطره و سپس صفحه برخورد شبیه‌سازی و ساخته شده و بعد از آن از الگوریتم ورله برای مدل‌سازی این پدیده استفاده گردیده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش قطر نانو قطره مقدار سرعت حدی که در آن پدیده جدایش و برگشت رخ می‌دهد افزایش می‌یابد. همچنین با افزایش قطر قطره، سرعت برگشت و جدایش نانو قطره به صورت خطی و با شیبی نزدیک به ۴۵ درجه افزایش یافته است. از نتایج به دست آمده مشاهده می‌شود که با کاهش زاویه برخورد نانو قطره نسبت به سطح، احتمال برگشت آن از روی سطح کم می‌گردد. پیش‌بینی تاثیرات قطر نانو قطره و زاویه پاشش، در پدیده جدایش و برگشت نانو قطره، توسط نمودارهای حاصل از این تحقیق، باعث بهبود عملکرد فرآیندهای پاشش نانو ذرات و جلوگیری از ایجاد پوشش‌های ناقص می‌شود. **واژه‌های کلیدی:** نانو قطره، برگشت از سطح، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، فرآیند پاشش، پوشش‌های نانویی.

Study of The Rebound of A Nano Droplet from a Surface by Molecular Dynamics Simulation

Saeid Asadi, Sajad Heydarpoor kiayee

Department of Mechanical Engineering, Payame Noor University (PNU), P.O. Box 19395-3697, Tehran, Iran

Department of Mechanical Engineering, Lahijan Branch, Islamic Azad University, Lahijan, Iran

(Received 17 February 2020, accepted 26 January 2021)

Abstract

The nano coatings have been widely used for heat and corrosion resistant surfaces. Nano droplet rebounding from the surface is one of the most important parameters in producing imperfect and defective coatings. The separation or rebounding of nanoparticle from surface depends on various physical factors such as nano droplet diameter, velocity and angle of droplet impact to the surface. The aim of this study was to investigate of phenomenon of nano droplet rebounding and prevent to create non-uniform and non-quality coatings. In this research, nanoscale molecular dynamics modeling was used to simulate of nano droplet rebounding behavior. At first, the nanoparticles and collision surface were simulated and then the Verlet algorithm is used to model this phenomenon. The results show that with increasing of nanoparticle diameter, the rebounding velocity increases that this increasing is linearly with gradient of about 45 degrees. The results show that by reducing of the nanoparticle impact angle, the probability of the droplet rebounding from the surface decreases. By the graphic results of this study, effects of nanoparticle diameter and impact angle can be predicted on the separation and rebounding phenomena, and improved the performance of nanoparticle spray processes, and then prevented defective nano coatings.

Keywords: Nano droplet, Rebounding, Molecular dynamics simulation, Spray process, Nano coating.

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

مقدمه

پوشش‌های نانویی کاربرد وسیعی در صنایع گوناگون از جمله پوشش‌دهنده‌های فلزی و غیر فلزی مقاوم به حرارت و خوردگی، جت پریترها، سنتز دی‌ان‌ای، سنتز داروهای جدید و همچنین ساخت سلول‌های جدید خورشیدی و بسیاری از موارد دیگر دارد. یکی از مهمترین عواملی که باعث خراب شدن و یا ناقص شدن پوشش نانویی می‌گردد، برگشت نانو قطره پس از برخورد با سطح می‌باشد. به عبارتی در فرآیند پاشش نانو قطره به روی سطح، در بعضی شرایط فیزیکی خاص، نانو قطره بر روی سطح نمی‌نشیند و پخش نمی‌گردد و از روی سطح برگشت می‌کند که باعث ناقص یا خراب شدن پوشش در ابعاد نانو می‌گردد. برای مطالعه تاثیر عوامل گوناگون در این فرآیند بهترین و ارزان ترین روش استفاده از شبیه سازی‌ها در ابعاد نانو می‌باشد زیرا دستیابی به چگونگی تاثیر این عوامل در آزمایشگاه بسیار پرهزینه و گران قیمت است. یکی از مهمترین روش‌ها شبیه‌سازی برخورد نانو قطرات با سطح و یا به عبارتی بررسی تعامل قطرات با سطح در ابعاد نانو، مدل‌سازی توسط دینامیک مولکولی می‌باشد. مارو و یانگ [۱] توسط دینامیک مولکولی، برخورد نانو قطره آرگون با سطح پلاتینیوم را بررسی کردند و در سرعت‌های مختلف برخورد، زوایای تماس گوناگون را به دست آوردند. شی و همکاران [۲] قطرات آب و سیال لنارد جونز را در مجاورت دیواره صلب، با استفاده از روش دینامیک مولکولی شبیه‌سازی کردند. آنها بخش بلند برد نیروهای بین ذره ای را نیز در محاسبات خود در نظر گرفته و نشان دادند که نتایج به دست آمده برای کشش سطحی و زاویه تماس با نتایج تجربی تطابق بسیار زیادی دارد. آنها همچنین نشان دادند که در دمای بسیار زیاد، زاویه تماس به سمت صفر میل می‌کند. صدیقی و همکاران

[۳] به وسیله روش دینامیک مولکولی و با استفاده از انواع سطوح رطوبت پذیر، رطوبت ناپذیر و نیمه رطوبت پذیر در شبیه‌سازی، پخش شدن نانو قطره را در برخورد عمودی قطره با سطح شبیه‌سازی کرده و تغییرات زوایای تماس در حین برخورد قطره با سطح را به دست آوردند. وو و همکاران [۴] به بررسی اثرات دما، اندازه و زبری سطح یک نانو قطره در تماس با فلز طلا با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداختند. آنها به این نتیجه رسیدند که با گذشت زمان قطره به تدریج روی سطح پخش می‌شود و سرعت پخش با افزایش دما افزایش پیدا می‌کند. همچنین سطوح زیر باعث افزایش قدرت ترشوندگی می‌شود. کیم [۵] برخورد دو نانو قطره ی پلیمری با استفاده از دینامیک مولکولی را مورد مطالعه قرار داد. وو و همکاران [۴] به بررسی اثرات دما و سرعت قطره خروجی از نانو جت روی صفحات محرک با استفاده از دینامیک مولکولی پرداختند. آنان به این نتیجه رسیدند که وسعت پخش قطره با افزایش دما و گذشت زمان، افزایش پیدا می‌کند. اسدی [۶] برخورد عمودی نانو قطره با سطح صاف را به وسیله روش *CFD-MK* مطالعه نمود. وی نتایج به دست آمده را با نتایج حاصل از تحقیق صدیقی و همکاران [۷] که از روش دینامیک مولکولی استفاده کرده بودند مقایسه کرد. مقایسه نتایج، تطبیق خوبی بین داده‌های دو روش شبیه‌سازی را نشان داد. فرآیند برخورد نانو قطره با سطوح آبگریز توسط بائو و همکاران [۸] مورد بررسی قرار گرفت. آنها متوجه شدند که تاثیر سرعت برخورد، بسیار زیادتر از زاویه تماس قطره با سطح می‌باشد. وک و همکاران [۹] دقت و صحت زاویه‌ی تماس دینامیکی قطره آب با سطح گرافن را بررسی کردند آنها مشاهده کردند که برای بالا بردن دقت زاویه‌ی تماس، به محاسبات طولانی‌تری در یک شبیه‌سازی نیاز است. آنها تاثیر جهت‌گیری لایه‌ی گرافن بر روی زاویه‌ی تماس دینامیکی را بررسی نموده و به این نتیجه رسیدند که

و همکاران [۱۵] توسط دینامیک مولکولی، حداکثر ضریب پخش بوجود آمده در برخورد نانو قطره پلیمری به سطح جامد آب‌گریز را مطالعه کردند. آنها با در نظر گرفتن مکانیزم‌های مختلف اتلاف، نسبت به اصلاح مقادیر اتلاف در اثر ویسکوزیته اقدام کرده و مدل جدیدی را برای پیش‌بینی حداکثر ضریب پخش قطرات پلیمری در مقیاس نانو، توسعه دادند. با مطالعه تحقیقات انجام شده تا کنون، مشخص گردید که پدیده جدایش و برگشت نانو قطره از روی سطح، به وسیله شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، بررسی نشده است بنابراین نوآوری این مقاله در این است که توسط دینامیک مولکولی، پدیده جدایش و برگشت نانو قطره از روی سطح مطالعه و بررسی می‌گردد.

در این مقاله، توسط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، برخورد و سپس برگشت نانو قطره از روی سطح مطالعه شده است. بدین منظور، پدیده برگشت نانو قطره از روی سطح، در شرایط گوناگون از جمله تغییرات سرعت، قطر و زاویه برخورد نانو قطره مورد بررسی قرار گرفته است. اگرچه در این تحقیق به طور خاص برخورد نانو قطره آب با سطح طلا مورد مطالعه قرار گرفته است ولی با تغییر ضرایب معادلات و تصحیح کد نوشته شده، برخورد انواع نانو قطرات با سطوح مختلف قابل بررسی می‌باشد. در ادامه مقاله و در بخش ۲، ابتدا مدل‌سازی دینامیک مولکولی به کار رفته در این تحقیق بیان گردیده است. سپس در بخش ۳ نتایج حاصل از کد نوشته شده بر اساس معادلات مدل‌سازی، آورده شده و مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. در بخش ۴ نیز نتیجه‌گیری از این پژوهش ارائه گردیده است.

زاویه‌ی تماس و ابستگی به چرخش لایه‌ی گرافن ندارد. برخورد مایل نانو قطره با سطح با استفاده از روش دینامیک مولکولی، توسط اسدی [۱۰] شبیه‌سازی گردید. وی نشان داد که نسبت پخش‌شدن نانو قطره بر روی سطح، با افزایش زاویه برخورد، اندکی زیاد شده ولی با افزایش سرعت برخورد، شدت افزایش پیدا می‌کند. در تحقیقی دیگر پناهی و اسدی [۱۱] توزیع آماری ذرات میکرو و نانو را بر روی سطح مطالعه کردند. در آن تحقیق، توزیع نمایی تعمیم یافته به عنوان بهترین توزیع آماری در این پدیده معرفی گردید. در پژوهشی دیگر پناهی و اسدی [۱۲] پخش‌شدن نانو قطرات بر روی سطح با استفاده از مدل رگرسیون غیرخطی چند متغیره را پیش‌بینی کردند. آنها نشان دادند که مدل رگرسیون غیرخطی که ترکیبی از مدل توانی و نمایی است، دارای بیشترین بازده و کمترین خطا می‌باشد و تطابق بالایی با خروجی مطلوب دارد. آنها به این نتیجه رسیدند که همبستگی بین سرعت و میزان پخش شدن نانو قطره ۰/۹۵ است که در سطح بسیار بالایی از لحاظ مدل‌های رگرسیونی قرار دارد. ین و همکاران [۱۳] در مقاله خود شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برخورد نانو قطره آب به لایه منحنی مس را بررسی کردند. نتایج آنها نشان داد که سرعت برخورد، اثرات نیروی بین اتم‌های اکسیژن و مس، و زاویه انحنای لایه مس نقش مهمی در پدیده جذب نانو ذرات بازی می‌کند. یو و همکاران [۱۴] شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تبخیر قطره آرگون از روی یک سطح حرارت دیده را انجام دادند. آنها مکانیزم انتقال حرارت میان سطح تماس جامد و مایع مابین بخار قطره آرگون و سطح گرم شده را مطالعه کردند. نتایج آنها نشان داد که تبخیر در حالت پایا انجام می‌گردد و چگالی جرمی سطح تماس به شدت کاهش می‌یابد. آنها مشاهده کردند که با افزایش دمای اولیه، زاویه تماس کاهش می‌یابد. وانگ

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

$$\vec{v}_i(t + \frac{1}{2}\delta t) = \vec{v}_i(t - \frac{1}{2}\delta t) + \vec{a}_i(t)\delta t \quad (۳)$$

$$\vec{v}_i(t + \delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t + \frac{1}{2}\delta t)\delta t \quad (۴)$$

می‌باشد که در آن \vec{r}_i مقدار جابجایی، \vec{v}_i سرعت، \vec{a}_i شتاب و δt گام زمانی می‌باشد. $\vec{a}_i(t)$ از موقعیت $\vec{r}_i(t)$ در زمان t به آسانی محاسبه می‌شود. اگر $\vec{v}_i(t - \frac{1}{2}\delta t)$ و $\vec{r}_i(t)$ مشخص باشد، آنگاه می‌توانیم سرعت را در زمان $t + \frac{1}{2}\delta t$ از دو معادله اخیر بدست آوریم. و نهایتاً سرعت در زمان t می‌تواند از رابطه (۵) محاسبه شود:

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

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 می‌باشد، که فضای کمتری را بر روی کامپیوتر اشغال می‌کند و از طرفی یک روش پایدار است [۱۸، ۱۹].

در این تحقیق برخورد و برگشت مولکول‌های آب از روی صفحه طلا مورد بررسی قرار گرفته است که این روش به کار برده شده برای انواع نانوقطرات با جنس‌های مختلف و انواع صفحات با مواد گوناگون، قابل تعمیم می‌باشد. در این پژوهش برای تولید هندسه اولیه مولکول آب از نرم افزار مدل‌سازی آرگوس لب^۱ استفاده شده است. با توجه به تحقیقات اورسی [۲۰] برای مدل‌سازی مولکول‌های آب از مدل TIP4P/2005 استفاده گردیده است. پتانسیل حاکم بین مولکول‌های آب به صورت رابطه (۶) تعریف می‌شود:

$$4\mathcal{E}_{ij} = \sum_{ij} \frac{q_i q_j e^2}{r_{ij}^2} + 4\epsilon_{00} \left[\left(\frac{\sigma_{00}}{r_{00}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{00}}{r_{00}} \right)^6 \right] \quad (۶)$$

در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، با اعمال معادلات حرکت نیوتن، مجموعه‌ای از مکان‌های جدید مولکول‌ها و اتم‌ها به صورت متوالی به دست می‌آید. به عبارتی در دینامیک مولکولی موقعیت مکانی ذرات در گام‌های زمانی آینده با استفاده از حالت فعلی پیش بینی می‌شود [۱۸-۱۶]. 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 لnard-جونز بطور گسترده ای بصورت تابع پتانسیلی میدان نیرو استفاده می‌شود که طبق رابطه (۱) می‌باشد:

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (۱)$$

در اینجا $U(r)$ پتانسیل مولکول‌ها در مقدار r می‌باشد و r فاصله بین مولکول‌ها است. ϵ نشان‌دهنده عمق چاه پتانسیل و σ فاصله‌ای است که در آن پتانسیل بین ذرات صفر است [۱۸].

دینامیک ذرات توسط معادله دوم نیوتن و طبق رابطه (۲) تعریف می‌شود:

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

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 در نهایت به دست آوردن محل جدید اتم یا مولکول مورد نظر می‌باشد. روش‌های زیادی برای حل معادلات حرکت نیوتن وجود دارند، روش ورله در بسیاری از برنامه‌های شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفته است که به روش قورباغه جهنده معروف است و معادلات آن طبق روابط (۳) و (۴) است.

^۱ Arguslab

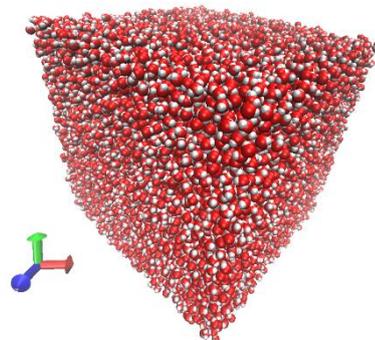
است. دیواره در هر شبیه‌سازی از ۲ لایه اتم تشکیل شده است. تعداد ذرات و همچنین ابعاد جعبه شبیه‌سازی در جدول ۱ آورده شده است.

برای مدل‌سازی اتم طلا از پتانسیل EAM^2 که برهمکنش‌های جفتی را میان فلزات و آلیاژهای فلزی محاسبه می‌کند استفاده شده است. تابع پتانسیل بین اتم‌های طلا طبق معادله پتانسیل EAM به طبق رابطه (۷) می‌باشد:

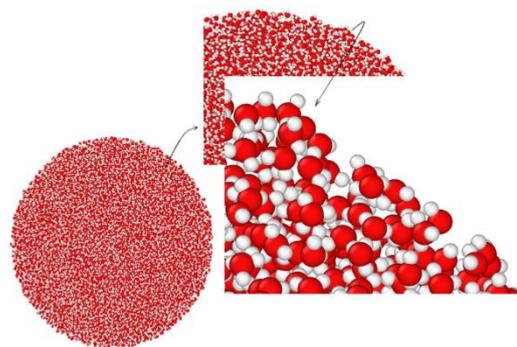
$$E_i = F_a \left(\sum_{j \neq i} \rho_{\beta}(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \varphi_{a\beta}(r_{ij}) \quad (7)$$

r_{ij} مسافت بین اتم i و j است. $\varphi_{a\beta}$ یک تابع پتانسیل برهم کنش دو به دو است. ρ_{β} چگالی بار الکترون اتم j از نوع β در موقعیت اتم i است. F انرژی نهفته (تعبیه)^۳ که نشان دهنده‌ی انرژی مورد نیاز برای اتم i از نوع آلفا در ابر الکترونی است [۲۱]. از آنجایی که چگالی ابر الکترونی، از جمع تعداد زیادی از اتم‌ها به دست می‌آید، معمولاً با قطر محدود، پتانسیل EAM یک پتانسیل چند جسمی محسوب می‌شود. برای یک سیستم جز منفرد از اتم‌ها سه تابع اسکالر باید مشخص شود: تابع تعبیه، تراکنش دو به دو و یک تابع متناسب به ابر الکترونی برای یک آلیاژ دوتایی. پتانسیل EAM به هفت تابع، شامل سه تراکنش دو به دو (AA, BB, AB) و دو تابع تعبیه و دو تابع ابر الکترونی، احتیاج دارد.

برای ایجاد نانو قطره آب ابتدا جعبه مکعبی از مولکول‌های آب ایجاد می‌گردد که با گذشت ۱۰۰۰۰۰ گام زمانی در هنگرد هم دما و هم فشار، بعد از متعادل‌سازی و کمینه‌سازی انرژی، جعبه آب به دمای ۳۰۰ کلوین و فشار یک اتمسفر رسانده می‌شود. سپس قطرات با قطر دلخواه، به شکل کروی فرم دهی داده شد که در شکل ۲ قابل مشاهده می‌باشد.



شکل ۱. جعبه شبیه‌سازی حاوی ۳۵۰۰۰ مولکول آب بعد از گذشت ۱۰۰۰۰۰ گام زمانی.



شکل ۲. کره آب با قطر ۱۰ نانو متر حاوی ۱۷۱۱۳ مولکول آب.

مشخصات شبیه‌سازی سطح و جعبه شبیه‌سازی

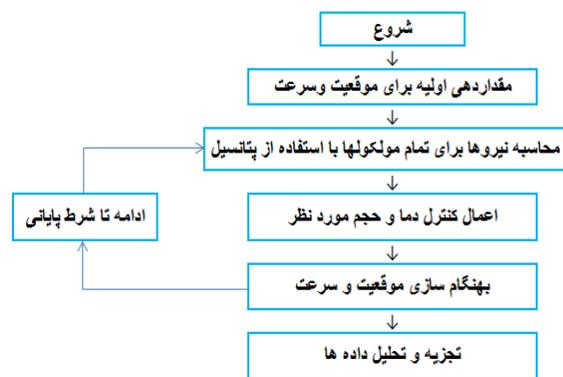
در این پژوهش از سه نانو قطره با ابعاد مختلف و همچنین سه جعبه شبیه‌سازی به ازای هر نانو قطره استفاده شده

² Embedded atom method (EAM) potentials

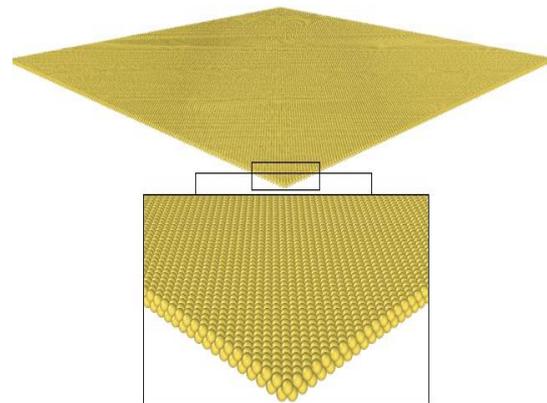
³ Embedding energy

جدول ۱. تعداد ذرات و ابعاد جعبه شبیه‌سازی بکار رفته در این تحقیق

ردیف	$D_{nanodroplet}$ (nm)	ابعاد شبیه‌سازی (nm^3)	تعداد ذرات سطح صلب و صاف طلا
۱	۵	$۴۵۰ \times ۴۱۰ \times ۲۴۰$	۴۰۰۰۰
۲	۷	$۵۷۵ \times ۵۶۷ \times ۲۹۰$	۷۸۴۰۰
۳	۱۰	$۶۱۴ \times ۶۰۷ \times ۴۱۰$	۹۰۰۰۰



شکل ۴. مراحل شبیه‌سازی دینامیک مولکولی [۲۲].



شکل ۳. صفحه صلب و صاف طلا با ضخامت ۲ اتم طلا شامل ۹۰۰۰۰ اتم.

نتایج بدست آمده و تجزیه و تحلیل آنها

اعتبار‌سنجی شبیه‌سازی

روش حل دینامیک مولکولی دارای محدودیت‌هایی است که بر روی نتایج به دست آمده تاثیر می‌گذارد. انتخاب روش حل معادلات نیوتن، مدل‌سازی مولکول‌های آب، پتانسیل حاکم بین مولکول‌های آب و مدل‌سازی سطح، از مهمترین عوامل در به دست آوردن نتایج مطلوب می‌باشند. بدین منظور پس از حل دینامیک مولکولی، نسبت به اعتبار‌سنجی آن با نتایج آزمایشگاهی و یا شبیه‌سازی‌های معتبر دیگر اقدام می‌گردد. در این قسمت، نتیجه شبیه‌سازی برخورد و پخش قطره بر روی سطح با مطالعات اسدی مقایسه شده است. اسدی از روش (CFD-MK) برخورد قائم نانو قطره با قطر ۶ نانومتر و سرعت ۱/۲۵ متر بر ثانیه را شبیه‌سازی کرده است [۶]. در شکل ۵ مشاهده می‌شود

با در نظر گرفتن معادلات لازم برای ساخت سطح صلب و صاف طلا، صفحه طلا (که سطح نیمه‌رطوبت‌پذیر است) شبیه‌سازی شده و مختصات اتم‌های طلا به دست آورده شده است (شکل ۳). سپس این مختصات و اطلاعات برخورد قطره آب با اتم‌های طلا به ورودی کد داده شده است.

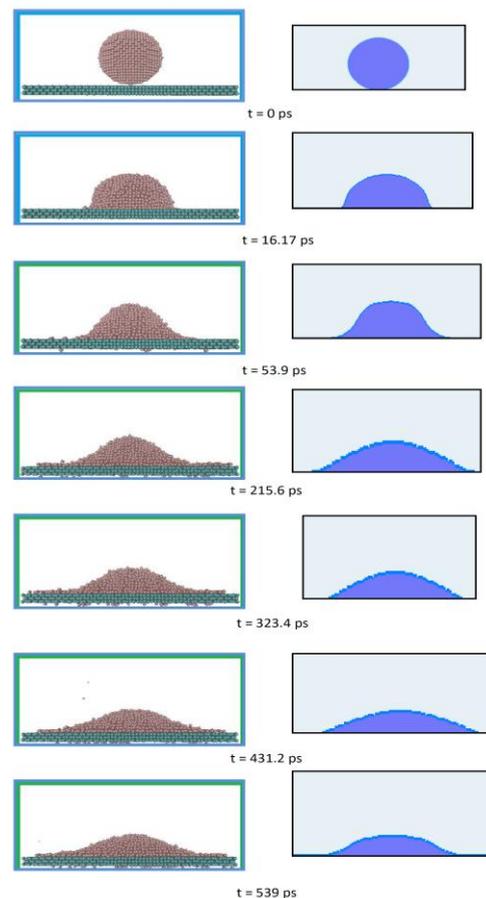
مراحل شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

مراحل مهم در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در شکل ۴ نشان داده شده است [۲۲]:

در این قسمت نتایج حاصل از تأثیر قطر، سرعت و زاویه برخورد نانو قطره، بر روی سطح صاف نیمه رطوبت پذیر طلا که توسط دینامیک مولکولی شبیه‌سازی گردیده، آورده شده است. با توجه به حجم محاسبات در روش دینامیک مولکولی، هر یک از نتایج و داده‌های این تحقیق، با CPU دو هسته‌ای ۲/۹ گیگا هرتز، در طول مدت تقریبی هفت روز به دست آمده است. بنابراین باتوجه به مدت زمان ساخت مولکول‌ها، کد نویسی، اصلاح کد براساس نتایج به دست آمده و در نهایت تعداد ران‌های به دست آمده، این گونه پژوهش‌ها ماه‌ها طول کشیده و زمان بر است، به همین دلیل از سوپر کامپیوترها برای حل معادلات دینامیک مولکولی استفاده می‌کنند تا باعث کاهش زمان محاسبات گردد. با توجه به این که می‌توان از کد نوشته شده به صورت مکرر برای اتم‌ها و مولکول‌های مختلف استفاده کرد، بنابراین، به خصوص با استفاده از کامپیوترهای سریع، هزینه‌های این گونه شبیه‌سازی‌ها از هزینه‌های آزمایش‌ها بسیار کمتر می‌باشد.

در این پژوهش برگشت نانو قطره آب با قطرهای ۵، ۷ و ۱۰ نانومتر در زاویه ی برخورد ۹۰ و ۴۵ درجه، مورد بررسی قرار گرفته است. در شکل ۶ برخورد نانو قطره به قطر ۵۰ آنگستروم (۵ نانومتر) به صورت عمودی (زاویه ۹۰ درجه) و سرعت ۵۱ آنگستروم بر پیکوثانیه به سطح صاف طلا نشان داده شده است.

که نتایج حاصل از برخورد قائم از دو روش انجام شده، بسیار نزدیک به هم بوده و بنابراین نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پیش‌بینی مناسبی از برخورد نانو قطره را ارائه 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 می‌باشد.



(الف)

(ب)

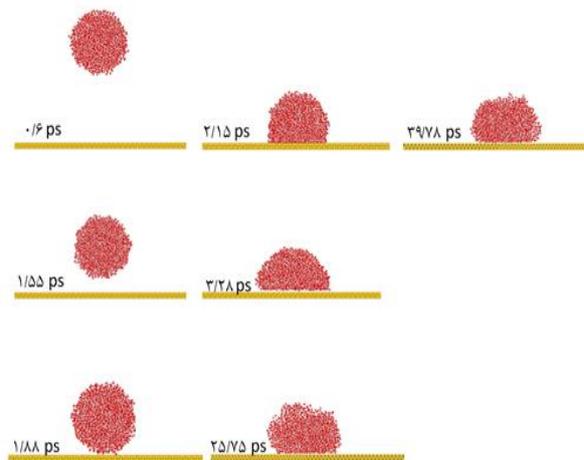
شکل ۵ : برخورد نانو قطره به قطر ۶ نانومتر با سرعت ۱/۲۵ متر بر ثانیه به سطح صاف

الف - شبیه‌سازی انجام شده در این تحقیق

ب- شبیه‌سازی انجام شده توسط اسدی [۶]

نتایج به دست آمده و تجزیه و تحلیل آنها

در بسیاری از فرآیندهای پاشش، نازل دستگاه پاشش به صورت مایل نسبت به سطح قرار می‌گیرد، بنابراین نانو قطره به صورت مایل به سطح برخورد می‌کند [۲۲]. به همین دلیل برخورد مایل نانو قطره به سطح، با زاویه ۴۵ درجه، نیز شبیه‌سازی شده و سرعت برگشت قطره از سطح به دست آمده است. در برخورد مایل (زاویه ۴۵ درجه نسبت به سطح) علاوه بر نمای جانبی فرآیند برخورد (نمای چپ)، نمای برخورد از روبرو نیز ارائه شده است. در شکل ۹ و ۱۰ برخورد قطره ۱۰ نانومتری (۱۰۰ انگسترومی) به سطح نشان داده شده است. در شکل ۹ قطره ۱۰ نانومتری، در سرعت (A/ps) ۱۱۰ به سطح برخورد کرده و پس از برخورد مایل و با زاویه ۴۵ درجه به سطح، ابتدا روی سطح پخش می‌شود، سپس کناره‌های قطره از روی سطح بالا آمده و بعد از گذشت زمان، شکل یک قطره پخش شده روی سطح را گرفته تا اینکه به شکل کره جمع می‌شود و روی سطح باقی می‌ماند. اگر سرعت برخورد بیش از این مقدار افزایش یابد قطره از روی سطح جدا می‌شود. در شکل ۱۰، قطره ۱۰ نانومتری پس از برخورد مایل به سطح، با سرعت (A/ps) ۱۱۱، ابتدا روی سطح پخش می‌شود، سپس نانو قطره به طور کامل از سطح جدا می‌شود. همچنین در طی کل فرآیند قسمتی از مولکول‌ها از قطره جدا می‌گردند که به دلیل سرعت بالای برخورد می‌باشد. بنابراین در این حالت سرعت حدی جدایش و برگشت قطره از سطح (A/ps) ۱۱۱ می‌باشد.

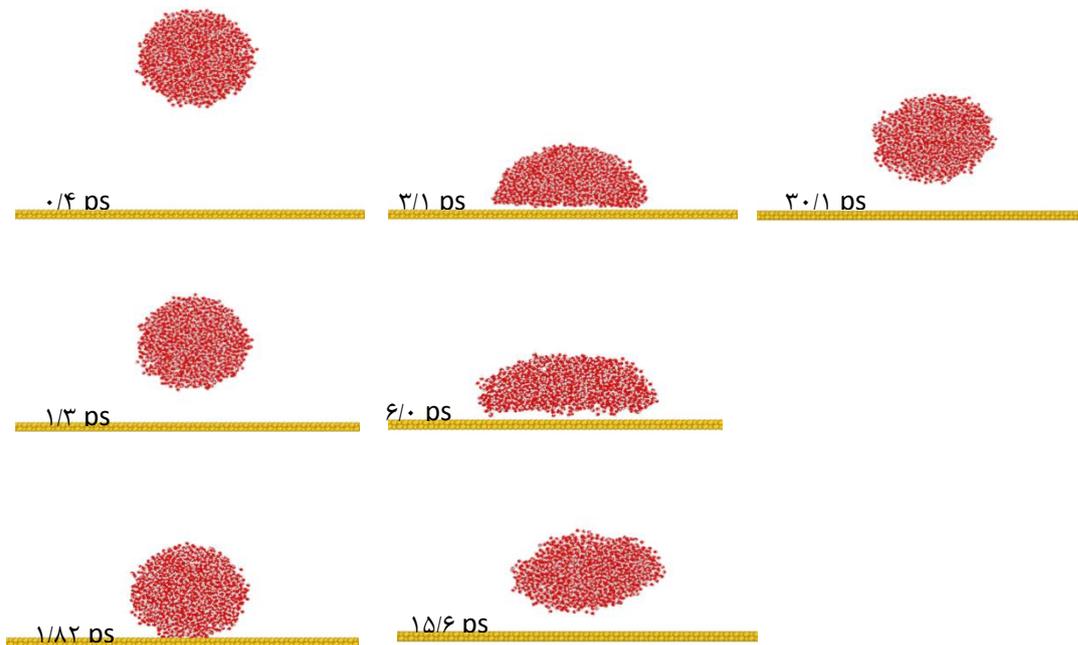


شکل ۶. برخورد نانو قطره به قطر ۵۰ انگستروم با زاویه ۹۰ درجه و سرعت ۵۱ انگستروم بر پیکوثانیه به سطح صاف طلا.

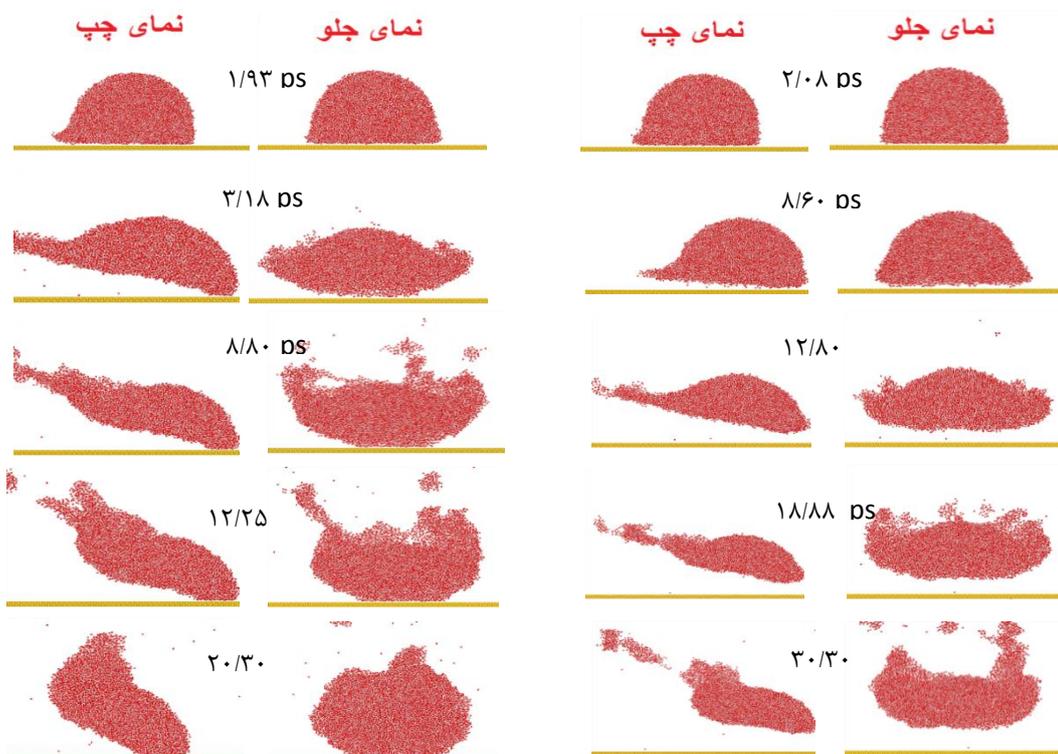
همانگونه که در شکل ۶ دیده می‌شود قطره پس از برخورد با سطح بر روی سطح باقی مانده و اندکی پخش می‌شود. اگر سرعت برخورد از ۵۱ انگستروم بر پیکوثانیه به ۵۲ انگستروم بر پیکوثانیه افزایش یابد، آنگاه همانند شکل ۷ قطره بر روی سطح باقی نمانده و از روی سطح برگشت می‌کند. به دست آوردن این حد سرعت که در آن برگشت انجام می‌شود، نیاز به جوابگیری‌های زیاد و طولانی از کد، برای سرعت‌های متفاوت دارد تا بتوان با سرعت‌های حدس زده شده به سرعت حدی نزدیک شد و سپس حد سرعت جدایش و برگشت قطره را به دست آورد.

در شکل ۷ مشاهده می‌شود که نانو قطره هنگامی که با سرعت ۵۲ انگستروم بر پیکوثانیه به سطح برخورد می‌کند پس از ۱۵/۶ پیکوثانیه از روی سطح جدا شده و برگشت می‌کند.

نتایج مربوط به برخورد عمودی یا ۹۰ درجه نانوقطرات با قطر ۷۰ و ۱۰۰ انگستروم و سرعت‌های حدی آنها که باعث برگشت قطره از روی سطح می‌شود در شکل ۱۱ رسم گردیده است.

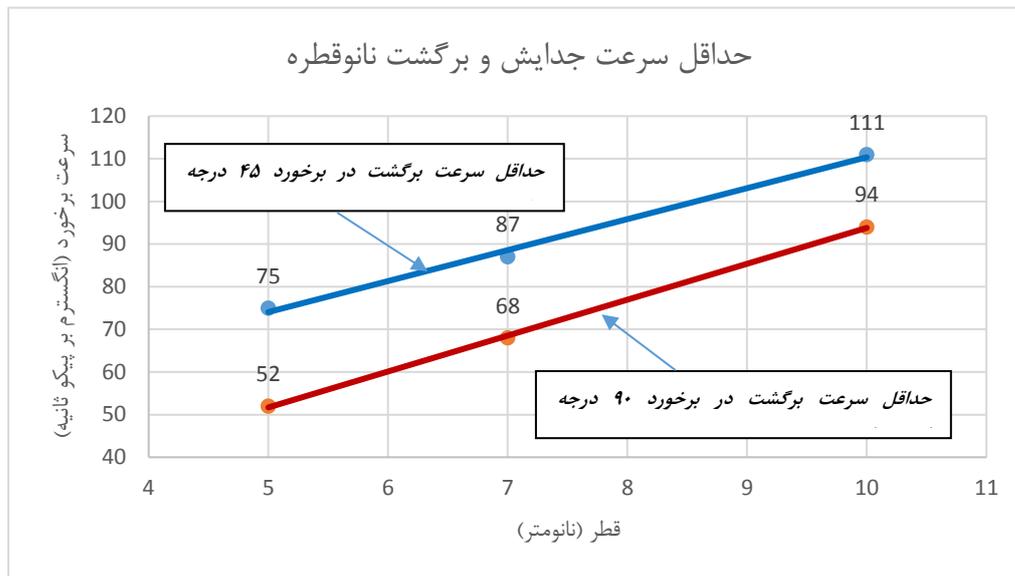


شکل ۷. برخورد نانو قطره به قطر ۵۰ آنگستروم با زاویه ی ۹۰ درجه و سرعت ۵۲ آنگستروم بر پیکوثانیه به سطح صاف طلا.



شکل ۹. برخورد نانو قطره به قطر ۱۰۰ آنگستروم (۱۰ نانومتر) با زاویه ۴۵ درجه و سرعت ۱۱۰ آنگستروم بر پیکوثانیه به سطح صاف طلا

شکل ۱۰. برخورد نانو قطره به قطر ۱۰۰ آنگستروم (۱۰ نانومتر) با زاویه ۴۵ درجه و سرعت ۱۱۱ آنگستروم بر پیکوثانیه به سطح صاف طلا.



شکل ۱۱. نمودار حداقل سرعت جدایش و برگشت نانو قطره، در برخورد به سطح، با قطرهای ۵، ۷ و ۱۰ نانومتر در زاویه ی ۹۰ و ۴۵ درجه.

نسبت به سرعت حدی برگشت قطره، قابل انتظار می‌باشد. همچنین در برخورد قطره با زاویه ۴۵ درجه نیز با افزایش قطر نانو قطره، سرعت حدی جدایش و برگشت نانو قطره، افزایش یافته که این افزایش نیز به صورت خطی می‌باشد. نتایج نشان می‌دهد که پدیده جدایش و برگشت در قطرات با قطر بزرگتر در زوایای مختلف برخورد، در سرعت بیشتری صورت می‌پذیرد. با مقایسه دو خط رسم شده در شکل ۱۱ مشخص می‌شود که تفاوت در زاویه برخورد به سطح، منجر به تغییر رفتار قطره گردیده است. در برخورد مایل (۴۵ درجه) نسبت به برخورد عمودی (۹۰ درجه)، جدایش قطره از روی سطح، در سرعت بالاتری صورت می‌گیرد. به عبارت دیگر کاهش زاویه برخورد به سطح، با افزایش محسوس سرعت جدایش همراه است. بنابراین نتایج سرعت برخورد و برگشت قطرات با قطرهای ۵، ۷ و ۱۰ نانومتر در شکل ۱۱ نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که در برخورد عمودی یا نود درجه، مقدار قطر نانو قطره، در سرعت حدی که باعث برگشت نانو قطره از روی سطح صاف می‌شود، تاثیر دارد.

نتایج سرعت برخورد و برگشت قطرات با قطرهای ۵، ۷ و ۱۰ نانومتر در شکل ۱۱ نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که در برخورد عمودی یا نود درجه، مقدار قطر نانو قطره، در سرعت حدی که باعث برگشت نانو قطره از روی سطح صاف می‌شود، تاثیر دارد. به عبارت دیگر با افزایش قطر نانو قطره، سرعت جدایش و برگشت قطره از روی سطح افزایش می‌یابد. همانگونه که در شکل مشاهده می‌شود، تغییرات قطر نانو قطره با سرعت جدایش و برگشت، خطی است و این تغییرات خطی شبیه نزدیک به ۴۵ درجه دارد. این تغییرات خطی را می‌توان بدین گونه مورد ارزیابی قرار داد که با افزایش قطر قطره، حجم آن و در نتیجه تعداد مولکول‌های نانو قطره افزایش می‌یابد. با افزایش تعداد مولکول‌ها، به دلیل تمایل چسبندگی مولکول‌ها به سطح نیاز به سرعت بالاتری در برخورد می‌باشد تا در اثر نیروی عکس‌العمل سطح، قطره از روی سطح برگشت نماید. با توجه به نسبت مستقیم افزایش تعداد مولکول‌ها به حجم قطره و در نتیجه افزایش سرعت حدی برگشت، خطی بودن نسبت قطر قطره

نتیجه‌گیری

در این تحقیق توسط مدل‌سازی دینامیک مولکولی، جدایش و برگشت نانوقطره از روی سطح صاف، شبیه‌سازی شده است. با استفاده از معادلات دینامیک مولکولی و حل آنها، تاثیرات قطر و زاویه برخورد نانوقطره آب بر روی پدیده جدایش و برگشت نانوقطره از روی سطح طلا، مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که با افزایش قطر نانوقطره مقدار سرعت حدی که در آن پدیده جدایش و برگشت رخ می‌دهد افزایش می‌یابد. به عبارتی هرگاه قطر نانو قطرات در پاشش کم باشد باید با سرعت کمتری نانوقطرات به سمت سطح پاشیده شود تا از برگشت و جدایش نانوقطرات جلوگیری گردد. همچنین سرعتی که در آن جدایش نانوقطره رخ می‌دهد به صورت خطی و با شیبی نزدیک به ۴۵ درجه نسبت به افزایش قطر قطره، زیاد می‌شود. این مطالعه نشان می‌دهد که با کاهش زاویه برخورد نانوقطره نسبت به سطح، احتمال برگشت آن از روی سطح کاهش می‌یابد به عبارتی با کاهش زاویه پاشش یا کاهش زاویه برخورد نانوقطره به سطح، سرعت حدی برگشت و جدایش نانوقطره از سطح افزایش می‌یابد در نتیجه با سرعت‌های بیشتری می‌توان عمل پاشش نانو قطرات را انجام داد. با توجه به نتایج به دست آمده، مشاهده می‌گردد که تنظیم نازل پاشش برای ایجاد نانو قطراتی با قطر مناسب، همچنین تنظیم سرعت پاشش و زاویه پاشش نانوقطرات، تاثیر مهمی در جدایش و برگشت نانوقطرات از روی سطح دارد. با استفاده از نتایج این پژوهش و رعایت مقادیر قطر، سرعت و زاویه برخورد نانوقطره می‌توان از پدیده جدایش و برگشت نانو قطره جلوگیری کرد تا پوششی ناقص و خراب به وجود نیاید.

به عبارت دیگر با افزایش قطر نانو قطره، سرعت جدایش و برگشت قطره از روی سطح افزایش می‌یابد. همانگونه که در شکل مشاهده می‌شود، تغییرات قطر نانو قطره با سرعت جدایش و برگشت، خطی است و این تغییرات خطی شیبی نزدیک به ۴۵ درجه دارد. این تغییرات خطی را می‌توان بدین گونه مورد ارزیابی قرار داد که با افزایش قطر قطره، حجم آن و در نتیجه تعداد مولکول‌های نانو قطره افزایش می‌یابد. با افزایش تعداد مولکول‌ها، به دلیل تمایل چسبندگی مولکول‌ها به سطح نیاز به سرعت بالاتری در برخورد می‌باشد تا در اثر نیروی عکس‌العمل سطح، قطره از روی سطح برگشت نماید. با توجه به نسبت مستقیم افزایش تعداد مولکول‌ها به حجم قطره و در نتیجه افزایش سرعت حدی برگشت، خطی بودن نسبت قطر قطره نسبت به سرعت حدی برگشت قطره، قابل انتظار می‌باشد. همچنین در برخورد قطره با زاویه ۴۵ درجه نیز با افزایش قطر نانو قطره، سرعت حدی جدایش و برگشت نانوقطره، افزایش یافته که این افزایش نیز به صورت خطی می‌باشد. نتایج نشان می‌دهد که پدیده جدایش و برگشت در قطرات با قطر بزرگتر در زوایای مختلف برخورد، در سرعت بیشتری صورت می‌پذیرد. با مقایسه دو خط رسم شده در شکل ۱۱ مشخص می‌شود که تفاوت در زاویه برخورد به سطح، منجر به تغییر رفتار قطره گردیده است. در برخورد مایل (۴۵ درجه) نسبت به برخورد عمودی (۹۰ درجه)، جدایش قطره از روی سطح، در سرعت بالاتری صورت می‌گیرد. به عبارت دیگر کاهش زاویه برخورد به سطح، با افزایش محسوس سرعت جدایش همراه است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که در پدیده برگشت نانو قطره، کاهش زاویه برخورد با سطح افق، همواره پارامتر مهم و موثری در عدم برگشت و جدایش از سطح می‌باشد.

International Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 14 (2018) 71-83.

12. H. Panahi, S. Asadi, *Prediction of Nano-Droplet Spreading on the Surface using the Multivariate Non-Linear Regression*, Advanced Materials and New Coatings, 7 (2018) 1842-1837.

13. Z. Yin, Z. Ding, X. Ma, X. Zhang, Y. Xia, *Molecular Dynamics Simulations of Single Water Nanodroplet Impinging Vertically on Curved Copper Substrate*, Microgravity Science and Technology, (2019).

14. J.J. Yu, R. Tang, Y.R. Li, L. Zhang, C.M. Wu, *Molecular Dynamics Simulation of Heat Transport through Solid-Liquid Interface during Argon Droplet Evaporation on Heated Substrates*, Langmuir, 35 (2019) 2164--2171.

15. Y.B. Wang, X.D. Wang, Y.R. Yang, M. Chen, *The Maximum Spreading Factor for Polymer Nanodroplets Impacting a Hydrophobic Solid Surface*, Journal of Physical Chemistry C, 123 (2019) 12841--12850.

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

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

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

19. H. Fukumura, Molecular nano dynamics, Wiley-VCH, Weinham, 2009.

20. M. Orsi, *Comparative assessment of the ELBA coarse-grained model for water*, Mol. Phys., 112 (2014) 1566--1576.

21. S.M. Rassoulinejad-Mousavi, Y. Zhang, *Interatomic Potentials Transferability for Molecular Simulations: A Comparative Study for Platinum, Gold and Silver*, Scientific Reports, 8 (2018).

۲۲. س. اسدی، شبیه‌سازی برخورد نانو قطره به سطح مورب در فرآیند ایجاد پوشش‌های نانویی توسط دینامیک مولکولی، نشریه علوم و مهندسی سطح، ۱۳ (۱۳۹۶) ۵۰-۴۱.

1. S.C. Maroo, J.N. Chung, *Nano-droplet impact on a homogenous surface using molecular dynamics*, ASME 2008 3rd Energy Nanotechnology International Conference Collocated with the Heat Transfer, Fluids Engineering, and Energy Sustainability Conferences, American Society of Mechanical Engineers, 2008, pp. 113-121.

2. B. Shi, V.K. Dhir, *Molecular dynamics simulation of the contact angle of liquids on solid surfaces*, J. Chem. Phys., 130 (2009) 347-355.

3. 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.

4. C.-D. Wu, L.-M. Kuo, S.-J. Lin, S.-F. Hsieh, T.-H. Fang, *Effects of temperature, size of water droplets, and surface roughness on nanowetting properties investigated using molecular dynamics simulation*, Computational Materials Science, 53 (2012) 25--30.

5. S. Kim, *Collision of Polymer Nano Droplets: Molecular Dynamics Study*, Physics Procedia, 34 (2012) 66--69.

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

7. N. Sedighi, S. Murad, S.K. Aggarwal, *Molecular dynamics simulations of nanodroplet spreading on solid surfaces, effect of droplet size*, Fluid Dynamics Research, 42 (2010) 0355.

8. H. Hai-Bao, C. Li-Bin, B. Lu-Yao, H. Su-He, *Molecular dynamics simulations of the nano-droplet impact process on hydrophobic surfaces*, Chinese Physics B, 23 (2014) 074702.

9. J. Woch, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, R. Wesoowski, P. Kowalczyk, *Water nanodroplet on a graphene surface—a new old system*, J. Phys.: Condens. Matter, 28 (2016) 495002.

10. S. Asadi, *Simulation of Nanodroplet Impact on an Oblique Surface in Nano Coating Processes by Molecular Dynamics*, Journal of Surface Science and Engineering, 13(2017) 41-50.

11. H. Panahi, S. Asadi, *Statistical Modeling for Oblique Collision of Nano and Micro Droplets in Plasma Spray Processes*,