

## بررسی ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال آب- نانولوله کربنی تک جداره و عوامل مؤثر بر آن به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

فاطمه جباری<sup>۱\*</sup>، علی رجب‌پور<sup>۲</sup>، سیفا... سعدالدین<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup> دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران

<sup>۲</sup> دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه بین‌المللی امام خمینی (ره)، قزوین، ایران

### تاریخچه داوری:

دریافت:

بازنگری:

پذیرش:

ارائه آنلاین:

### کلمات کلیدی:

نانوسیال  
ویسکوزیته دینامیکی  
شبیه‌سازی دینامیک مولکولی  
آب  
نانولوله کربنی

**چکیده:** نانوسیالات به عنوان گروه‌های جدیدی از محیط‌های انتقال حرارت، با دارا بودن ویژگی‌های خاص و منحصر به فرد، توجه خاصی را به ویژه در دهه‌های اخیر به خود جلب کرده است. دانستن مشخصه‌های نانوسیال اولین گام در مطالعه نانوسیال به شمار می‌رود که در توصیف رفتار آن بسیار اهمیت دارد. اگرچه تاکنون تلاش‌های بسیاری برای مدل‌سازی خواص ترمودینامیکی نانوسیالات صورت گرفته است، اما هنوز مدلی جامع برای پیش‌بینی این خواص ارائه نشده است. در بررسی حاضر، ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال آب- نانولوله کربنی ساده تک جداره به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تعادلی انجام شده است. همچنین تأثیر پارامترهای کسر حجمی، دما و قطر نانولوله کربنی بر روی ویسکوزیته به عنوان یکی از مهم‌ترین خواص ترموفیزیکی نانوسیال بررسی شده است. محدوده کسر حجمی  $0.125\%$  تا  $0.734\%$  ( $0.125\%$ ،  $0.25\%$ ،  $0.5\%$  و  $0.734\%$ ) و محدوده دمایی  $25-65^\circ\text{C}$  با فاصله دمایی  $4^\circ\text{C}$  مورد مطالعه قرار گرفته است. پس از شرح کامل اندرکنش بین اتم‌های سیال پایه و نانوذرات و آنالیز تابع همبستگی تنش، نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که حضور نانوذرات در سیال پایه و افزودن کسر حجمی آن، کاهش دما و همچنین کاهش اندازه و قطر نانولوله کربنی سبب افزایش ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال می‌شود که در انتها به تفسیر و جمع بندی نتایج پرداخته شده است.

### ۱- مقدمه

بر کاربردترین و در دسترس‌ترین ماده شیمی‌آبی در علم و صنعت آب است که از اهمیت بسیار بالایی برخوردار می‌باشد [۱]. از مهم‌ترین کاربردهای آب در صنعت می‌توان به موضوع انتقال حرارت اشاره کرد در حالی که که خواص ضعیف انتقال حرارت آب، استفاده از آن را به طور مستقیم محدود می‌کند. چوی [۲] برای اولین بار در اواسط دهه نود ایده به کارگیری دسته جدیدی از سیالات با عنوان نانوسیالات را به منظور بهبود روند انتقال حرارت ارائه داد که از افزودن کسر حجمی کوچکی (در محدوده  $1\%$  تا  $10\%$ ) از ذرات جامد فلزی، اکسیدی، کربیدی و یا نانولوله کربنی<sup>۱</sup> با ابعاد کمتر از  $100$  نانومتر در سیالات معمولی مانند آب، اتیلن گلیکول و روغن موتور به دست می‌آید [۳]. استفاده از نانولوله‌های کربنی نیز به دلیل خواص حرارتی فوق العاده آن‌ها به عنوان ذرات معلق در سیال پایه و تهیه نانوسیال کارآمد بسیار مورد توجه قرار گرفته است و به ویژه در دهه اخیر مطالعات بسیاری به روش‌های مختلف پیرامون بررسی خواص ترموفیزیکی نانوسیالات حاوی نانولوله کربنی انجام شده است [۴-۶].

نانوسیالات به دلیل دارا بودن پتانسیل‌های مناسب انتقال حرارت نسبت به سیالات معمولی، همچون ضریب رسانایی حرارتی بالاتر، افت فشار کمتر

و انتقال حرارت بهتر در بسیاری از کاربردهای خنک‌کاری و در مدیریت تجهیزات شارحرارتی بالا به کار می‌رود [۷]. محققان در بسیاری از مطالعات خود افزایش ضریب رسانایی حرارتی و ویسکوزیته دینامیکی نانوسیالات را نسبت به سیال پایه به روش‌های مختلف تجربی، تحلیلی و عددی اثبات کردند اما همچنان موفق به درک جامعی از رفتار دقیق نانوسیالات نشدند و نتوانستند مقدار خواص ترموفیزیکی نانوسیالات را به طور جامع پیش‌بینی کنند. آن‌ها در بررسی‌های خود تأثیر پارامترهای مختلفی همچون کسر حجمی، اندازه، شکل و جنس نانوذرات و دمای نانوسیال را بر خواص ترموفیزیکی نانوسیالات در نظر گرفته‌اند. پونموژه و همکاران [۸] خواص ترموفیزیکی نانوسیالات آبی حاوی نانولوله کربنی را به صورت تجربی بررسی کردند و نشان دادند که ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال با کاهش دما افزایش می‌یابد در حالی که اثر آن در نرخ برشی‌های بالاتر بسیار کمتر است. همچنین با افزایش کسر حجمی نانوذرات حتی در حضور مقدار بسیار کمی از نانوذرات، ویسکوزیته نانوسیال به شدت افزایش می‌یابد. هالفاصل و همکاران [۹] نیز در بررسی سیستم نانوسیال آبی حاوی نانولوله‌های کربنی چند جداره به نتایج مطالعه قبلی دست یافتند. آن‌ها با بررسی سیستم نانوسیال در محدوده دمایی  $30-40^\circ\text{C}$  با فاصله دمایی  $10^\circ\text{C}$  و کسر حجمی‌های بین  $0.055\%$  تا  $0.55\%$  بیان کردند که ویسکوزیته نانوسیال با افزایش نرخ برش کاهش می‌یابد و رفتار نانوسیال مشابه سیالات رقیق شونده با

1 Carbon Nano Tube (CNT)

نویسنده عهده‌دار مکاتبات: Fj\_jabbari@semnan.ac.ir

توسط محققان مختلف بررسی شده است اندازه نانوذرات می‌باشد. نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی لو و همکاران [۱۴] نشان داد که میزان ویسکوزیته نیز همچون ضریب رسانایی حرارتی با افزایش اندازه ذره کاهش می‌یابد. رودیاک و همکاران [۱۶ و ۱۷] نیز در بررسی‌های خود به نتایج مشابه با محققان قبلی دست یافتند. در مطالعه دیگری نیز که سیستم نانوسیال  $Al_2O_3$  در آب توسط لو و همکاران [۱۸] بررسی شده بود نتایج مشابه با نتایج لو [۱۴] گزارش شده است. در واقع این پدیده ناشی از افزایش انرژی واکنشی ذره-سیال پایه (است، زیرا وقتی نانوذرات کوچک‌تر می‌شوند تعداد مولکول‌های بیشتری از سیال پایه اطراف آن‌ها را در بر می‌گیرد در حالی که کسر حجمی نانوذرات در بازه زمان شبیه‌سازی ثابت است. در واقع با جمع کردن ترم‌های مربوط به واندروالس و کولمبیک بین نانوذره و مولکول‌های سیال پایه، می‌توان انرژی واکنش بین ذره و سیال پایه را به دست آورد. بنابراین برای سیستم با  $E_{int}$  بزرگتر مقدار نیروی بین سیال پایه و نانوذره نیز قوی‌تر شده و منجر به افزایش ویسکوزیته می‌شود.

در بررسی دیگری و کیلی‌نژاد و همکاران [۱۳] تغییرات ویسکوزیته اتانول احاطه شده در نانولوله کربنی تک جداره در سه دمای مختلف و تاثیر قطر نانولوله بر ساختار اتانول داخل آن را به روش شبیه‌سازی بررسی کردند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که مقدار ویسکوزیته سیال درون نانولوله از مقدار ویسکوزیته سیال پایه کمتر است. همچنین با بررسی انرژی جذب و تاثیر قطر بر تولید یک نانوسیمی از اتانول نشان دادند که در نانولوله‌هایی با قطر بزرگتر از  $0.81 \text{ nm}$  نانوسیمی از اتانول درون نانولوله شکل می‌گیرد.

همانطور که پیش از این اشاره شد، خواص و شرایط ویژه و متمایز آب و نانولوله کربنی ما را بر آن داشت تا ویسکوزیته نانوسیال آبی حاوی نانولوله کربنی ساده تک جداره را در محدوده کسر حجمی  $0.125$  تا  $0.734$  درصد ( $0.125$ ،  $0.25$ ،  $0.5$  و  $0.734$  درصد) و محدوده دمای  $25-65^\circ\text{C}$  با فاصله دمایی  $4^\circ\text{C}$  مورد بررسی قرار دهیم در حالی که در مطالعات پیشین ویسکوزیته این گروه از نانوسیالات مورد بحث واقع نشده بود [۶]. همچنین برای درک پدیده‌های فیزیکی حاکم بر نانوسیال در این بررسی از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شده است و تاثیر پارامترهایی مانند کسر حجمی و اندازه نانوذرات و دمای نانوسیال مورد بررسی قرار گرفته است که در ادامه نتایج حاصل از این شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تعادلی به تفصیل گزارش شده است.

## ۲- جزئیات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

### ۲-۱- روش محاسبه ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال

به طور کلی دو روش برای محاسبه ویسکوزیته در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی وجود دارد: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تعادلی<sup>۱</sup> و شبیه‌سازی

برش<sup>۲</sup> است. ایکسینگ و همکاران [۱۰] نیز نانوسیال آب- نانولوله کربنی تک جداره<sup>۲</sup> را به صورت تجربی در محدوده دمایی  $60-100^\circ\text{C}$  و محدوده کسر جرمی  $0.1\%$  تا  $1\%$  مورد بررسی قرار دادند. در بررسی‌های آن‌ها بیشترین میزان افزایش ویسکوزیته  $35/9\%$  اندازه‌گیری شد. همچنین آن‌ها نشان دادند که ویسکوزیته وابسته به دما نیست و در یک کسر حجمی ثابت و دماهای مختلف تقریباً مقدار ثابتی دارد. بسیاری از محققان دیگر همچون سید [۱۱]، سببها [۱۲] و دالکیلیک [۱۳] نیز نانوسیالات حاوی نانولوله کربنی را به صورت تجربی در محدوده‌های مختلف کسر حجمی و دما بررسی کردند که نتایج آن‌ها تأیید کننده نتایج محققان قبلی است.

اگرچه تمامی مطالعات ذکر شده در فوق به روش تجربی و آزمایشگاهی انجام شده و نتایج مفید و کارآمدی را ارائه کردند اما نمی‌توان امکانات و تکنولوژی‌های جدید همچون رایانه‌های محاسباتی و دستاوردهای آن‌ها را نادیده گرفت. استفاده از روش‌های محاسباتی همچون شبیه‌سازی رایانه‌ای می‌تواند تأثیر بسزایی در افزایش درک رفتار نانوسیالات و پدیده‌های فیزیکی که در سطح اتمی و مولکولی رخ می‌دهد داشته باشد. همچنین در بسیاری از موارد که امکان انجام تست‌های آزمایشگاهی وجود ندارد، می‌توان از شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای بهره گرفت. دینامیک مولکولی یکی از تکنیک‌های شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای است که معادلات حرکت نیوتن را برای تمامی ذرات سیستم حل می‌کند و مسیر حرکت اتم‌ها و مولکول‌ها را تعیین می‌نماید در حالی که نیروی بین ذرات و انرژی پتانسیل بین آن‌ها با اعمال پتانسیل بین اتمی و یا میدان نیروی مکانیک مولکولی تعیین می‌شود.

با ظهور روش‌های شبیه‌سازی رایانه‌ای و به خصوص دینامیک مولکولی، بسیاری از محققان بر آن شدند تا رفتار رئولوژیکی نانوسیالات را با این تکنیک و در سطح اتمی بررسی کنند. از این رو مطالعاتی در حوزه بررسی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ویسکوزیته نانوسیالات انجام و تاثیر پارامترهای مختلفی نظیر کسر حجمی، اندازه و تجمع نانوذرات و دمای نانوسیال بررسی شده است. لو و همکاران [۱۴] با بررسی سیستم نانوسیال در آب و اتیلن گلیکول به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان دادند که با افزودن نانوذرات و افزایش کسر حجمی، مقدار ویسکوزیته برشی نانوسیال افزایش می‌یابد، این در حالی است که با بررسی نانوسیالات مختلف توسط محققان نتایجی مشابه به دست آمده است. برای نمونه نانوسیال آب- طلا [۱۵]، آلومینیوم و لیتیم در آرگون مایع [۱۶ و ۱۷]. علاوه بر این لو و همکارانش [۱۸] دریافتند که تاثیر کسر حجمی نانوذرات در دماهای پایین‌تر، بیشتر قابل توجه است. مطالعاتی نیز که پیرامون تاثیر دمای نانوسیال بر ویسکوزیته دینامیکی آن انجام شده است نشان می‌دهد که ویسکوزیته با افزایش دما کاهش می‌یابد، چراکه با بالا رفتن دما، پیوند بین نانوذرات و سیال پایه ضعیف‌تر شده و منجر به کاهش ویسکوزیته در دماهای بالاتر می‌شوند.

یکی دیگر از پارامترهای مؤثر بر ویسکوزیته دینامیکی نانوسیالات که

1 Shear-thinning

2 Single-Walled Carbon Nano Tube (SWCNT)

جدول ۱: طول نانولوله کربنی تک جداره و تعداد اتم‌های آن در کسر حجمی‌های مختلف نانوذرات.

Table 1. The length of the SWCNTs and the number of their atoms in different volume fractions of nanoparticles.

تعداد اتم‌های SW-CNT	طول SWCNT (nm)	کسر حجمی نانوسیال (%)
۴۸	۰/۲۲۰۴۷	۰/۱۲۵
۹۶	۰/۴۴۲	۰/۲۵
۱۴۴	۰/۸۸۳	۰/۵
۱۹۲	۱/۳	۰/۷۳۴

جدول ۲: مشخصات سیستم نانوسیال مدل‌سازی شده با کسر حجمی ثابت ۰/۷۳۴ درصد و طول ۲/۵ nm.

Table 2. The characteristics of modeling nanofluid system with nanoparticle concentration of 0.734% and the length of the SWCNTs of 2.5nm.

تعداد اتم‌های جعبه شبیه‌سازی آب خالص	بعد جعبه شبیه‌سازی آب خالص (nm)	تعداد اتم‌های SWCNT	قطر SWCNT (nm)
۳۱۲۰۰	۶/۸۸۹۷	۳۳۶	۱/۱۱۰۱
۴۰۸۴۵	۷/۵۳۱۳	۳۸۴	۱/۲۶۸۷
۵۱۷۹۵	۸/۱۴۶۵	۴۳۲	۱/۴۲۷۳
۶۴۰۰۸	۸/۷۳۹۴	۴۸۰	۱/۵۸۵۹

شکل ۱ نیز نشان دهنده پیکربندی اولیه سیستم در کسر حجمی ۰/۵٪ می‌باشد.

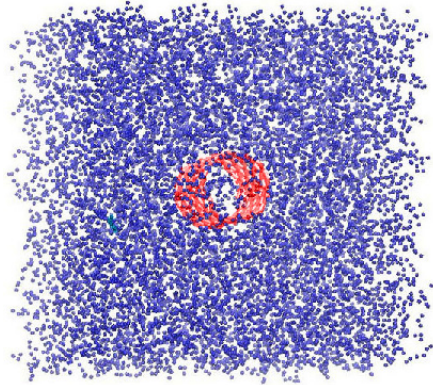


Fig. 1. Nanofluid molecular dynamic model: CNT nanoparticle (red-colored) and surrounding water (blue-colored).

شکل ۱: مدل دینامیک مولکولی نانوسیال: نانولوله کربنی تک جداره (قرمز رنگ) و آبهای اطراف (آبی رنگ)

کلیه شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی انجام شده در این مطالعه توسط کد شبیه‌سازی لمپس<sup>۲</sup> انجام و شرط مرزی تناوبی در هر سه جهت محاسباتی اعمال شده است. برای رسیدن سیستم به حالت تعادل در ابتدا آنسامبل

دینامیک مولکولی غیرتعادلی<sup>۱</sup> با توجه به ویژگی‌ها و مزایای روش تعادلی نسبت به روش غیرتعادلی [۱۸] در مطالعه حاضر از روش اول و فرمول گرین کوبو [۱۹ و ۲۰] استفاده شده است که مربوط به میانگین آنسامبلی تابع خودهمبستگی تنش می‌باشد و از تئوری پاسخ خطی و قضیه پراکندگی نوسانات به دست می‌آید. بر اساس رابطه گرین-کوبو، ویسکوزیته دینامیکی را می‌توان از رابطه (۱) به دست آورد [۲۱].

$$\mu = \frac{V}{k_B T} \int_0^{\infty} \tau_{xy}(t) \tau_{xy}(0) dt \quad (1)$$

که در آن  $\mu$ ،  $V$ ،  $k_B$ ،  $T$  و  $\tau_{xy}$  به ترتیب ویسکوزیته دینامیکی، حجم سیستم، ثابت بولتزمن، دما و المانی از تانسور تنش است که می‌توان تانسور تنش را نیز بر اساس رابطه (۲) محاسبه کرد [۲۲].

$$\tau_{xy} = \frac{1}{V} \left[ \sum_j m_j v_{jx} v_{jy} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} r_{ijx} f_{ijy} \right] \quad (2)$$

که در رابطه فوق،  $m_j$  جرم و  $v_j$  سرعت اتم  $j$ ،  $r_{ij}$  فاصله بین اتم  $i$  و اتم  $j$  و  $f_{ij}$  نشان دهنده نیروی عمل کننده بر اتم  $i$  یا مولکول توسط ذرات همسایه است که از تابع پتانسیل واکنش تبعیت می‌کند.

## ۲-۲- سیستم‌های شبیه‌سازی

در مطالعه حاضر، آب مایع به عنوان سیال پایه در یک جعبه شبیه‌سازی با سلول مکعبی به ابعاد طولی  $50 \text{ \AA}$  در نظر گرفته شده است که شامل  $12240$  اتم می‌باشد و یک نانولوله کربنی تک جداره به عنوان نانوذره در مرکز آن قرار داده شده است. نانولوله کربنی تک جداره استفاده شده در این بررسی از نوع زیگزاگ و با بردار کایرال  $(0,12)$  و قطر  $9/51 \text{ \AA}$  می‌باشد. برای بررسی تأثیر کسر حجمی نانوذرات و دمای نانوسیال، ابتدا ضروری است که سیستم مورد نظر در کسر حجمی‌های مختلف مدل‌سازی شود. بدین منظور جهت تهیه سیستم نانوسیال در کسر حجمی‌های مختلف، طول نانولوله کربنی با قطر ثابت  $9/51 \text{ \AA}$  در جعبه شبیه‌سازی آب با ابعاد طولی ثابت  $50 \text{ \AA}$  تغییر داده می‌شود. طول و تعداد اتم‌های نانولوله کربنی تک جداره در کسر حجمی‌های مختلف در جدول ۱ ذکر شده است.

اما به منظور بررسی تأثیر قطر نانولوله کربنی ساده بر مقدار ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال، ابتدا می‌بایست هر یک از سیستم‌های نانوسیال با قطرهای مختلف، کسر حجمی و طول نانولوله کربنی ثابت را شبیه‌سازی کرد. بدین منظور در این بررسی مقدار کسر حجمی ثابت  $0/734\%$  و طول نانولوله کربنی ثابت  $2/5 \text{ nm}$  در نظر گرفته شده است تا با تغییر قطر نانولوله و ابعاد جعبه شبیه‌سازی سیال پایه بتوان مقدار ویسکوزیته در قطرهای مختلف را شبیه‌سازی کرد. جدول ۲ قطر و تعداد اتم‌های نانولوله کربنی و اندازه جعبه شبیه‌سازی آب خالص در حالت‌های مختلف را نشان می‌دهد.

2 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)

1 Non-Equilibrium Molecular Dynamics (NEMD)

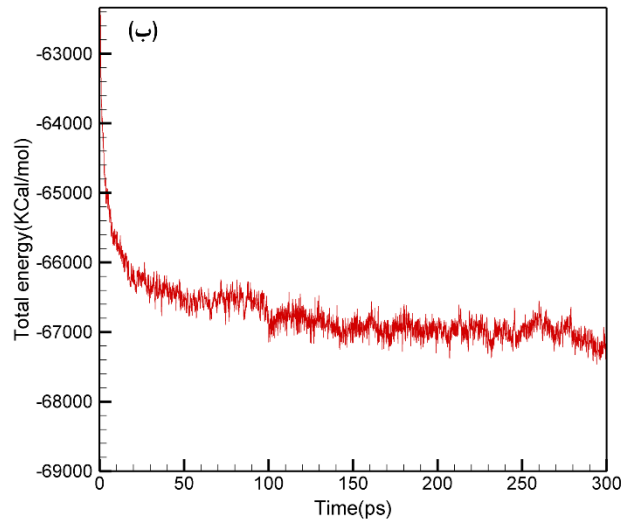
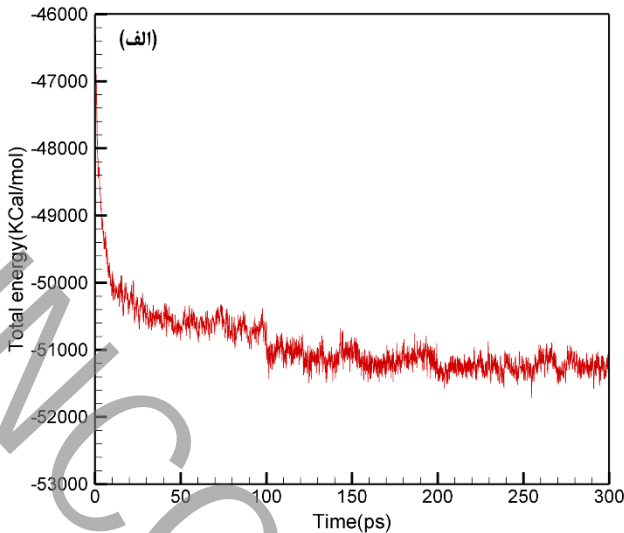


Fig.3. Fluctuation of the system total energy at  $T=25^{\circ}\text{C}$  and a.  $\phi=0.125\%$ , b.  $\phi=0.5\%$ .

شکل ۳: افت و خیزهای انرژی کل سیستم در دمای کنترل شده  $25^{\circ}\text{C}$  ( $298/15\text{ K}$ ) و کسر حجمی الف)  $0.125\%$  و ب)  $0.5\%$

نانوذرات و افزایش کسر حجمی، انرژی کل سیستم افزایش می‌یابد. بنابراین سیستم شبیه‌سازی بعد از حدود  $300\text{ ps}$  به تعادل دمایی می‌رسد و از آن پس معادلات حرکت نیوتن به روش الگوریتم ورله سرعتی<sup>۴</sup> با گام زمانی  $fs$  و در بازه زمانی  $4\text{ ns}$  برای محاسبه ویسکوزیته دینامیکی به روش گرین کوپو حل می‌شود.

در شبیه‌سازی حاضر واکنش بین اتم‌های آب از مدل TIP4P/2005 [25]، واکنش بین اتم‌های کربن در نانولوله کربنی از پتانسیل ترسوف و واکنش بین آب و نانولوله کربنی از پتانسیل لنارد جونز تبعیت می‌کند که در ادامه به تفصیل توضیح داده خواهد شد.

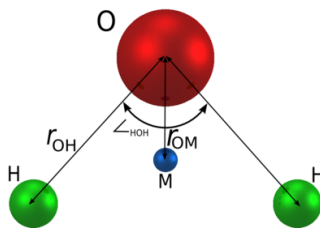


Fig.4. Schematic of a water molecule in TIP4P/2005 model.

شکل ۴: ساختار هندسی مولکول آب مدل TIP4P/2005

۲-۱- شبیه‌سازی آب مایع با مدل TIP4P/2005 در مطالعه حاضر، واکنش بین اتم‌های سیال پایه آب از مدل<sup>۵</sup> TIP4P/2005 تبعیت می‌کنند که ویژگی‌های ساختاری و پارامترهای استفاده شده در این مدل به طور کامل در جدول ۳ ذکر شده است [25]. شکل ۴ نیز ساختار هندسی مولکول آب با مدل TIP4P/2005 را نشان می‌دهد.

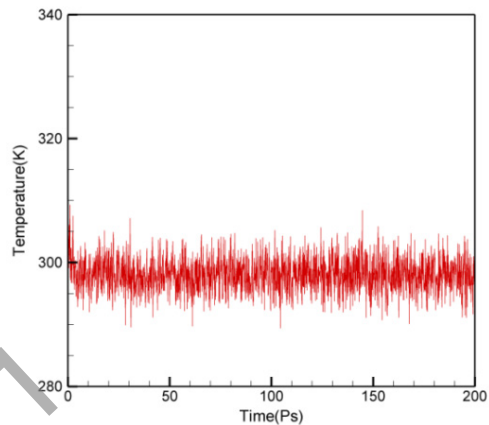


Fig. 2. Fluctuation of the system temperature for a specific case ( $\phi=0.125\%$ ,  $T=25^{\circ}\text{C}$ ).

شکل ۲: افت و خیزهای دمای سیستم در کسر حجمی  $0.125\%$  و دمای کنترل شده  $25^{\circ}\text{C}$  ( $298/15\text{ K}$ )

هنگرد کانونی کوچک<sup>۱</sup> با ترموستات لانگوین در بازه زمانی  $100\text{ ps}$  اول بر روی سیستم اعمال می‌شود. پس از آن انسامبل هم‌دما-هم‌فشار<sup>۲</sup> با ترموستات و فشارسنج نوز هوور به مدت  $100\text{ ps}$  روی سیستم اعمال می‌شود [23 و 24] و در نهایت سیستم نانوسیال تحت انسامبل هنگرد کانونی<sup>۳</sup> به مدت  $100\text{ ps}$  قرار می‌گیرد تا سیستم به حالت تعادل برسد. از آنجایی که در طول فرآیند تعادل‌سازی، دما به وسیله ترموستات کنترل می‌شود دما و انرژی کل سیستم حول مقدار متوسط آن نوسان می‌کند. شکل ۲ و ۳-الف افت و خیزهای دما و انرژی کل سیستم در یک مورد خاص کسر حجمی  $0.125\%$  و دمای کنترل شده  $25^{\circ}\text{C}$  و شکل ۳-ب در کسر حجمی  $0.5\%$  را نشان می‌دهد. از مقایسه دو شکل ۳-الف و ۳-ب می‌توان دریافت که با افزودن

- 1 NVE
- 2 NPT
- 3 NVT

- 4 Velocity Verlet algorithm
- 5 Transferable Intermolecular Potential 4-Points



$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & : r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos\left(\pi \frac{r_{ij} - R_{ij}}{S_{ij} - R_{ij}}\right) & : R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0 & : r_{ij} > S_{ij} \end{cases} \quad (7)$$

$\gamma_{ij}$  نشان‌دهنده نوعی وابستگی است که می‌تواند بسته به محیط موضعی، نیروی جاذبه‌ای را نسبت به نیروی دافعه‌ای، تقویت یا تضعیف کند، به گونه‌ای که:

$$\gamma_{ij} = \chi_{ij} \left(1 + \beta_i^{n_i} \xi_{ij}^{n_i}\right)^{-1/2n_i} \quad (8)$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k=i,j} f_C(r_{ik}) w_{ik} g(\theta_{ijk}) \quad (9)$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c_i^2}{d_i^2} - \frac{c_i^2}{d_i^2 + (h_i - \cos \theta_{ijk})^2} \quad (10)$$

که جمله  $\zeta_{ij}$  عدد کتوردیناسیون مؤثر اتم  $i$  (یعنی تعداد نزدیک‌ترین همسایه‌ها، با در نظر گرفتن فاصله نسبی دو همسایه  $j$  و  $k$ ،  $r_{ij} - r_{ik}$  و زاویه پیوندی  $\theta_{ijk}$  بین آن‌ها نسبت به اتم مرکزی  $i$ ) است. تابع  $g(\theta)$  به ازای  $h_i = \cos(\theta_{ijk})$  یک حداقل دارد، پارامتر  $d_i$  تعیین کننده شدت وابستگی به زاویه است و  $c_i$  قدرت اثر زاویه‌ای را بیان می‌کند. قواعد ترکیب به صورت زیر است:

$$a_{ij} = (a_i + a_j) / 2, b_{ij} = (b_i + b_j) / 2 \quad (11)$$

$$A_{ij} = (A_i A_j)^{1/2}, B_{ij} = (B_i B_j)^{1/2}$$

$$R_{ij} = (R_i R_j)^{1/2}, S_{ij} = (S_i S_j)^{1/2} \quad (12)$$

برای دریافت اطلاعات جزئی‌تر از پتانسیل ترسوف می‌توان به مرجع [۳۱] مراجعه کرد.

۲-۲-۳- شبیه‌سازی واکنش آب-کربن به کمک تابع پتانسیل لنارد جونز از آنجایی که اتم‌های کربن در نانولوله کربنی بدون بار بوده و پیوند بین اتم‌های آب و اتم‌های کربن از نوع واندروالس می‌باشد، از این رو تابع پتانسیل لنارد جونز برای توصیف برهمکنش بین آن‌ها استفاده می‌شود که پیش از این نیز در بسیاری از مطالعات از آن استفاده شده است و از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$V_{ij}(r) = 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (13)$$

در این رابطه  $\epsilon$  عمق چاه پتانسیل است که حداقل آن در  $r_m = \frac{1}{2} \sigma$  واقع شده و  $\sigma$  مقدار  $r$  در  $U(r) = 0$  است [۳۲]. پارامترهای لنارد جونز برای مدل کردن واکنش بین آب-کربن نیز از قانون ترکیب لورنز-برتلوت تبعیت می‌کند.

جدول ۳: ویژگی‌های ساختاری و پارامترهای استفاده شده در مدل ۲۰۰۵/TIP4P [۲۵]

Table 3. The used parameters of TIP4P/2005 model of water in this study [25].

پارامتر	مقدار
جرم اتمی اکسیژن ( $O_{mass}$ )	۹۹۹۴/۱۵ (g/mol)
جرم اتمی هیدروژن ( $H_{mass}$ )	1.008(g/mol)
بار اکسیژن ( $q(O)$ )	-1.1128(e)
بار هیدروژن ( $q(H)$ )	0.5564(e)
باند OH ( $r_{OH}$ )	0.9572(Å)
زاویه HOH ( $\widehat{HOH}$ )	104.52(deg)
فاصله OM ( $r_{OM}$ )	0.1546(Å)
پارامتر انرژی لنارد جونز O-O ( $\epsilon_{o-o}$ )	0.1852(kcal/mol)
پارامتر طولی لنارد جونز O-O ( $\sigma_{o-o}$ )	3.1589(Å)
شعاع قطع کولمبیک ( $r_c$ )	8.5(Å)

۲-۲-۲- شبیه‌سازی نانولوله کربنی تک جداره به کمک پتانسیل ترسوف برای انتخاب تابع پتانسیل مناسب بین اتم‌های کربن چندین همچون پتانسیل ترسوف [۲۶]، پتانسیل برنر [۲۷]، پتانسیل برنر اصلاح شده [۲۸] وجود دارد. بر اساس مطالعات انجام شده پیرامون پتانسیل‌های مختلف، ویژگی‌ها و نتایج به دست آمده از هر یک از آن‌ها، نشان داده شده است که پتانسیل ترسوف می‌تواند به خوبی واکنش بین اتم‌های کربن در نانولوله کربنی را مدل کند [۲۹ و ۳۰]. بنابراین در این بررسی نیز واکنش بین اتم‌های کربن به کمک تابع پتانسیل ترسوف مدل شده است که از روابط زیر محاسبه می‌شود.

$$E_{tersoff} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \quad (3)$$

$$V_{ij} = f_C(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) - \gamma_{ij} f_A(r_{ij})] \quad (4)$$

که  $f_A$  و  $f_R$  به ترتیب پتانسیل جفتی دافعه‌ای و جاذبه‌ای هستند:

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-a_{ij} r_{ij}) \quad (5)$$

$$f_A(r_{ij}) = B_{ij} \exp(-b_{ij} r_{ij}) \quad (6)$$

که  $f_C$  یک تابع قطع هموار است که پارامترهای  $R$  و  $S$  آن به گونه‌ای انتخاب می‌شود تا لایه همسایه‌های اول در نظر گرفته شود:

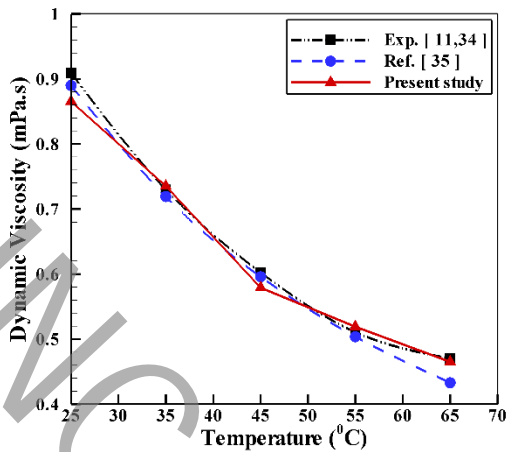


Fig.5. Comparison between the MD simulation results and experimental [11, 34] and other Ref. [35]

شکل ۵ مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی حاضر، تجربی [۱۱ و ۳۴] و مراجع دیگر [۳۵]

همبستگی تنش برشی<sup>۲</sup> مربوطه به دست می‌آید. شکل ۶- الف و ۶- ب همگرایی تابع خود همبستگی تنش برشی به سمت صفر در بازه زمانی شبیه‌سازی به ترتیب برای سیال پایه و نانوسیال در کسر حجمی ۰/۵ درصد و دمای ۲۵ °C را نشان می‌دهد. چراکه برای داشتن داده‌های همگرا، باید تابع خود همبستگی تنش برشی به صفر همگرا شود. همچنین می‌توان دریافت که تابع خود همبستگی تنش برشی در سیال پایه آب خالص بدون هیچ نوسانی و به صورت یکنواخت در بازه زمانی حدوداً ۲ ps و در نانوسیال همراه با رفتار نوسانی و در بازه زمانی حدوداً ۶ ps به صفر همگرا می‌شود.

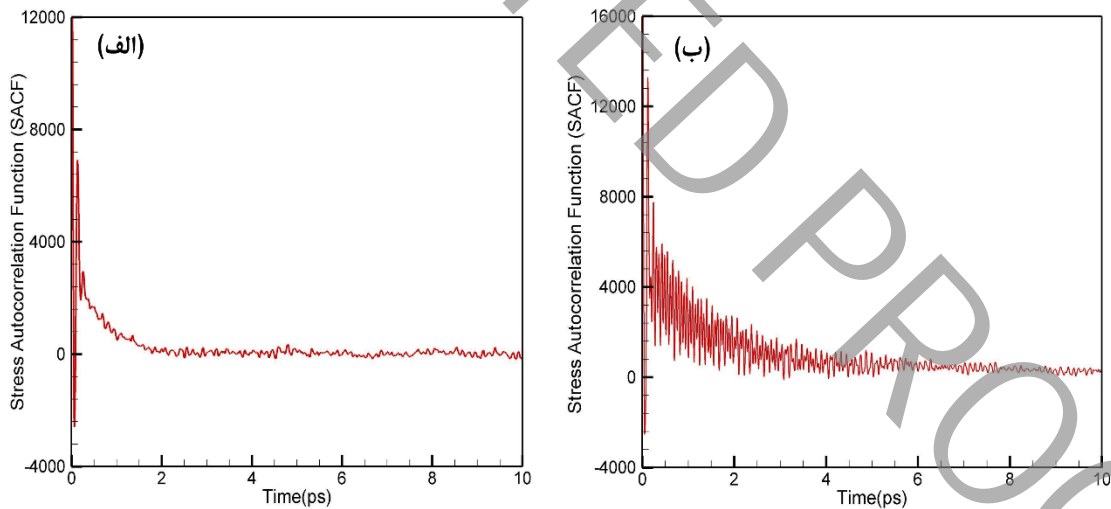


Fig. 6. Convergence of the shear stress autocorrelation function (SACF) over time for the simulation systems of a. base fluid, b. nanofluid

شکل ۶: همگرایی تابع خود همبستگی تنش برشی در بازه زمانی شبیه‌سازی الف. سیال پایه ب. نانوسیال

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_{ii} \varepsilon_{jj}} \quad (14)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_{ii} + \sigma_{jj}) \quad (15)$$

در حالی که ضرایب پتانسیل لنارد جونز برای اتم اکسیژن در جدول ۳ ذکر شده است و ضرایب اتم‌های کربن از میدان نیروی چارم<sup>۱</sup> برابر است با  $\varepsilon_{c-c} = 0.07 \text{ kcal/mol}$ ،  $s_{c-c} = 3/55.053 \text{ \AA}$ . علاوه بر این در شبیه‌سازی حاضر از الگوریتم مش ذره‌ای<sup>۲</sup> به منظور محاسبه واکنش کولمبیک برد-بلند استفاده شده است [۳۳].

### ۳- نتایج

پیش از محاسبه ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال، ضروری است که صحت روش محاسباتی شامل مدل شبیه‌سازی، کد کامپیوتری و پتانسیل‌های به کار رفته بررسی شود. بنابراین ابتدا نتایج شبیه‌سازی آب خالص در محدوده دمایی ۲۵°C-۶۵°C با فاصله دمایی ۱۰°C و فشار اتمسفر با نتایج تجربی محققان دیگر [۱۱ و ۳۴] و مراجع [۳۵] مقایسه و در شکل ۵ نمایش داده شده است. شکل ۵ نشان می‌دهد که نتایج دینامیک مولکولی حاصل از این بررسی و نتایج تجربی تطابق منطقی خوبی با یکدیگر دارند. بنابراین تطابق نتایج شبیه‌سازی و تجربی، صحت شبیه‌سازی دینامیک مولکولی حاضر را تأیید می‌کند و می‌تواند برای بررسی سیستم نانوسیال نیز به کار رود.

بر اساس معادله (۱) برای محاسبه ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال با فرمول گرین کوبو ابتدا باید سطح زیر منحنی تابع خود همبستگی تنش برشی را بررسی کرد. چراکه ویسکوزیته با انتگرال‌گیری زمانی از تابع خود

3 Shear stress Auto Correlation Function (SACF)

1 Chemistry at Harvard Macromolecular Mechanics (CHARMM)  
2 Particle-Particle Particle-Mesh (PPPM)

می‌دهد. نتایج این بررسی حاکی از آن است که در یک دمای ثابت، با افزایش کسر حجمی نانوذرات ویسکوزیته دینامیکی نیز زیاد می‌شود که می‌توان علت آن را اینگونه بیان کرد که با افزایش تعداد نانوذرات، اتم‌های بیشتری از سیال پایه تحت تأثیر نانوذرات قرار می‌گیرند و نیروهای واندروالسی بیشتری بین ذرات به وجود می‌آید که مانع انتقال گرما بین لایه‌ها و در نتیجه افزایش ویسکوزیته دینامیکی می‌شود. همچنین می‌توان دریافت که با کاهش دما فاصله بین نمودارها بیشتر شده و در حقیقت نسبت افزایش ویسکوزیته دینامیکی بیشتر می‌شود که برای درک بهتری از این موضوع می‌توان به روند تغییرات در شکل ۸ دقت کرد.

شکل ۸ میزان افزایش نسبی ویسکوزیته دینامیکی در دماهای مختلف را نشان می‌دهد. بنابر نتایج نشان داده شده می‌توان دریافت که نانوسیال آبی حاوی نانولوله کربنی ساده تک جداره در دمای  $25^{\circ}\text{C}$  و کسر حجمی  $0.734\%$  بیشترین میزان افزایش ویسکوزیته نسبت به سیال پایه را دارد که مقدار آن  $3/635 \text{ mPa.s}$  بوده که افزایشی حدود  $320.08\%$  را دارد. همچنین در دماهای پایین‌تر ویسکوزیته افزایش بیشتری از خود نشان می‌دهد. برای نمونه میزان افزایش ویسکوزیته در کسر حجمی  $0.5\%$  در دمای  $45^{\circ}\text{C}$ ،  $211/744\%$  و در دمای  $25^{\circ}\text{C}$ ،  $312/568\%$  می‌باشد که برای درک بهتری از تأثیر دما بر ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال، تغییرات ویسکوزیته با افزایش دما و در کسر حجمی‌های مختلف نیز بررسی شده است.

۳-۲- تأثیر دما بر ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال آب- نانولوله کربنی تک جداره

شکل ۹ تغییرات ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال آب- نانولوله کربنی تک جداره در محدوده دمایی  $25$  تا  $65$  درجه سانتی گراد و در کسر حجمی‌های مختلف  $0.125\%$ ،  $0.25\%$ ،  $0.5\%$  و  $0.734\%$  را نشان می‌دهد. نتایج حاکی

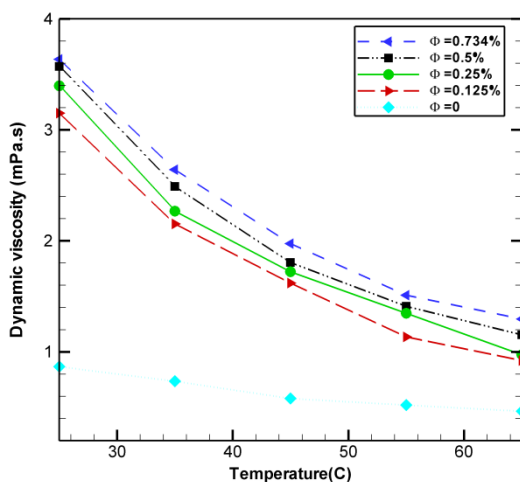


Fig. 9. Dynamic viscosity Variation of water-SWCNT nanofluid according to temperature and at different volume fraction of nanoparticles

شکل ۹: تغییرات ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال آب- نانولوله کربنی تک جداره بر حسب دما در کسر حجمی‌های مختلف نانوذرات

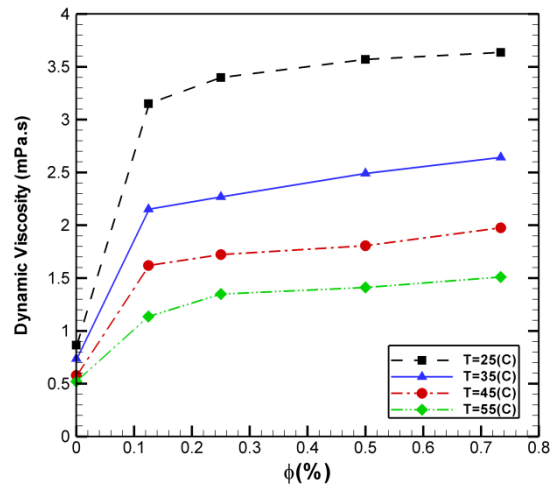


Fig.7. Dynamic viscosity Variation of water-SWCNT nanofluid according to volume fraction and at different temperature

شکل ۷: تغییرات ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال آب- نانولوله کربنی تک جداره بر حسب کسر حجمی و در دماهای مختلف

همچنین با افزودن و افزایش کسر حجمی نانوذرات می‌توان دریافت که در سیستم نانوسیال، افت و خیزهای تنش به آهستگی دمپ شده که منجر به انتگرال بزرگتری از تابع خودهمبستگی تنش و در نتیجه بالارفتن ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال می‌شود.

۳-۱- تأثیر کسر حجمی بر ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال آب- نانولوله کربنی تک جداره

شکل ۷ تغییرات ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال آبی شامل نانولوله کربنی ساده تک جداره در کسر حجمی‌های مختلف  $0.125\%$ ،  $0.25\%$ ،  $0.5\%$  و  $0.734\%$  و دماهای متفاوت  $25$ ،  $35$ ،  $45$  و  $55$  درجه سانتی گراد را نشان

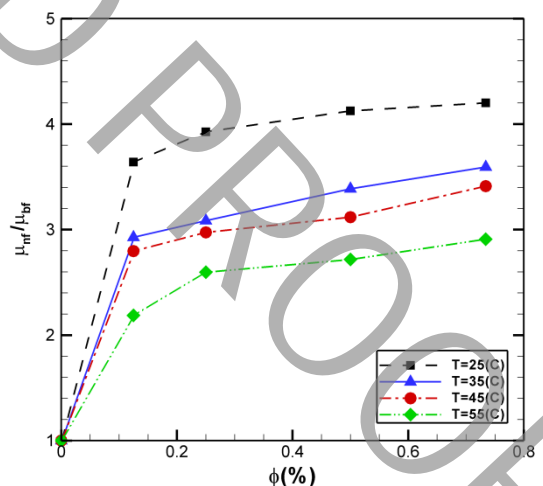


Fig. 8. Relative dynamic viscosity Variation of water-SWCNT nanofluid according to volume fraction and at different temperature

شکل ۸: تغییرات ویسکوزیته نسبی نانوسیال آب- نانولوله کربنی تک جداره بر حسب کسر حجمی و در دماهای مختلف

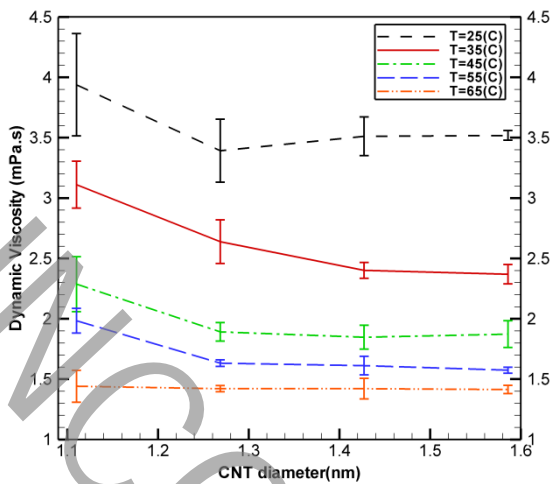


Fig. 11. Dynamic viscosity Variation of water-SWCNT nanofluid according to SWCNT diameter and at different temperature

شکل ۱۱: تغییرات ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال آب-نانولوله کربنی تک جداره بر حسب قطر نانولوله کربنی ساده تک جداره در دماهای مختلف

در حقیقت نسبت افزایش ویسکوزیته دینامیکی بیشتر می‌شود. برای نمونه میزان افزایش ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال نسبت به سیال پایه در همان دما برای قطر  $1.4273 \text{ nm}$  در دمای  $55 \text{ C}^\circ$ ،  $210/571\%$  و در دمای  $25 \text{ C}^\circ$ ،  $305/707\%$  می‌باشد که به روشنی بیانگر این موضوع است.

#### ۴- نتیجه گیری و جمع بندی

در مطالعه حاضر ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال آبی حاوی نانولوله کربنی تک جداره به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تعادلی و فرمول گرین کوبو مورد بررسی قرار گرفته است. در این بررسی کسرجمعی بین  $0/125\%$  تا  $0/734\%$  ( $0/125\%$ ،  $0/25\%$ ،  $0/5\%$  و  $0/734\%$ ) و رنج دمایی  $25$  تا  $65$  درجه سانتی‌گراد با فاصله دمایی  $10 \text{ C}^\circ$  مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین تأثیر پارامترهایی نظیر تغییرات کسرجمعی و اندازه نانوذرات و دمای نانوسیال بررسی شده است. در این شبیه‌سازی واکنش بین مولکول‌های آب از مدل TIP4P/2005، واکنش بین اتم‌های کربن در نانولوله کربنی از پتانسیل ترسوف و واکنش بین آب و نانولوله کربنی از پتانسیل لنارد جونز تبعیت می‌کند. پیش از انجام محاسبات ویسکوزیته، صحت الگوریتم شبیه‌سازی، از طریق مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی حاضر و مطالعات تجربی ویسکوزیته دینامیکی آب خالص در محدوده دمای  $25$  تا  $65$  درجه سانتی‌گراد و همچنین آنالیز همگرایی تابع خودهمبستگی تنش انجام شده است. تطابق منطقی بین نتایج به دست آمده و مطالعات تجربی پیش از این تأیید کننده صحت الگوریتم به کار رفته در این مطالعه است.

نتایج این شبیه‌سازی حاکی از آن است که در یک دمای ثابت، با افزایش کسرجمعی نانوذرات ویسکوزیته دینامیکی افزایش می‌یابد. همچنین می‌توان دریافت که با کاهش دما فاصله بین نمودارهای ویسکوزیته بر حسب

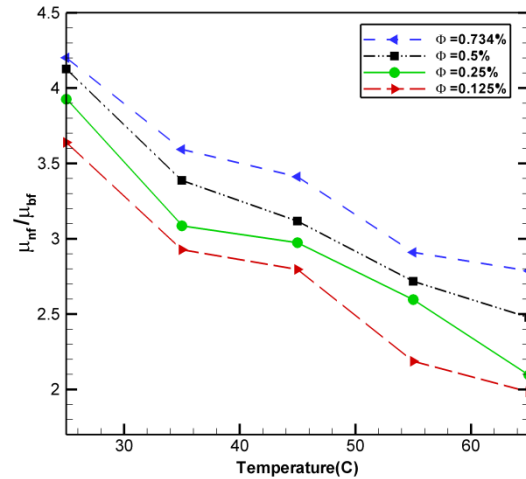


Fig. 10. Relative dynamic viscosity Variation of water-SWCNT nanofluid according to temperature and at different volume fraction of nanoparticles

شکل ۱۰: تغییرات ویسکوزیته نسبی نانوسیال آب-نانولوله کربنی تک جداره بر حسب دما در کسرجمعی‌های مختلف نانوذرات

از آن است که در یک کسرجمعی ثابت و مشخص با افزایش دما مقدار ویسکوزیته دینامیکی کم می‌شود زیرا با افزایش دما واکنش بین مولکولی و پیوند بین ذرات ضعیف‌تر و فاصله بین مولکول‌ها بیشتر شده که منجر به تأثیر کمتر مولکول‌ها بر یکدیگر و در نتیجه کاهش ویسکوزیته نانوسیال می‌شود.

شکل ۱۰ نیز تغییرات ویسکوزیته نانوسیال نسبت به سیال پایه بر حسب دما را نشان می‌دهد که نتایج بیانگر این موضوع است که در نانوسیال آب- نانولوله کربنی تک جداره در کسرجمعی‌های بالاتر، ویسکوزیته دینامیکی افزایش بیشتری نسبت به سیال پایه از خود نشان می‌دهد. برای نمونه میزان افزایش ویسکوزیته در دمای  $45 \text{ C}^\circ$  در کسرجمعی  $0/25\%$ ، حدوداً  $197/409\%$  و در کسرجمعی  $0/734\%$ ، حدوداً  $241/105\%$  می‌باشد که به روشنی بیانگر این موضوع می‌باشد.

#### ۳-۳- تأثیر قطر نانولوله کربنی تک جداره بر ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال آب- نانولوله کربنی تک جداره

شکل ۱۱ تغییرات ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال آب- نانولوله کربنی تک جداره در محدوده دمایی  $25$  تا  $65$  درجه سانتی‌گراد و در قطرهای مختلف  $1.1101 \text{ nm}$  تا  $1.5859 \text{ nm}$  و کسرجمعی ثابت  $0/734\%$  و طول نانولوله کربنی ثابت  $2/5 \text{ nm}$  را نشان می‌دهد. نتایج حاکی از آن است که در یک کسرجمعی نانوذرات و دمای ثابت و مشخص با افزایش قطر نانولوله کربنی مقدار ویسکوزیته دینامیکی کم می‌شود. علت این امر را اینگونه می‌توان بیان کرد که با بزرگتر شدن نانوذرات تعداد اتم‌های سیال پایه در تماس با نانوذره کمتر می‌شود که منجر به کاهش نیروی بین ذره و سیال پایه و نهایتاً کاهش ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال می‌شود. همچنین می‌توان مشاهده کرد که با کاهش دما فاصله بین نمودارها بیشتر شده و



- [4] K.Y. Leong, N.M. Fadhilhanafi, S.P. Chew, Viscosity Characteristic Of Carbon Nanotube Based Nanofluids At Room Temperature, *ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences*, 11(10) (2016) 6584-6588.
- [5] S.K. Kolase, V.N. Deshmukh, S. Radhakrishnan, Experimental Investigation of Heat Transfer Properties and Viscosity of CNT Based Nanofluid in Low Temperature Conditions, *International Engineering Research Journal (IERJ)*, Special Issue 2 (2015) 4718-4725.
- [6] G. Vakili-Nezhaad, M. Al-Wadhahi, A.M. Gujrathi, R. Al-Maamari, M. Mohammadi, Effect Of Temperature And Diameter Of Narrow Single-Walled Carbon Nanotubes On The Viscosity Of Nanofluid: A Molecular Dynamics Study, *Fluid Phase Equilibria* 434 (2017) 193-199.
- [7] M. Bahiraci, Particle Migration In Nanofluids: A Critical Review, *INT J THERM SCI*, 109 (2016) 90-113.
- [8] J. Ponmozhi, F.A.M.M. Gonçalves, A.G.M. Ferreira, I.M.A. Fonseca, S. Kanagaraj, N. Martins, M.S.A. Oliveira, Thermodynamic and Transport Properties of CNT- Water Based Nanofluids, *J NANO RES-SW*, 11 (2010) 101-106.
- [9] S. Halefadi, P. Estell, B. Aladag, N. Doner, T. Mar, Viscosity Of Carbon Nanotubes Water Based Nanofluids: Influence Of Concentration And Temperature, *INT J THERM SCI*, 71 (2013) 111-117.
- [10] M. Xing, J. Yu, R. Wang, Thermo-Physical Properties Of Water-Based Single-Walled Carbon Nanotube Nanofluid As Advanced Coolant, *APPL THERM ENG*, 87 (2015) 344-351.
- [11] Z. Said, Thermophysical And Optical Properties Of Swcnts Nanofluids, *INT COMMUN HEAT MASS*, 78 (2016) 207-213.
- [12] M.A. Sabiha, R.M. Mostafizur, R. Saidur, S. Mekhilef, Experimental Investigation On Thermo Physical Properties Of Single Walled Carbon Nanotube Nanofluids, *INT J HEAT MASS TRAN*, 93 (2016) 862-871.
- [13] A.S. Dalkilic, B.O. Küçükıldırım, A.A. Eker, A. Çebi, S. Tapan, C. Jumholkul, S. Wongwises, Experimental Investigation On The Viscosity Of Water-Cnt And Antifreeze-Cnt Nanofluids, *INT COMMUN HEAT MASS*, 80 (2017) 47-59.
- [14] W.-Q. Lu, Q.-M. Fan, Study For The Particle's Scale Effect On Some Thermophysical Properties Of Nanofluids By A Simplified Molecular Dynamics Method, *ENG ANAL BOUND ELEM*, 32(4) (2008) 282-289.
- [15] G. Lu, Y.-Y. Duan, X.-D. Wang, Surface Tension, Viscosity, And Rheology Of Water-Based Nanofluids: A

کسر حجمی بیشتر شده که حاکی از افزایش ویسکوزیته نسبی در دماهای پایین تر است. علاوه بر این با کاهش قطر نانولوله کربنی مقدار ویسکوزیته دینامیکی نانوسیال افزایش می یابد که روند این افزایش در دماهای پایین تر بیشتر است. نانوسیال آب- نانولوله کربنی ساده مورد مطالعه در این بررسی، در دمای  $25^{\circ}\text{C}$  و کسر حجمی  $0.7334\%$  بیشترین میزان افزایش ویسکوزیته نسبت به سیال پایه را دارد که مقدار آن  $3/635\text{ mPa}\cdot\text{s}$  بوده و افزایشی حدود  $320/08\%$  را دارد. همچنین می توان دریافت که ویسکوزیته نانوسیال در کسر حجمی های بالاتر، افزایش بیشتری نسبت به سیال پایه از خود نشان می دهد.

## فهرست علائم

نیروی عمل کننده بر اتم توسط ذرات همسایه	$f_{ij}$
ثابت بولتزمن (J / K)	$K_B$
جرم اتم $j$ (g / mol)	$m_j$
بار الکتریکی اتم (e)	$q$
فاصله بین اتم $i$ و اتم $j$ (آنگستروم)	$r_{ij}$
دمای مطلق سیستم (K)	$T$
زمان (s)	$t$
تابع پتانسیل بین اتم $i$ و اتم $j$	$V_{ij}$
پارامتر انرژی لnard جونز (kcal / mol)	$\epsilon$
ویسکوزیته دینامیکی	$\mu$
پارامتر طولی لnard جونز (آنگستروم)	$\sigma$
المان تنش در راستای xy	$\tau_{xy}$
کسر حجمی نانوذرات	$\phi$

## مراجع

- [1] J. Pátek, J. Hrubý, J. Klomfar, M. Součková, A.H. Harvey, Reference Correlations for Thermophysical Properties of Liquid Water at 0.1 MPa, *J. Phys. Chem.*, 38(1) (2009) 21-29.
- [2] S.U.S. Choi, J.A. Eastman, Enhancing Thermal Conductivity Of Fluids With Nanoparticles, in: *ASME International Mechanical Engineering Congress & Exposition*, San Francisco, CA, 1995.
- [3] A. Sergis, Y. Hardalupas, Molecular Dynamic Simulations of a Simplified Nanofluid, *CMST*, 20(4) (2014) 113-127.

- [26] J. Tersoff, Modeling Solid-State Chemistry: Interatomic Potentials For Multicomponent Systems, *PHYS REV B*, 39(8) (1989) 5566-5568.
- [27] D.W. Brenner, Empirical Potential For Hydrocarbons For Use In Simulating The Chemical Vapor Deposition Of Diamond Films, *PHYS REV B*, 42(15) (1990) 9458-9471.
- [28] D. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, A Second-Generation Reactive Empirical Bond Order (Rebo) Potential Energy Expression For Hydrocarbons, *J PHYS-CONDENS MAT*, 14 (2002) 783-802.
- [29] S. Berber, Y.-K. Kwon, D. Tománek, Unusually High Thermal Conductivity of Carbon Nanotubes, *PHYS REV LETT*, 84(20) (2000) 4613-4616.
- [30] Q. Zheng, G. Su, JianWang, H. Guo, Thermal Conductance For Single Wall Carbon Nanotubes, *EUR PHYS J B*, 25 (2002) 233-238.
- [31] س.ا. جلیلی، شبیه سازی های رایانه ای (دینامیک مولکولی و مونت کارلو)، انتشارات دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی، 1390.
- [32] P. Hirunsit, P.B. Balbuena, Effects of Confinement on Water Structure and Dynamics: A Molecular Simulation Study, *J. Phys. Chem. C*, 111 (2007) 1709-1715.
- [33] W.G. Hoover, Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions, *PHYS REV A*, 31(3) (1985) 1695-1697.
- [34] N. Ahammed, L.G. Asirvatham, S. Wongwises, Effect Of Volume Concentration And Temperature On Viscosity And Surface Tension Of Graphene-Water Nanofluid For Heat Transfer Applications, *J Therm Anal Calorim*, 123(2) (2015) 1399-1409.
- [35] The International Association for the Properties of Water and Steam, Release on the IAPWS Formulation 2008 for the Viscosity of Ordinary Water Substance, available at <http://www.viscopedia.com/viscosity-tables/substances/water/>.
- Microscopic Interpretation On The Molecular Level, *J Nanopart Res*, 16(2564) (2014) 1-11.
- [16] V.Y. Rudyak, S.L. Krasnolutskaa, Simulation of the Nanofluid Viscosity Coefficient by the Molecular Dynamics Method, *TECH PHYS+*, 60(6) (2015) 798-804.
- [17] V.Ya.Rudyak, S.L.Krasnolutskaa, Dependence Of The Viscosity Of Nanofluids On Nanoparticle Size And Material, *PHYS LETTA*, 378(26-27) (2014) 1845-1849.
- [18] Z. Lou, M. Yang, Molecular Dynamics Simulations On The Shear Viscosity Of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Nanofluids, *Computers & Fluids*, 117 (2015) 17-23.
- [19] P.J. Daivis, D.J. Evans, Comparison Of Constant Pressure And Constant Volume Nonequilibrium Simulations Of Sheared Model Decane, *J CHEM PHYS*, 100(1) (1994) 541-547.
- [20] M. Mondello, G.S. Grest, Viscosity Calculations Of N-Alkanes By Equilibrium Molecular Dynamics, *J CHEM PHYS*, 106(22) (1997) 9327-9336.
- [21] R. Kubo, Statistical-Mechanical Theory Of Irreversible Processes. I. General Theory And Simple Applications To Magnetic And Conduction Problems, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 12(6) (1957) 570-586.
- [22] F. Jabbari, A. Rajabpour, S. Saedodin, Thermal Conductivity And Viscosity Of Nanofluids: A Review Of Recent Molecular Dynamics Studies, *CHEM ENG SCI*, 174 (2017) 67-81.
- [23] S. Melchionna, G. Ciccotti, B.L. Holian, Hoover NPT Dynamics For Systems Varying In Shape And Size, *MOL PHYS*, 78(3) (1993) 533-544.
- [24] S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *J. Comp. Phys.*, 117 (1995) 1-19.
- [25] J.L.F. Abascal, C. Vega, A General Purpose Model For The Condensed Phases Of Water: Tip4p/2005, *J CHEM PHYS*, 123 (2005) 234505-234501-234505-234512.

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده کنید:

Please cite this article using:

F. Jabbari, A. Rajabpour, S. Saedodin, Investigation Dynamic Viscosity of Water-Single Wall Carbon Nanotube Nanofluid and Its Effective Factors by Molecular Dynamics Simulation, *Amirkabir J. Mech. Eng.*, 51(4) (2019) 1-10.

DOI:

