بسم الله الرحمن الرحيم

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست مطالب..... هشت
چکیده ۱
۱- فصل اول: مروری بر نانو سیال.....۲
۱-۱ مقدمه.....۲
۱-۲ تاریخچه نانوتکنولوژی.....۴
۱-۳ روش ساخت نانوذرات.....۵
۱-۴ تغییر در خواص مغناطیسی الکتریکی و شیمیایی.....۶
۱-۵ نانوسیالات.....۷
۱-۶ عوامل مؤثر بر ضریب هدایت حرارتی..... ۱۱
۱-۷ مکانیزم انتقال حرارت در نانو سیالات..... ۱۲
۱-۷-۱ طبیعت انتقال حرارت نانو ذرات.....۱۲
۱-۷-۲ حرکت براونی ذرات جامد.....۱۲
۱-۷-۳ تقابل مولکولی سیال و جامد.....۱۲
۱-۷-۴ اثر خوشه‌ای شدن نانوذرات.....۱۳
۱-۸ روش‌های اندازه گیری تئوری ضریب هدایت گرمایی..... ۱۴
۱-۹ خلاصه ای از کارهای انجام شده در زمینه نانوسیالات با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی..... ۱۶
۲-فصل دوم: مروری بر روش شبیه سازی دینامیک مولکولی.....۲۱
۲-۱ مقدمه..... ۲۱
۲-۲ تقابل‌های بین ذرهای..... ۲۲
۲-۳ انتخاب تابع پتانسیل..... ۲۳
۲-۴ روند حل مسأله به کمک دینامیک مولکولی ۲۴
۲-۴-۱ انتخاب پیکر بندی اولیه.....۲۵
۲-۴-۲ سرعت‌های اولیه.....۲۶
۲-۵ الگوریتم‌های انتگرال گیری زمانی..... ۲۷
۲-۵-۱ الگوریتم ورله.....۲۷
۲-۵-۲ الگوریتم سرعت ورله.....۲۸
۲-۵-۳ الگوریتم لیپ فراگ.....۲۸
۲-۵-۴ الگوریتم‌های پیش بینی کننده - تصحیح کننده عام.....۲۸
۲-۵-۵ الگوریتم‌های پیش بینی کننده - تصحیح کننده گیر.....۲۹
۲-۶ محاسبه خواص ماکروسکوپی..... ۳۰
۲-۷ دینامیک مولکولی در دما و فشار ثابت..... ۳۱
۲-۷-۱ ترموستات‌های متداول برای ثابت نگه داشتن دما.....۳۲
۲-۷-۲ دینامیک مولکولی در فشار ثابت.....۳۴

۲-۸ شرایط مرزی در شبیه سازی دینامیک مولکولی ۳۷
۲-۸-۱ نزدیک‌ترین تصویر..... ۳۸
۲-۸-۲ لیست همسایه..... ۳۸
۲-۹ انتخاب پارامترهای شبیه سازی..... ۳۹
۲-۱۰ نمونه برداری..... ۴۲
۲-۱۰-۱ چگالی..... ۴۳
۲-۱۰-۲ دما..... ۴۴
۲-۱۱ تابع پتانسیل EAM..... ۴۵
۳-فصل سوم : هندسه مسأله..... ٤٨
۳-۱ داده‌های مشترک بین هندسه‌های مختلف..... ۴۸
۳-۲ ضریب هدایت حرارتی آرگون با استفاده از روش گرین-کوبو در دمای ۸۶ و ۱۰۰ درجه کلوین..... ۵۰
۳-۳ تعیین ضریب هدایت حرارتی آرگون با استفاده از روش غیر تعادلی در دمای ۱۰۰ کلوین..... ۵۱
۳-۴ تعیین ضریب هدایت حرارتی نانو سیال با استفاده از روش غیر تعادلی در دمای ۱۰۰ کلوین..... ۵۱
۳-۵ هندسه سیال و نانو سیال در جریان کوئت و پوازی..... ۵۱
۳-۶ هندسه جریان برای بدست آوردن ظرفیت گرمایی ویژه آرگون..... ۵۲
٤-فصل چهارم : نتایج..... ۵۳
۴-۱ محاسبه ضریب هدایت آرگون با روش گرین-کوبو..... ۵۳
۴-۲ تعیین ضریب هدایت سیال آرگون با روش غیرتعادلی..... ۶۰
۴-۳ تعیین ضریب هدایت نانو سیال آرگون و مس با روش غیرتعادلی..... ۶۲
۴-۳-۱ نتایج با در نظر گرفتن پتانسیل EAM برای برهمکنش بین ذرات مس..... ۶۲
۴-۳-۲ نتایج با در نظر گرفتن پتانسیل لنارد جونز بین ذرات مس..... ۶۵
۴-۴ محاسبه انتقال حرارت سیال و نانو سیال در جریان پوازی..... ۶۹
۴-۵ بررسی جریان کوئت..... ۷۳
۴-۶ ظرفیت گرمایی ویژه آرگون..... ۷۷
۵-فصل پنجم : نتیجه گیری و پیشنهادات..... ۸۰
مراجع:..... ۸۱

فهرست شکل ها

شکل ۱-۱ : مقایسه ابعاد[۱] ۳
شکل ۱-۲ : برخی از نانوذرات بکار رفته در نانو سیال‌ها[۳] ۸
شکل ۱-۳ تغییرات ضریب هدایت نانو سیال آهن و مس با درصد حجمی[۳] ۱۱
شکل ۱-۴ : مقایسه‌ی نتایج تجربی ضریب هدایت موثر نانو سیالات مختلف[۳] ۱۱
شکل ۱-۵ : توزیع چگالی شعاعی نانو سیال در سه زمان ۱۳۰۰، ۱۶
شکل ۱-۶ : تغییرات ضریب هدایت بر حسب کسر حجمی[۱۱] ۱۷
شکل ۱-۷ : تغییرات ضریب هدایت بر حسب قطر ذرات[۱۱] ۱۷
شکل ۱-۸ : لایه گذاری سیال اطراف جامد[۱۲] ۱۸
شکل ۱-۹ : چرخش نانو ذره بعد از ۱۰۰ پیکوثانیه[۱۲] ۱۸
شکل ۱-۱۰ : ضریب هدایت نانو سیال بر حسب نرخ تنش برشی[۱۳] ۱۸
شکل ۱-۱۱: تغییر ضریب هدایت نانو سیال نسبت به عرض کانال[۱۴] ۱۹
شکل ۱-۱۲ : مدل اولیه ذرات آرگون و مس[۱۵] ۲۰
شکل ۲-۱ : تابع پتانسیل لنارد- جونز بر حسب فاصله جدایش به ازای $\sigma = \varepsilon = 1$ ۲۴
شکل ۲-۲ : شبکه FCC ۲۶
شکل ۲-۳ : صفحه‌ای با مساحت A عمود بر محور x ۳۴
شکل ۲-۴ : شرط مرزی پریودیک ۳۷
شکل ۲-۵ : نزدیک‌ترین تصویر ۳۸
شکل ۴-۱ : ضریب هدایت بر حسب مرتبه تکرار به ازای $M = ۵۰۰۰$ ۵۶
شکل ۴-۲ : ضریب هدایت بر حسب مرتبه تکرار به ازای $M= ۱۰۰۰۰$ ۵۶
شکل ۴-۳ : ضریب هدایت بر حسب مرتبه تکرار به ازای $M = ۱۵۰۰۰$ ۵۷
شکل ۴-۴ : ضریب هدایت بر حسب مرتبه تکرار به ازای $M= ۲۰۰۰۰$ ۵۷
شکل ۴-۵ : ضریب هدایت بر حسب مرتبه تکرار به ازای $M= ۲۵۰۰۰$ ۵۸
شکل ۴-۶ : ضریب هدایت بر حسب مرتبه تکرار به ازای $M = ۳۰۰۰۰$ ۵۸
شکل ۴-۷ : ضریب هدایت نهایی آرگون بر حسب M در دمای ۸۶ کلوین ۵۹
شکل ۴-۸ : ضریب هدایت نهایی آرگون بر حسب M در دمای ۱۰۰کلوین ۵۹
شکل ۴-۹ : اعمال ترموستات در هندسه شبیه سازی ۶۰
شکل ۴-۱۰ : توزیع دمای سیستم با ۲۸۸۰ اتم آرگون ۶۱
شکل ۴-۱۱ : توزیع دمای سیستم با ۷۶۸۰ اتم آرگون ۶۱
شکل ۴-۱۲ : توزیع دما برای نانو سیال ۱ درصد ۶۲
شکل ۴-۱۳ : توزیع دما برای نانو سیال ۲ درصد ۶۳
شکل ۴-۱۴ : توزیع دما برای نانو سیال ۳/۵ درصد ۶۳
شکل ۴-۱۵: توزیع دما برای نانو سیال ۵ درصد ۶۳

شکل ۴-۱۶: توزیع دما برای نانو سیال ۱ درصد ۶۵
شکل ۴-۱۷ : توزیع دما برای نانو سیال ۲ درصد..... ۶۵
شکل ۴-۱۸ : توزیع دما برای نانوسیال۳/۵ درصد ۶۶
شکل ۴-۱۹ : توزیع دما برای نانوسیال۵ درصد..... ۶۶
شکل ۴-۲۰: مقایسه نتایج ۶۸
شکل ۴-۲۱ : توزیع دما بین دو صفحه ۶۹
شکل ۴-۲۲ : توزیع سرعت جریان سیال ۷۰
شکل ۴-۲۳ : توزیع دمای جریان سیال..... ۷۲
شکل ۴-۲۴ : توزیع سرعت جریان نانوسیال ۷۱
شکل ۴-۲۵ : توزیع دما در جریان نانو سیال..... ۷۲
شکل ۴-۲۶ : توزیع سرعت جریان نانوسیال..... ۷۲
شکل ۴-۲۷: توزیع دما در جریان نانوسیال ۷۳
شکل ۴-۲۸ : توزیع سرعت در جریان کوئت ۷۴
شکل ۴-۲۹ : توزیع دما در جریان کوئت ۷۴
شکل ۴-۳۰ : توزیع سرعت نانوسیال در جریان کوئت..... ۷۵
شکل ۴-۳۱ : توزیع دما در جریان نانوسیال..... ۷۶
شکل ۴-۳۲ : توزیع دما در وسط و خروج ازکانال برای سیال آرگون ۷۷
شکل ۴-۳۳: توزیع دمای وسط و خروج ازکانال برای نانوسیال ۱ درصد ۷۸
شکل ۴-۳۴ : توزیع دمای وسط و خروج ازکانال برای نانوسیال ۲ درصد..... ۷۹

فهرست جداول

جدول ۱-۱ : مقادیر σ و ε ۱۹
جدول ۲-۱ : مقادیر α_i ها برای الگوریتم مرتبه پنجم گییر ۳۰
جدول ۲-۲: بی بعد سازی پارامترها ۴۰
جدول ۳-۱: ضرایب لنارد جونز بکار رفته در شبیه سازی ۴۹
جدول ۴-۱ : نتایج برای ۲۸۸۰ اتم آرگون ۶۲
جدول ۴-۲ : نتایج برای ۷۶۸۰ اتم آرگون ۶۲
جدول ۴-۳ : نتایج برای نانو سیال ۱ درصد ۶۴
جدول ۴-۴ : نتایج برای نانو سیال ۲ درصد ۶۴
جدول ۴-۵ : نتایج برای نانو سیال ۳/۵ درصد ۶۴
جدول ۴-۶ : نتایج برای نانو سیال ۵ درصد ۶۴
جدول ۴-۷ : نتایج برای نانو سیال ۱ درصد ۶۶
جدول ۴-۸ : نتایج برای نانو سیال ۲ درصد ۶۶
جدول ۴-۹ : نتایج برای نانو سیال ۳/۵ درصد ۶۷
جدول ۴-۱۰ : نتایج برای نانوسیال۵ درصد ۶۷
جدول ۴-۱۱ : نتایج برای سیال ساکن بین دو صفحه ۶۹

فهرست نماد ها

σ	مقیاس طولی
ε	عمق انرژی
Φ	تابع پتانسیل
τ	زمان آسایش
ρ	چگالی
λ	پویش آزاد مولکولی
r_c	شعاع قطع
m	جرم
K_B	ضریب استفان بولتزمن
K_n	عدد نودسن
r	فاصله
v	سرعت
a	شتاب
t	زمان
N	تعداد ذرات
T	دما

زیر نویس

f	سیال
nf	نانوسیال
p	ذرات جامد

بالانویس

*	کمیت بی بعد

چکیده

امروزه شبیه سازی‌های رایانه‌ای به عنوان ابزاری مناسب در کنار فعالیت‌های آزمایشگاهی کمک شایانی به فهم پدیده‌های فیزیکی می‌کند. به دلیل محدودیت‌های آزمایشگاهی در مقیاس میکرو و نانو، علم محاسباتی نانو به عنوان مکمل علوم آزمایشگاهی، محققان را در فهم پدیده‌های میکرو و نانو یاری می‌نماید. دینامیک مولکولی یکی از دقیق‌ترین شبیه سازی‌ها در مقیاس میکرو و نانو است که روز به روز استفاده از آن بیشتر می‌شود. محاسبه خواص انتقالی و انتقال حرارت از پرکاربرد ترین مباحث در مقیاس میکرو و نانو هستند که روز به روز بیشتر مورد توجه قرار می گیرند. با پیشرفت نانوتکنولوژی روز به روز استفاده از وسایل نانو افزایش می یابد و انتقال حرارت نقش بسزایی در طراحی و ساخت قطعات نانو دارد. در این تحقیق ابتدا ضریب هدایت حرارتی سیال ساکن آرگون با استفاده دو روش گرین-کوبو و روش غیرتعادلی بدست آورده می‌شود و نتایج با نتایج تجربی موجود صحت سنجی می‌شوند. سپس ضریب هدایت حرارتی نانوسیال آرگون و مس به ازای چهار درصد مختلف مس دو بار محاسبه می‌شود با این تفاوت که در بار اول برای برهمکنش بین ذرات مس از پتانسیل EAM و در بار دوم از پتانسیل لنارد جونز استفاده می‌شود. پس از آن انتقال حرارت در جریان پوازی و کوئت بررسی می‌شود. برای اینکه مطمئن شویم که انتقال حرارت به درستی محاسبه می‌شود ابتدا سیال ساکن آرگون را تحت شیب دمایی حل کردیم و با استفاده از انتقال حرارت محاسبه شده ضریب هدایت حرارتی آرگون را محاسبه کردیم که تطابق خوبی با نتایج تجربی بدست آمد. پس از آن در جریان پوازی انتقال حرارت سیال و نانوسیال به ازای نیروها و در صد های مختلف نانوسیال بررسی می‌شود. در جریان سیال و نانوسیال پوازی مشاهده شد که هرچه نیرو افزایش یابد انتقال حرارت افزایش می یابد همچنین مشاهده شد که هرچه درصد نانوسیال بیشتر شود انتقال حرارت افزایش می یابد. در جریان کوئت نیز انتقال حرارت در سیال و نانوسیال به ازای سرعت‌های متفاوت صفحه بالایی محاسبه شد. در جریان سیال و نانوسیال کوئت مشاهده شد که هرچه سرعت صفحه بالا افزایش یابد انتقال حرارت افزایش می یابد اما مشاهده شد که انتقال حرارت در جریان نانوسیال کمتر از جریان سیال است که به دلیل کاهش شیب سرعت در نزدیک دیواره ها است. در نهایت نیز انتقال حرارت در حالت ناپایا در جریان پوازی را محاسبه می‌کنیم. برای صحت کار خود ظرفیت گرمایی ویژه آرگون را محاسبه می‌کنیم و با نتایج تجربی صحت سنجی می‌کنیم. پس از آن ظرفیت گرمایی ویژه نانوسیال را نیز محاسبه می‌کنیم. کلیه شبیه سازی‌ها با نرم افزار LAMPPS انجام شده است البته برای محاسبه توزیع دما، سرعت و مکان و جرم ذرات را از نرم افزار خروجی می‌گیریم و با استفاده از برنامه نویسی با کد C++ توزیع دما را محاسبه می‌کنیم.

کلمات کلیدی : نانوسیال، نانوکانال، انتقال حرارت، ضریب هدایت حرارتی، شبیه سازی دینامیک مولکولی.

فصل اول
مروری بر نانوسیال‌ها

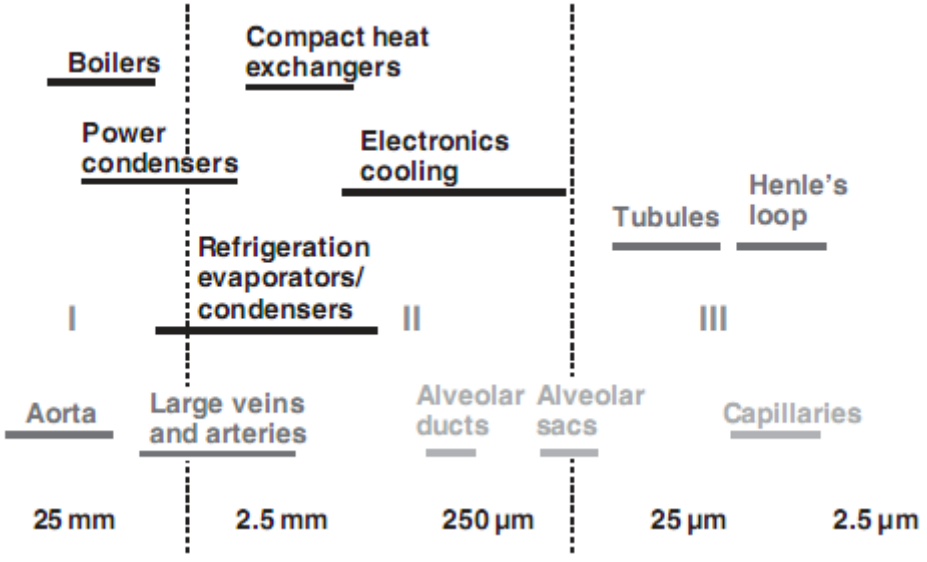
۱-۱ مقدمه

پیشوند نانو در اصل یک کلمه یونانی به معنی کوتوله و کوتاه است. این پیشوند در علوم معادل یک میلیاردم است، لذا یک نانومتر برابر یک میلیاردم متر می‌باشد. برای درک عینی این مفهوم بهتر است چند مثال ذکر شود، یک تار موی انسان به طور متوسط چیزی حدود ۵۰۰۰۰ نانومتر قطر دارد، یک سلول باکتری، قطری معادل چند صد نانومتر دارد. لازم به ذکر است که کوچک‌ترین اشیای قابل دید توسط چشم غیر مسلح، حدود ۱۰۰۰۰ نانومتر است. ابعاد مولکولی در حد ۱ نانومتر است و ۱۰ اتم هیدروژن فقط ۱ نانومتر عرض دارند. در شکل ۱-۱ شکل مقیاس‌های طولی آورده شده است. ساخت وسایل با دقت اتمی و یا مولکولی نانوتکنولوژی نامیده می‌شود.

در واقع قطعات با ابعاد کوچک‌تر از ۱۰۰ نانومتر می‌تواند محصول نانوتکنولوژی باشد. ۱ نانومتر برابر یک بیلیونیوم متر است و عموماً در حد ابعاد یک مولکول تعریف می‌گردد.

شاید این سوال به ذهن برسد که چه چیز در ابعاد نانو وجود دارد که موجب شده یک تکنولوژی بر پایه آن بنا نهاده شود. آنچه باعث ظهور نانوتکنولوژی شده نسبت سطح به حجم بالای نانو مواد است. این موضوع یکی از مهم‌ترین خصوصیات مواد تولید شده در مقیاس نانو است. در مقیاس نانو، اشیا شروع به تغییر رفتار می‌کنند و رفتار سطوح بر

رفتار توده‌ای(حجمی) غلبه می‌کند. در این مقیاس برخی روابط فیزیک کلاسیک نقض می‌شود، به عنوان مثال برای یک مدار الکترونیکی شامل سیم‌هایی با ضخامت نانومتری دیگر قانون اهم صادق نمی‌باشد، وقتی ضخامت سیم فقط به اندازه عبور یک یا چند الکترون باشد، الکترون‌ها لزوماً در صف و به ترتیب در سیم جا بجا می‌شوند، لذا در این سیم مقاومت الکتریکی به شدت کاهش یافته در حالی که ولتاژ و شدت جریان ثابت می‌باشد.



شکل ۱-۱ : مقایسه ابعاد[۱]

در حقیقت در این ابعاد قوانین فیزیک کوانتوم وارد صحنه می‌شوند و امکان کنترل خواص ذاتی ماده از جمله دمای ذوب، خواص مغناطیسی، ظرفیت بار و حتی رنگ مواد بدون تغییر در خواص شیمیایی ماده وجود خواهد داشت.

نانو در واقع بیانگر مرز بین مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی است، نانوتکنولوژی انقلابی در قابلیت‌های مواد و ماشین‌آلات ایجاد نموده است. ساخت نانو ماشین‌ها، قطعات نانوالکترونیکی و سایر وسایل نانو بسیاری از مشکلاتی را که بشر با آن‌ها مواجه است را حل نموده است. سنسورهای کیسه‌های هوایی اتومبیل، توزیع دارو در بدن، تکنولوژی هوافضایی، میکروراکتورها و... ازجمله کاربردهای نانوسیالات در صنعت امروزی می‌باشد، اگرچه که درک اصول اندازه‌های میکرو به این علت که با وسایل با این ابعاد در زندگی روزمره برخورد نداریم، مشکل است. بعضی از محققین گزارش نمودند که نیروهای متفاوتی بر ابعاد متفاوت حاکم است و آنالیز مقیاسی ابزار قابل قبولی برای تعیین اهمیت نیروهای عمل گر بر آن ابعاد می‌باشد. به عنوان مثال، در مقیاس کهکشان‌ها نیروی جاذبه بین دو ذره نیروی غالب است، درحالی‌که در حرکت اجسام بر روی زمین این نیرو ناچیز است. بر اساس آنالیز مقیاسی می‌توان نشان داد که در مقیاس میکرو نیروهای سطحی و اثر دیواره مهم‌تر از سایر نیروها می‌باشند.

در دهه اخیر برای افزایش راندمان مبدل‌های حرارتی، تحقیقاتی پیرامون معلق نمودن ذرات جامد در سیال عامل مبدل انجام گرفته است. مطالعات اخیر افزایش غیرعادی در راندمان حرارتی سیالات حاوی نانوذرات جامد

را گزارش نموده‌اند. نانوتکنولوژی مدرن، امکان تهیه نانوکریستال‌هایی با ابعاد ۵۰ نانومتر را به ما داده است، با این علم، نانو سیال ستاره جدیدی است که در آسمان انتقال حرارت درخشید.

افزایش میزان ضریب انتقال حرارت هدایتی برای نانوسیال بسیار بیشتر از سوسپانسیون با ذرات معلق میکرومتری است، زیرا با کاهش ابعاد تا حد نانومتر، سطح مفید انتقال حرارت بین سیال و فلز ۱۰۰۰ برابر بیش از سطح مفید انتقال حرارت بین سیال و ذرات فلزی در ابعاد میکرومتری است.

نکته قابل توجه اینکه علاوه بر افزایش چشم‌گیر ضریب انتقال حرارت هدایتی نانوسیال نسبت به سوسپانسیون با ذرات میکرومتری، میزان پایداری نانوسیال به مراتب بیش از سوسپانسیون میکرومتری است، زیرا در حالت نانومتری با افزایش سطح تماس بین سیال و ذرات جامد معلق نیروی کشش سطحی که عامل موثر در پایداری سوسپانسیون است، افزایش پیدا می‌کند. توجه شود که ضریب انتقال حرارت هدایتی نانوسیال به شدت به کسر حجمی نانو ذرات جامد معلق و خواص حرارتی نانو ذرات جامد معلق وابسته است.

۱-۲ تاریخچه نانوتکنولوژی

ریچارد فاینمن[1] برنده جایزه نوبل فیزیک ۱۹۶۵ و یکی از مشهورترین فیزیک‌دان‌های ده ۶۰ میلادی ملقب به پدر علم نانوتکنولوژی است. در سال ۱۹۵۹ در همایش جامعه فیزیک آمریکا در سخنرانی خود پیش‌بینی انقلابی بزرگ و جذاب را ارائه کرد که آغاز عصر نانو لقب گرفت. وی عنوان داشت که اصول علم فیزیک چیزی جز امکان ساختن اتم به اتم اشیا را بیان نمی‌کند. او خطوط حکاکی شده روی یک سطح را مجسم نمود که عرضی به اندازه چند اتم داشتند که این خطوط به وسیله تابش پرتوهای الکترونی به یک ماده تولید نمود. این پیشگویی‌ها اکنون به حقیقت پیوسته است، اساس تولید تراشه‌های سیلیکونی همان خطی به عرض چند اتم می‌باشد.

در دهه ۵۰ و ۶۰ میلادی فعالیت‌های زیادی روی ذرات فلزی صورت پذیرفت، البته در آن زمان نانوتکنولوژی هنوز بر این تحقیقات عنوان نیافته بود. تولید سیلیکون متخلخل در سال ۱۹۶۵ و یا تولید ذرات نانومتری فلزات قلیایی توسط تبخیر فلز سدیم و پتاسیم و چگالش سریع آن‌ها از این دسته تحقیقات بود.

سیالات مغناطیسی که در واقع نانو سیالاتی هستند که ذرات نانومتری مغناطیسی در آن معلق شده است در دهه ۶۰ توسعه یافتند.

---

[1]- R. Feynman

اخیراً در عملیات باستان‌شناسی کشف شده که برخی از سرامیک‌های لعاب‌دار دوره خلفای عباسی دارای طراحی بسیار پیچیده هستند که چندین رنگ و تلألو رنگین کمانی از آن‌ها ساطع می‌شود، این نوع کاشی‌ها در برخی از مساجد تونس به کار رفته است. وقتی نور سفید به این سرامیک‌ها می‌تابد، بسته به زاویه تابش نور رنگ لعاب عوض می‌شود، این اتفاق در بال برخی از پروانه‌ها و پشت لوح‌های فشرده رایانه نیز به کرات دیده می‌شود. این پدیده، حاصل چیدمان تناوبی نانو ذرات سرامیک است، هر طول موج وارده به سطح که بتواند قانون برگ را ارضا نماید، منعکس می‌گردد و لذا رنگ خاصی در زاویه خاص برخورد دیده می‌شود.

۱-۳ روش ساخت نانوذرات

مکعبی به ابعاد ۱×۱×۱ میلی‌متر از فلز طلا را در نظر بگیرید، مکعب مذکور را از هر ضلع به دو قسمت تقسیم می‌کنیم، هر قطعه جدید هنوز همان فلز دوست‌داشتنی طلا با همان رنگ زرد درخشان و همان خواص فیزیکی و شیمیایی طلا می‌باشد.

عمل دو نیم کردن را آن قدر تکرار می‌کنیم تا به ابعاد نانومتری(کوچک‌تر از ۱۰۰ نانومتر) برسیم در اینجاست که تقریباً همه چیز تغییر می‌کند، حتی رنگ آن هم عوض می‌شود! نانوذرات طلا بسته به اندازه خود می‌توانند نارنجی، ارغوانی، قرمز یا آبی متمایل به سبز به نظر برسند. در سرامیک‌های قدیمی از این پدیده استفاده شده که باعث چند رنگ شدن ظروف و کاشی‌های باستانی گردیده است.

این روش خورد کردن و تهیه نانوذرات جامد، روش ساخت بالا به پایین گفته می‌شود زیرا فرآیند ساخت از ساختار بزرگ شروع شده و به ساختار نانو ختم شده است. برعکس، اگر فرآیند ساخت از اتم‌ها شروع و به یک نانو ساختار ختم شود، روش ساخت پایین به بالا نامیده می‌گردد.

با توجه به تعریف روش تولید "پایین به بالا" با صراحت می‌توان گفت این روش صرفاً مختص ساخت نانو ذرات است، در حالی که روش بالا به پایین علاوه بر تولید نانوذرات برای تولید میکروذرات و ذرات بزرگ‌تر نیز قابل استفاده می‌باشد. روش‌های بسیاری برای تولید نانوذرات یا ذرات نانو ساختار توسعه یافته‌اند که شامل فرایندهای حالت بخار، مایع و جامد است. با توجه به تعریف نانوذرات، یکی از سوال‌های مهم در تولید مواد نانو این است که آرایش هندسی و پایداری اتم‌ها با تغییر اندازه ذرات چه تغییری می‌کند؟

اولین اثر کاهش اندازه ذرات، افزایش سطح است، افزایش نسبت سطح به حجم نانوذرات باعث می‌شود که اتم‌های واقع در سطح، اثر بسیار بیشتری نسبت به اتم‌های درون حجم ذرات، بر خواص فیزیکی ذرات داشته باشند. این ویژگی، واکنش پذیری نانو ذرات را به شدت افزایش می‌دهد به گونه‌ای که این ذرات به شدت تمایل به آگلومره یا کلوخه ای شدن داشته باشند. به عنوان مثال در مورد نانو ذرات فلزی، به محض قرارگیری در هوا، به سرعت اکسید می‌شوند.

البته این خاصیت مزایایی هم در بر دارد. به عنوان مثال با استفاده از این خاصیت می‌توان کارایی کاتالیزورهای شیمیایی را به نحو موثری بهبود بخشید و یا در تولید کامپوزیت‌ها با استفاده از این ذرات، پیوندهای شیمیایی مستحکم‌تری بین ماده زمینه و ذرات برقرار شده و استحکام کامپوزیت به شدت افزایش می‌یابد.

علاوه بر این، افزایش سطح ذرات، فشار سطحی را تغییر داده و منجر به تغییر فاصله بین ذرات یا فاصله بین اتم‌های ذرات می‌شود.

فاصله بین اتم‌های ذرات با کاهش اندازه آن‌ها، کاهش می‌یابد. البته این امر بیشتر برای نانو ذرات فلزی صادق است. در مورد نیمه هادی‌ها و اکسیدهای فلزی مشاهده شده است که با کاهش قطر نانو ذرات، فاصله بین اتم‌های آن‌ها افزایش می‌یابد. اگر اندازه دانه باز هم بیشتر کاهش یابد، تغییرات شدید دیگری نیز رخ می‌دهد. از جمله این تغییرات آن است که اتم‌ها می‌توانند خودشان را در هندسه‌هایی که در جامدات توده‌ای غیرممکن است، آرایش دهند. تغییر در فاصله بین اتم‌های ذرات و نسبت سطح به حجم زیاد در نانو ذرات، تأثیر متقابلی در خواص ماده دارد. تغییر در انرژی آزاد سطح، پتانسیل شیمیایی را تغییر می‌دهد. این امر در خواص ترمودینامیکی ماده (مثل نقطه ذوب) تأثیر گذار است.

۱-٤ تغییر در خواص مغناطیسی الکتریکی و شیمیایی

تغییر در فاصله بین اتم‌های ذرات و هندسه ذرات روی خواص الکترونیکی ماده هم تأثیرگذار است. وقتی اندازه ذرات کاهش می‌یابد، پیوندهای الکترونیکی در فلزات ظریف‌تر می‌شوند جالب است که بپرسیم در چه اندازه دانه‌ای یک ذره فلزی شبیه یک توده فلز رفتار می‌کند؟ آیا این تغییر در خواص به تدریج رخ می‌دهد یا به طور ناگهانی؟ پاسخ به این سوالات هم از نظر آزمایشگاهی و هم تئوری، مشکل است.

کمیت الکترونیکی که راحت‌تر در دسترس می‌باشد، پتانسیل یونیزاسیون است. مطالعات نشان داده‌اند که پتانسیل یونیزاسیون در اندازه دانه‌های کوچک (ذرات ریز تر)، بیشتر است. یعنی با افزایش اندازه ذرات، پتانسیل یونیزاسیون آن‌ها کاهش می‌یابد. افزایش نسبت سطح به حجم و تغییرات در هندسه و ساختار الکترونیکی تأثیر شدیدی روی فعل و انفعالات شیمیایی ماده می‌گذارد. برای مثال، فعالیت ذرات کوچک با تغییر در تعداد اتم‌ها (و در نتیجه اندازه ذرات)، تغییر می‌کند.

پیچیده‌ترین تأثیر اندازه ذرات، تأثیر بر خواص مغناطیسی ماده است. یک ماده توده‌ای فرو مغناطیس با حوزه‌های مغناطیسی که هر کدام حاوی هزاران اتم هستند، شناخته می‌شود. در یک حوزه مغناطیسی جهت چرخش الکترون‌ها یکسان است، اما حوزه‌های مغناطیسی متفاوت، جهات چرخش متفاوتی دارند. تغییر فاز مغناطیسی وقتی رخ می‌دهد که یک میدان مغناطیسی بزرگ، تمام حوزه‌های مغناطیسی را یک جهت کند. ممکن است فکر کنید

وقتی به اندازه‌های کوچک‌تر می‌رویم، به عنوان مثال در مورد نانو ذرات، حوزه‌های مغناطیسی مشخصی دیده نمی‌شود. بنابراین تصور می‌شود که در این مواد سیستم‌های ساده‌تری وجود خواهند داشت. اما در حقیقت چیزی برعکس این موضوع وجود دارد. ذرات مغناطیسی کوچک و حتی جامدات غیر مغناطیسی با اندازه دانه کوچک، نوع جدیدی از خواص مغناطیسی را نشان می‌دهند. این خواص متأثر از خاصیت کوانتومی اندازه ذرات است که برای فهمیدن آن، نیاز به مطالعه بسیار است.

۱-۵ نانوسیالات

سیالات معمول از قبیل آب، روغن و اتیلن گلیکول به طور وسیعی به عنوان سیال خنک کن استفاده می‌شوند که با توجه به مسائل خنک کاری و شرایط کارکرد ماشین‌آلات صنعتی از اهمیت خاصی در صنعت برخوردار هستند. همان‌طور که می‌دانیم دفع حرارت از ماشین‌آلات و سایر فرایندهای ساخت و تولید همواره از محدودیت-های طراحی و اجرایی بوده است. سیالات نقش مهمی در انتقال حرارت بازی می‌کنند.

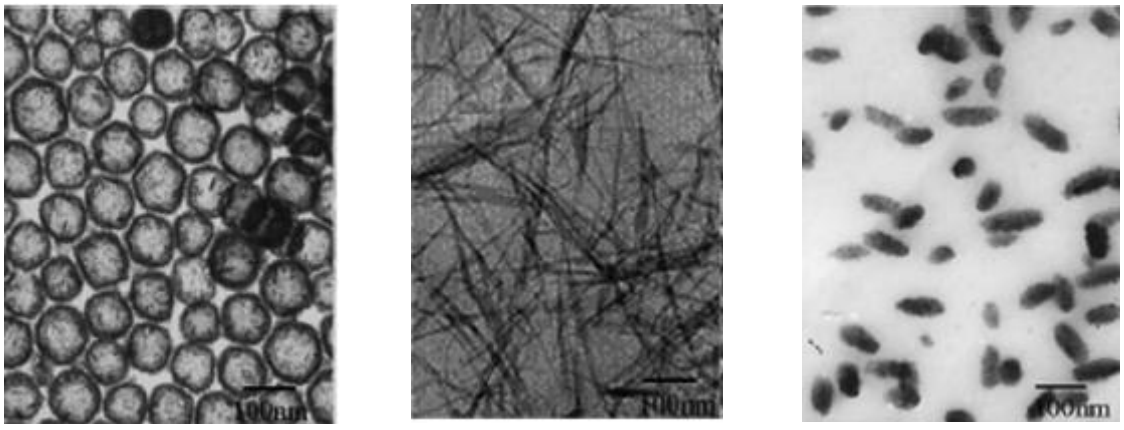
بدیهی است که استفاده از سیالات با ظرفیت حرارتی بالاتر و توانایی بیشتر در انتقال حرارت منجر به کاهش حجم تأسیسات و تجهیزات خنک کاری می‌شود. قدر مسلم طراحی این نوع تجهیزات به سمت هندسه‌هایی رفته است که حداکثر نرخ انتقال حرارت از مواد تجهیزات فوق‌الذکر را موجب گردد، مبدل‌های جریان متقاطع، پوسته و لوله و مبدل‌های فشرده حاکی از این مطلب می‌باشند. نکته قابل توجه اینکه با کاهش حجم تأسیسات خنک کاری انرژی مصرفی برای پمپاژ سیال به طور چشم‌گیری کاهش می‌یابد.

تحقیقات انتقال حرارتی اخیراً بر روی مکانیزم‌های افزایش قابلیت انتقال حرارت و ظرفیت حرارتی سیالات به کار رفته به عنوان خنک‌کن متمرکز گشته است. می‌دانیم که فلزات در حالت جامد دارای ضریب انتقال حرارت هدایتی بزرگ‌تری نسبت به سیالات دارد، به عنوان مثال یک قطعه مکعبی مس خالص در دمای محیط، دارای ضریب انتقال حرارت هدایتی ۷۰۰ مرتبه بزرگ‌تر از آب و ۳۰۰۰ مرتبه بزرگ‌تر از روغن موتور می‌باشد. لذا روشن است که سیالی که ذرات فلزی در آن معلق شده باشد، به مراتب ضریب انتقال حرارت هدایتی بزرگ‌تری نسبت به سیال اصلی دارد.

این نکته پایه اختراع جالبی تحت عنوان نانوسیال است. نانوسیال، سیالی است که ذرات جامد نانومتری در آن معلق شده باشد. لازم به ذکر است که اگر اندازه ذرات معلق در ابعاد میلی‌متر، میکرومتر یا بزرگ‌تر از آن باشد، عاملی برای جلوگیری از ته‌نشینی ذرات معلق شده وجود نخواهد داشت، لذا استفاده صنعتی از سیالات با ذرات

فلزی با ابعاد میکرو یا میلی‌متری امکان‌پذیر نمی‌باشد و رسوبات فلزی موجب انسداد مسیرهای عبور سیال می‌گردد و در واقع این نوع سیالات با ضریب انتقال حرارت هدایتی بالا محدود به آزمایشگاه‌های تحقیقاتی می‌شود. البته گزارشاتی مبنی بر افزایش اصطکاک ناشی از معلق نمودن نانوذرات جامد موجود است.

مفهوم نانو سیال اولین بار توسط چویی و استمن[۲][۲] ارائه شد. آنها با اضافه کردن نانوذرات فلزی به سیالات معمولی و نشان دادن افزایش هدایت حرارتی سیال مبحث جدیدی از انتقال حرارت سیالات را به وجود آوردند. پس از آن نانو سیال‌ها توجه شدیدی را به سمت خود جلب کردند که باعث توسعه نانو سیالات با ذرات دیگری مانند اکسید نانو ذرات، نانو فیبرها و نانو لوله‌های کربنی شده است. شکل ۱- ۲ انتقال الکترونی میکروسکوپی بعضی از نانو ذرات بکار رفته در نانو سیالات را نشان می‌دهد.



الف: نانو ذرات بیضی شکل مس ب: نانو فیبر فسفات مس ج: نانو ذرات توخالی مس

د: نانو ذرات هشت وجهی اکسید مس و: نانو تیوب‌های کربنی

شکل ۱-۲ : برخی از نانوذرات بکار رفته در نانو سیال‌ها[۳]

نانوسیال‌ها جنبه‌های ویژه‌ای دارند که آن‌ها را کاملاً از مخلوط سیالات دو فازی که در آن‌ها ذرات در ابعاد میکرو یا میلی متر هستند، متمایز می‌کنند. ذرات معلق فوق ریز، خواص انتقالی و عملکرد انتقال حرارت نانو

[2] Choi and Eastman

سیال‌ها را تغییر می‌دهد، به طوری که پتانسیل بالایی در بهبود انتقال حرارت نشان می‌دهند. مهم‌ترین اثر مشاهده شده در نانو سیال‌ها، افزایش قابل توجه هدایت گرمایی بوده است. به طوری که این افزایش قابل توجه حتی در غلظت‌های پایین نانو سیال نیز مشاهده می‌شود. غلظت پایین نانو سیال باعث می‌شود که سیال رفتار نیوتنی خود را حفظ کند. به علاوه نانو سیال‌ها پایداری بالاتری از خود نشان می‌دهند. مخلوط سیالات دو فازی مرسوم به دلیل درشت تر بودن ذرات، باعث انسداد کانال‌های جریان می‌شوند. علاوه بر آن سرعت ته نشینی ذرات در آن‌ها بالاتر بوده و افت فشار بیشتری را ایجاد می‌کنند. خوردگی خطوط لوله نیز در این موارد بسیار مشاهده می‌شود. قدرت مورد نیاز برای پمپ کردن این سیالات بیشتر است. حال آنکه در نانو سیال‌ها به دلیل حرکت براونی و نیز بر هم کنش‌های بین ذرات و سطح بالا این آثار کاهش می‌یابد. مهم‌ترین کاربرد نانو سیا لها به عنوان خنک کننده است .سه عاملی که باعث می‌شود تا نانو سیا لها خنک کننده‌های مناسبی باشند عبارتند از : بالا بودن هدایت حرارتی نسبت به سیال پایه، بالا بودن انتقال حرارت نسبت به سیال پایه و بالا بودن شار حرارتی بحرانی.

نانوتکنولوژی تحولات بزرگی را در خیلی از زمینه‌های مهندسی و پزشکی ایجاد نموده است. بعد نانو در واقع به مفهوم افزایش سطح در مقابل حجم اشغال‌شده در فضا می‌باشد، این امر جرقه‌ای را در ذهن بشر روشن کرد که با معلق نمودن ذرات با ابعاد نانو می‌توان از نیروی کشش سطحی به عنوان عاملی برای مقابله با ته‌نشینی ذرات معلق استفاده نمود. توجه شود که ذرات معلق لزوماً نباید از آلیاژهای فلزی باشد، بلکه نانو فیبرهای پلیمری با ضریب انتقال حرارت بالا از قبیل فیبرهای نانولوله‌های کربنی و نانوذرات جامد غیر فلزی از قبیل اکسید سیلیسیوم در تهیه نانوسیالات به عنوان سیالات خنک‌کن جدید به کار رفته است. مسلم است که هرچه نیروی کشش بین مولکولی مولکول‌های سیال و ذرات معلق بیشتر باشد پایداری آن نانوسیال بیشتر است، لذا پارامترهایی از قبیل قطبیت و عدم قطبیت سیال پایه و نانوذرات معلق نقش مهمی در زمان پایداری سوسپانسیون را بازی می‌کند.

تجربیات آزمایشگاهی بیانگر این مطلب است که سوسپانسیون حاوی نانوذرات جامد معلق با قطر حدود ۱۰-۴۰ نانومتر بدون توجه به نوع سیال و ذرات معلق در شرایط سکون هفته‌ها و حتی ماه‌ها پایدار می‌ماند و حجم قابل چشم‌پوشی از نانوذرات معلق ته‌نشین می‌شود. نکته جذاب این اختراع این است که میزان افزایش ضریب انتقال حرارت هدایتی نانوسیال نسبت به سیال پایه بیش از میزان پیش‌بینی شده درون‌یابی کسر حجمی نانوذرات جامد معلق می‌باشد. مخلوط کلوئیدی[3] شامل یک سیستم دو فازی است که یک فاز (فاز پراکنش[4] β یا فاز پراکنده) درون فاز دیگری (فاز پیوسته[5] α) پخش شده است. همان‌طور که از این تعریف برمی‌آید نانوسیالات هم در واقع

[3] -colloidal dispersion
[4] -dispersed
[5] -continuous