

بررسی عبور آب از نانو کانال متشکل از صفحات گرافن به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی

محمد رضا عبدی پور فرد^۱ و مهدی صاحبی^{۲*}

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۰۴/۱۰	
پذیرش مقاله: ۱۴۰۰/۰۶/۲۹	
واژگان کلیدی: دینامیک مولکولی، عبور آب، صفحات گرافن، جریان در نانو کانال، توزیع چگالی.	در سال های اخیر، تصفیه آب با کمک صفحات گرافن مورد توجه محققین قرار گرفته است. در فرایند تصفیه درک مکانیزم عبور آب از گرافن در ابعاد مولکولی و سنجش تأثیر پارامترهای مختلف بر آن، به طراحی بهینه فرایند کمک می کند. در این تحقیق، با استفاده از روش دینامیک مولکولی مکانیزم و پارامترهای مؤثر بر عبور آب از یک نانو کانال متشکل از صفحات گرافن مورد بررسی قرار گرفته است. در این مطالعه اثر تغییر فشار اعمالی وارده به سیال و ابعاد هندسی کانال بر روی دبی جریان، توزیع چگالی و ضریب نفوذ مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج شبیه سازی ها نشان داد که آب، در هنگام عبور از نانو کانال، ساختار لایه ای به خود می گیرد. همچنین با افزایش فشار اعمالی، نفوذ پذیری، سرعت و میزان آب عبوری از نانو کانال به صورت مؤثری افزایش می یابد. به طوری که با افزایش اختلاف فشار از ۱۰۰ به ۵۰۰ مگاپاسگال، دبی عبوری بیش از ۴۵ برابر افزایش می یابد. نتایج مطالعه همچنین نشان داد که در یک مقطع با مساحت مشخص، دبی نانو کانال مربعی ۲/۸ بیش از هنگامی است که نسبت اضلاع کانال ۴ به ۱ باشد.

۱- مقدمه

امروزه حدود ۱/۲ میلیارد نفر در سراسر کره زمین از کمبود آب و پیامدهای نامطلوب کمبود آن بر سلامت و غذا و انرژی رنج می برند [۱]. آب با وجود آنکه یکی از منابع تجدید شونده به شمار می رود، مقدار محدودی دارد [۲]. عواملی مانند رشد جمعیت، افزایش صنعتی سازی و نیاز بیشتر به انرژی و از طرف دیگر آب شدن برف ها و انقباض یخچال های طبیعی، وضعیت را در آینده بدتر خواهد کرد. همان طور که توسط مؤسسات بین المللی تخمین زده شده، تعداد افراد آسیب دیده در دهه های آینده به ۳/۹ میلیارد نفر خواهد رسید [۳ و ۴]. یکی از نوید بخش ترین روش ها برای کاهش کمبود آب، شیرین سازی و تصفیه آب است. تصفیه آب دریا یک منبع بی نهایت را پیش روی بشر خواهد گذاشت. امروزه غشاهای نانو فیلتراسیون به صورت گسترده برای غربال و

جداسازی مولکول ها در حوزه نمک زدایی و تصفیه آب برای دستیابی به فرآیندهای کم فشار، جریان بالا و کم هزینه استفاده می شود. اخیراً گرافن به علت ضخامت اندک، مقاومت مکانیکی بالا، انعطاف پذیری بالا و ریزساختار متخلخل، کاندیدای برجسته ای در بین غشاهای نانو فیلتراسیون شناخته می شود [۵ و ۶]. غشاهای مبتنی بر گرافن شامل گرافن نانو متخلخل و اکسید گرافن، در تصفیه آب و در جداسازی گاز، بسیار امیدوار کننده عمل می کنند. روش شبیه سازی دینامیک مولکولی یک ابزار بسیار مؤثر برای مطالعه فرآیندهای نفوذ غشاهای مبتنی بر گرافن است که شامل انتقال مولکولی در فضاهای محصور شده نانو می باشد [۷]. در دهه گذشته مطالعات گسترده ای در زمینه مطالعات دینامیک مولکولی جریان آب و استفاده از گرافن به عنوان غشاء تصفیه صورت پذیرفته است.

* پست الکترونیک نویسنده مسئول: sahebi@qut.ac.ir

۱. کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک تبدیل انرژی، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی قم

۲. استادیار، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی قم

مورد بحث قرار گرفت. در این مطالعه ارتباط بین نفوذ آب با نوسانات حرارتی گرافن به‌وسیله‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفته است [۱۳]. در سال ۲۰۲۰ ژاو و همکاران مطالعاتی در خصوص نفوذپذیری آب در نانوکanal گرافن انجام دادند. محاسبات نفوذپذیری آب با روش دینامیک مولکولی انجام شد. نتایج نشان داد نفوذپذیری آب ناهمگون است. به‌عبارت‌دیگر نفوذپذیری در راستای عمودی کمتر از نفوذپذیری در راستای افقی از میان صفحات موازی گرافن است. ناهمگونی در راستای عمود به‌دلیل به‌دام افتادن مولکول‌های آب در نزدیکی دیواره گرافن است. نتیجه‌ی نهایی مطالعه نشان داد میزان نفوذپذیری در کانال‌های با ارتفاع بالا به‌مقادیر نفوذپذیری آب معمولی نزدیک است [۱۴]. سان و همکاران نشان دادند که اضافه کردن گروه‌های هیدروکسیل به صفحات نانوکanal گرافن باعث تغییر خواص آب و از جمله ویسکوزیته آن می‌شود [۱۵]. چن و همکاران در سال ۲۰۲۰ مکانیزم عبور آب از میان لایه‌های اکسید گرافن را با کمک مفاهیم مولکولی و دینامیک پیوندهای هیدروژنی تشریح کردند [۱۶]. ژن و همکاران به‌وسیله‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی جداسازی یون‌های کادمیوم از آب با کمک فیلترهای متشکل از لایه‌های اکسید گرافن پرداختند. نتایج نشان از توانایی نسبتاً خوب این روش برای حذف یون‌های کادمیوم داشت [۱۷].

در اکثر مطالعاتی که بر روی استفاده از گرافن جهت عبور و تصفیه آب انجام شده‌است، جهت حرکت آب عمود بر گرافن بوده و تصفیه و عبور آب با ایجاد یک حفره در صفحه گرافن میسر شده‌است. از طرف دیگر، می‌توان حالتی را تصور کرد که از گرافن برای ساخت یک کانال کربنی جهت عبور آب استفاده کرد به‌صورتی که جهت عبور سیال، موازی با راستای صفحات گرافن باشد. حالت اخیر کمتر مورد توجه و بررسی واقع شده‌است و می‌تواند به‌عنوان یک حالت جدید در مبحث تصفیه و انتقال آب بررسی شود. بدین منظور در مطالعه حاضر با استفاده از شبیه‌سازی به‌روش دینامیک مولکولی به بررسی عبور آب از نانوکanal گرافن به‌منظور بررسی خواص جریان با استفاده از این هندسه پرداخته شده است. هدف از این مطالعه، سنجش میزان عبور آب از داخل نانوکanal در شرایط مختلف هندسی است. نتایج این تحقیق در طراحی بهینه سیستم‌های تصفیه آب مبتنی بر استفاده از صفحات گرافن می‌تواند به‌کار گرفته‌شود.

نخستین مطالعات در مورد عبور جریان آب از گرافن به‌منظور تصفیه آب توسط گراسمن صورت گرفت. گراسمن عبور آب از یک تک لایه گرافن را با روش دینامیک مولکولی شبیه‌سازی کرد و نتایج مفیدی در رابطه با تصفیه آب و افزایش جریان با عبور از لایه گرافن به‌دست‌آورد [۸]. کوهن و گراسمن بر روی عامل‌دار کردن حفره‌های موجود در سطح گرافن، مطالعاتی انجام دادند. بدین صورت که کربن موجود در کناره‌های حفره‌ها پیوندهایی با گروه‌های هیدروکسیلی و هیدروژنی دارد و گروه‌های آب‌دوست و آب‌گریز ایجاد شد. در این حالت نفوذ آب در حفره‌ها مورد بررسی قرار گرفت [۹]. لیو و همکاران، خواص آب در عبور از نانوکanal ایجاد شده با تک صفحه‌های گرافن را بررسی نمودند. در این تحقیق با تغییر ضرایب پتانسیل لنارد جونز، نیروی اعمالی به مولکول‌های آب، ضخامت کانال و طول کانال، خواص آب در هنگام عبور از کانال مورد مطالعه قرار گرفت [۱۰]. دواناتان و همکاران در مطالعه‌ای به‌بررسی عبور جریان آب از لایه‌های افقی و موازی گرافن پرداختند. در این مطالعه با هیدراته نمودن صفحات گرافن از ۱٪ تا ۲۳٪ و اعمال نیروی خارجی به مولکول‌های آب مشخص شد که نفوذ مولکول‌های آب در مقایسه با صفحه گرافن معمولی کاهش یافته‌است که علت آن ایجاد پیوندهای قدرتمند هیدروژنی ذکر شده‌است. همایی و همکاران مطالعه‌ای در خصوص تصفیه آب با ایجاد نانو حفره بر روی صفحه گرافن انجام دادند. در این تحقیق اثر ضخامت صفحه گرافن، قطر حفره‌ها بر روی نفوذپذیری و تصفیه آب مورد بررسی قرار گرفت [۱۱]. سان و همکاران مطالعات مروری بر روی غشاهای کربنی از جمله گرافن متخلخل و گرافن اکسید در بخش نقل و انتقال ذرات در ابعاد نانو انجام گرفت. در این مطالعه به‌طور خلاصه مطالعات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پیشرفته اخیر در بخش تصفیه آب و جداسازی گازها بررسی شده و مشکلات فعلی در این زمینه طرح و بحث شده‌است. هدف این فعالیت ایجاد بستر جهت افزایش زمینه‌های تحقیق و پژوهش در مورد غشای گرافن بوده‌است [۱۲]. توسط کاو و همکاران تحقیقاتی بر روی نفوذ آب در نانو حفره‌ها که در سال‌های گذشته مورد علاقه بوده‌است، انجام شد. با توجه به تحقیقات اخیر، اتصال بین ارتعاش دیواره‌های منافذ و حرکت آب به‌طور گسترده‌ای باعث افزایش نفوذ آب شده است با این حال تأثیر آن در نفوذ آب در غشای گرافن اکسید باقی مانده بود که در این مطالعه

که برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نوشته شده است. این نرم‌افزار با در اختیار داشتن میدان‌های متنوع نیرویی بستری مناسب برای شبیه‌سازی نمونه‌های مختلف از دستگاه‌های اتمی و مولکولی گرفته تا انواع پروتئین‌ها و دستگاه‌های زیستی فراهم می‌کند. از مهم‌ترین ویژگی‌های این نرم‌افزار می‌توان به توان بالای آن در شبیه‌سازی دستگاه‌های پر ذره اشاره کرد [۱۸].

پارامتر ثابت شبکه صفحه گرافن یا همان طول پیوند اتم‌های کربن به اندازه $1/42$ آنگستروم در نظر گرفته شده است. در این مطالعه از مدل آبی Tip3p استفاده شده است. بار جزئی هر یک از اتم‌ها در این مدل طبق جدول ۱ است [۱۹].

جدول ۱- مقادیر بار جزئی اتم‌های مورد استفاده در شبیه‌سازی

اتم	مقدار بار جزئی (e)
اکسیژن	-۰,۸۳۴
هیدروژن	+۰,۴۱۷
کربن	۰

انرژی کل سیستم با استفاده از میدان نیروی Charmm27 به صورت مجموع ظرفیت (والانس) یا برهمکنش‌های پیوندی و برهمکنش‌های غیر پیوندی بیان می‌شود [۲۰].

$$E_{total} = E_{bonds} + E_{angles} + E_{dihedrals} + E_{impropers} + E_{urey-bradly} + E_{vdW} + E_{elec} \quad (1)$$

در رابطه ۱، پنج جمله اول برای برهمکنش‌های بین مولکولی با پیوندهای کوتاه برد یا همان والانسی است. دو جمله آخر مربوط برهمکنش‌های بین مولکولی غیر پیوندی بلند برد است که شامل برهمکنش‌های الکترواستاتیک و واندروالس است. شعاع قطع 12 آنگستروم در نظر گرفته شد. برهمکنش‌های بین مولکول‌های آب و گرافن با عنوان برهمکنش واندروالسی بین اتم‌های کربن و اکسیژن مدل می‌شود. برهمکنش بین اتم‌ها در مولکول آب نیز به وسیله برهمکنش واندروالسی تعریف می‌شود. در این مطالعه، برهمکنش واندروالسی به وسیله تابع لِنارد-جونز ($12-6$) تعریف می‌شود [۲۱].

$$V(r) = 4\sigma\chi \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2)$$

در رابطه ۲، r فاصله بین دو اتم، ϵ قدرت برهمکنش میان

۲- جزئیات مدل‌سازی

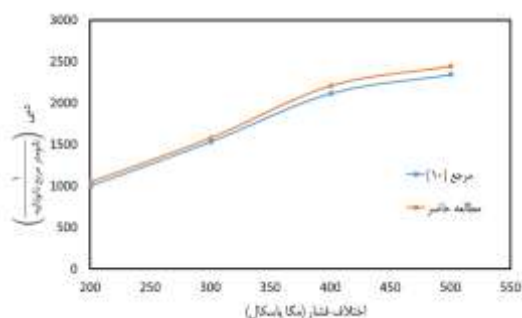
در این شبیه‌سازی دو جعبه مکعب مستطیلی به عنوان محفظه‌های حاوی آب با ابعاد به ترتیب در جهات x ، y و z ، $38 \times 37 \times 40$ آنگستروم، توسط یک مجرا با دیواره‌های گرافنی جهت عبور آب به یکدیگر متصل می‌شوند. تعداد 1880 مولکول آب در هر یک از محفظه‌ها قرار می‌گیرد که متناظر با چگالی آب (1 گرم بر سانتی‌متر مکعب) است. مرز محفظه‌ها و دیواره‌های نانو کانال از جنس گرافن است. در قسمت ابتدایی شبیه‌سازی یک نانو کانال با اندازه سطح مقطع 10×10 آنگستروم مربع (در راستای محورهای y و z) که طول آن در راستای محور مختصاتی $50 \times X$ آنگستروم در نظر گرفته می‌شود. در واقع فاصله بین دیواره بالا و پایین طبق هندسه مطرح شده 10 آنگستروم است. در شکل (۱) نمایی سه‌بعدی از هندسه شبیه‌سازی مشاهده می‌شود. در کلیه جهات‌های x ، y و z شرط مرزی پرئودیک اعمال شده است. بدین معنی که اگر ذره‌ای از یکی از وجوه دامنه حل خارج شود، با همان سرعت و جهت به وجهی که در سمت مقابل است وارد می‌شود. این شرط مرزی در دینامیک مولکولی مرسوم بوده و سبب کاهش زمان و هزینه محاسباتی از طریق کم کردن تعداد مولکول‌های لازم برای شبیه‌سازی می‌شود. همچنین دیواره‌های گرافنی عملاً آن‌قدر فشرده هستند که اجازه عبور مولکول‌های آب از خود را نمی‌دهند. در حقیقت با نزدیک شدن یک مولکول از سیال به دیواره، نیروهای دافعه بین مولکولی به شدت زیاد شده و سبب دور شدن و عدم نفوذ ذره به داخل دیوار می‌شود. بنابراین خودبه‌خود یک دیواره نفوذناپذیر را ایجاد می‌شود.



شکل ۱ نمایی از هندسه شبیه‌سازی

کلیه شبیه‌سازی‌ها با استفاده از کد شبیه‌سازی دینامیک مولکولی لمپس انجام شده است [۱۸]. لمپس یک کد متن‌باز کامپیوتری به زبان C با قابلیت پردازش موازی است

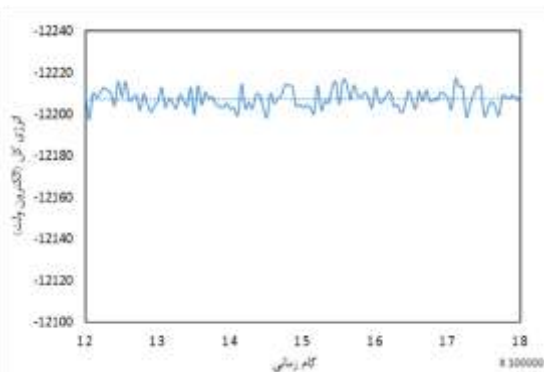
نتایج منتشر شده در مقاله مربوطه مقایسه شده‌است. شرایط حاکم بر مسئله پژوهش حاضر و مسئله مرجع [۱۰] مشابه یکدیگر هستند با این تفاوت که در مرجع مورد اشاره، کانال عبور آب یک مجرای دوبعدی متشکل از دو صفحه گرافن در بالا و پایین است. شکل (۲) نمودار دبی بر حسب اختلاف فشار را میان نتایج به دست آمده از مطالعه حاضر و مرجع [۱۰] مورد مقایسه قرار می‌دهد. همان‌گونه که دیده می‌شود، اختلاف نتایج بسیار ناچیز است و می‌توان با اطمینان خوبی روش حل به کار گرفته شده در این پژوهش را معتبر دانست.



شکل ۲- اعتبار سنجی روش حل مسئله با استفاده از داده‌های مرجع [۱۰]

۴- پایداری مسئله

در هر شبیه‌سازی قبل از نتایج باید از پایداری روند شبیه‌سازی اطمینان حاصل شود. بررسی تغییرات انرژی در طی شبیه‌سازی یکی از راهکارهای قابل قبول است که تحت عنوان افت‌وخیز انرژی شناخته می‌شود. در شکل (۳) روند تغییرات انرژی کل در سیستم در فشار ۲۰۰ مگاپاسکال در گام‌های پایانی شبیه‌سازی مشاهده می‌شود. همان‌گونه که مشاهده می‌شود انرژی کل به حالت پایدار رسیده‌است.



شکل ۳- نمودار تغییرات انرژی کل در گام‌های زمانی مختلف

مولکول‌ها و σ فاصله صفر پتانسیل است. χ ضریب انرژی پتانسیل است که در این مسئله مقدار آن 1 در نظر گرفته می‌شود و بدین معنی است که پارامترهای فرمول در حالت اصلی تعریف شده‌اند. در این شبیه‌سازی از هنگرد دما ثابت (هنگرد کانونی) استفاده شده که در آن دما سیستم با استفاده از ترموستات نوز-هاور^۱ در ۳۰۰ کلوین ثابت نگه‌داشته می‌شود. با استفاده از هنگرد دما ثابت انرژی جنبشی ثابت می‌ماند. در این مسئله اتم‌های کربن در جای خود ثابت مانده و در واقع کانال گرافن یک جسم صلب و بدون هیچ‌گونه ارتعاش در نظر گرفته شده‌است. جهت به حرکت درآمدن مولکول‌های آب، نیروی خارجی اعمال می‌شود. نیروی اعمالی تنها به اتم‌های اکسیژن در جعبه آب سمت چپ و در راستای محور X (در راستای طول کانال) وارد خواهد شد. برای اعمال اختلاف فشار دلخواه در دوسر نانو کانال، نیرو طبق رابطه ۳ محاسبه می‌شود [۲۲].

$$f = \Delta PL_y L_z / n \quad (3)$$

در این رابطه، n تعداد اتم‌های اکسیژن در جعبه سمت چپ شبیه‌سازی است.

کل مدت زمان شبیه‌سازی ۹۰۰ پیکوثانیه با گام زمانی ۰/۵ فمتوثانیه است. شبیه‌سازی در سه مرحله به اجرا در می‌آید. مرحله اول: در این مرحله بدون اعمال نیروی خارجی و با تعریف برهمکنش‌های پیوندی و غیر پیوندی در مدت ۵۰ پیکوثانیه، مولکول‌های آب در حالت استراحت قرار خواهند گرفت. مرحله دوم: بعد از آسایش مولکول‌های آب در سیستم، نیروی خارجی به مولکول‌های آب اعمال می‌شود. این مرحله به مدت زمان ۱۰۰ پیکوثانیه ادامه می‌یابد به صورتی که خواص جریان و همچنین در انرژی‌های پتانسیل، جنبشی و کل سیستم، حالت پایدار ایجاد گردد. مرحله سوم: بعد از پایداری و به تعادل رسیدن سیستم، در آخرین مرحله به تعریف پارامترها و خروجی‌های مدنظر و میان‌گیری آن‌ها در طول زمان اقدام می‌شود. مدت زمان این مرحله نیز ۷۵۰ پیکوثانیه در نظر گرفته شد.

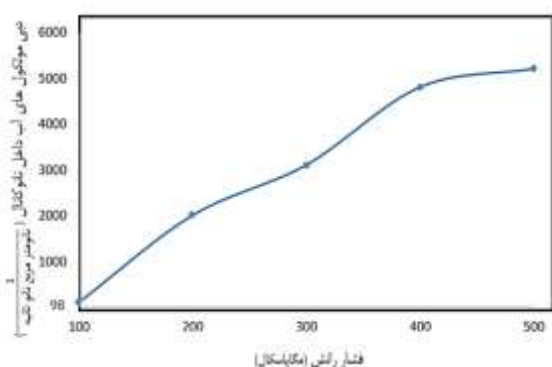
۳- اعتبارسنجی حل

به منظور اطمینان از صحت روش حل به کاررفته در مطالعه حاضر، مسئله مرجع [۱۰] که با موضوع این مطالعه شباهت زیادی دارد، مورد حل مجدد قرار گرفته و نتایج حاصله با

¹ Nose-Hoover

در جدول ۲ متوسط تعداد مولکول‌های آب محبوس در کانال، در فشارهای رانش مختلف، در گام‌های زمانی انتهایی شبیه‌سازی گزارش شده‌است.

تعداد مولکول‌های آب با افزایش اختلاف فشار دو سر کانال با شیب ملایم و خفیف افزایش یافته‌است. مشخص می‌شود که اختلاف فشار تأثیر چشم‌گیری بر روی تعداد مولکول‌های آب داخل نانوکanal نمی‌گذارد. این مسئله ناشی از ضریب تراکم‌پذیری پایین مایع آب است. با توجه به نتایج فوق و پس از محاسبه جمع سرعت مولکول‌های آب در کانال، میزان دبی مولکول‌های آب برای هر اختلاف فشار، در شکل (۵) آورده شده‌است.



شکل ۵- تغییرات دبی مولکول‌های آب در نانوکanal در فشارهای رانش مختلف

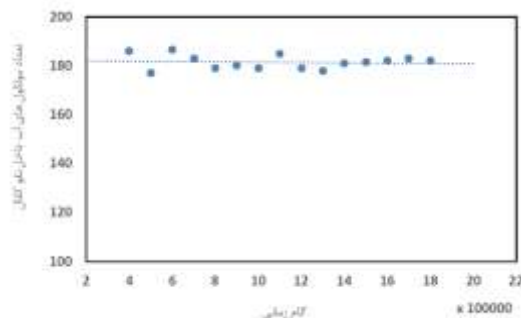
مشاهده می‌شود که با تغییر فشار رانش از ۱۰۰ به ۲۰۰ مگاپاسکال تغییرات دبی در حدود ۴۰ برابر است، اما در تغییر فشار رانش از ۴۰۰ تا ۵۰۰ مگاپاسکال، افزایش دبی با شیب ملایم‌تری صورت می‌گیرد. برای فشار رانش ۱۰۰ مگاپاسکال که به‌طور معمول برای غشاهای نانوفیلتراسیون صنعتی استفاده می‌شود، میزان دبی مولکول‌های آب در حدود ۹۸ مولکول بر نانومتر مربع نانوثانیه به دست می‌آید که ۲۰ برابر بیش از میزان دبی به‌دست‌آمده برای نانولوله کربنی^۲ (۱۲،۱۲) است [۲۴]. در فشار رانش ۲۰۰ مگاپاسکال، میزان دبی برابر ۱۹۸۰ مولکول بر نانومتر مربع نانوثانیه است که با هم از دبی گزارش‌شده برای نانولوله کربنی با قطر ۱۳/۵ الی ۲۱/۷ آنگستروم که در این بازه برابر ۴۱۰ الی ۷۰۰ مولکول بر نانومتر مربع نانوثانیه است، بیش‌تر است [۲۵]. این نتایج حاکی از آن است که در مقیاس نانو، استفاده از نانو کانال‌های ساخته‌شده از صفحات گرافن در مقایسه با نانولوله‌های کربنی، به طرز چشم‌گیری می‌تواند

۵- نتایج

در بررسی جریان عبوری از داخل نانوکanal، دبی حجمی سیال کلیدی‌ترین پارامتر در نتایج شبیه‌سازی است. رابطه ۴ برای محاسبه مقدار جریان^۱ عبوری از داخل نانوکanal ارائه شده‌است [۲۳].

$$Q = \frac{\bar{v}N}{d L_y L} \quad (4)$$

در این رابطه \bar{v} سرعت میانگین مولکول‌های آب داخل نانوکanal، N تعداد مولکول‌های آب داخل نانوکanal و L طول، L_y عرض کانال و d ارتفاع نانوکanal که مقدار آن‌ها به‌ترتیب برابر با ۵۰، ۱۰ و ۱۰ آنگستروم است. در واقع مخرج کسر، حجم نانو کانال است. جهت محاسبه دبی مولکول‌های آب با استفاده از رابطه فوق، سرعت و تعداد مولکول‌های آب داخل نانوکanal تعیین‌کننده‌است. نحوه تغییرات تعداد مولکول‌های آب داخل نانوکanal در هر ۵۰ پیکوثانیه در فشار رانش ۲۰۰ مگاپاسکال در شکل (۴) مشاهده می‌شود.



شکل ۴- تغییرات تعداد مولکول‌های آب در گام‌های زمانی مختلف در فشار رانش ۲۰۰ مگاپاسکال

در گام‌های ابتدایی حل، تغییراتی حدود ۵ درصد در تعداد مولکول‌های آب داخل کانال دیده می‌شود که با گذر زمان و همگرایی مسئله، تعداد مولکول‌های آب در داخل کانال به مقدار ثابت ۱۸۲ رسیده‌اند.

جدول ۲- تعداد مولکول‌های آب موجود در کانال در فشارهای رانش مختلف

فشار رانش (مگاپاسکال)	۱۰۰	۲۰۰	۳۰۰	۴۰۰	۵۰۰
تعداد مولکول‌های موجود در کانال	۱۷۲	۱۸۲	۱۸۴	۱۸۷	۱۸۸

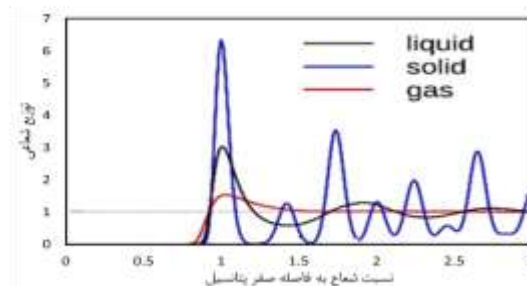
^۲ CNT (12,12)

^۱ Flow rate

آنجایی که اتم‌ها نمی‌توانند نزدیک‌تر از این فاصله به یکدیگر بشوند، این فاصله پهنای مؤثر اتم‌ها را نشان می‌دهد. تعداد مشخصی قله در نمودار تابع توزیع شعاعی مشاهده می‌شود که نشان می‌دهد اتم‌ها به صورت متمرکز در کنار یکدیگر در پوسته‌های همسایه جمع شده‌اند. اولین پوسته آب که دارای بیشترین میزان همسایگی مولکول آب است در فاصله‌ی شعاعی ۲/۸۱ آنگستروم رخ داده‌است که برابر با فاصله صفر پتانسیل بین دو اتم اکسیژن است که با نتایج پژوهش‌های قبلی مبنی بر اینکه در فاصله تعادلی دو ذره، بیشترین تجمع صورت می‌گیرد، همخوانی دارد. با توجه به تعریف پتانسیل لنارد-جونز در فاصله‌های بیشتر از فاصله تعادلی، نیروی جاذبه بین ذرات برقرار می‌شود و این نیرو تا فاصله‌ی شعاع قطع ادامه دارد. با توجه به این نکته و تعریف شعاع قطع ۱۲ آنگستروم، نمودار در بیش از این شعاع رسم نشده‌است. مطابق توضیحات فوق، از مشاهده شکل‌های (۶) و (۷) مشخص می‌شود که جریان مولکول‌های آب داخل نانوکanal در حالت مایع است و فاصله‌ی کوتاهی که تابع توزیع شعاعی در ابتدا صفر است، شعاع ذره در نظر گرفته می‌شود. همچنین افزایش فشار درون نانوکanal، سبب مقدار کمی افزایش در ارتفاع قله در نمودار تابع توزیع شعاعی شده‌است که نمایانگر افزایش فشردگی مولکول‌های آب است. اکنون اثر تغییر فشار بر چگالی عددی آب مورد بررسی قرار می‌گیرد. چگالی عددی مقداری برای توصیف درجه غلظت اشیاء قابل شمارش در فضای فیزیکی است. در این مسئله چگالی عددی به صورت حجمی (سه‌بعدی) محاسبه و بررسی می‌شود. برخلاف مقیاس ماکرو، چگالی سیال در داخل کانال به صورت یکنواخت توزیع نمی‌شود. توزیع چگالی می‌تواند در توجیه پدیده‌هایی همچون لایه‌لایه شدن سیال در کنار دیواره و خزش گرمایی به کار آید [۲۷]. جهت محاسبه توزیع چگالی آب در راستای Z (ضخامت کانال)، می‌بایست، از ابتدای صفحه زیرین گرافن (در $Z=0$)، کانال را شبکه‌بندی نمود. شبکه‌بندی با گام مکانی ۰/۰۵ آنگستروم انجام شده‌است.

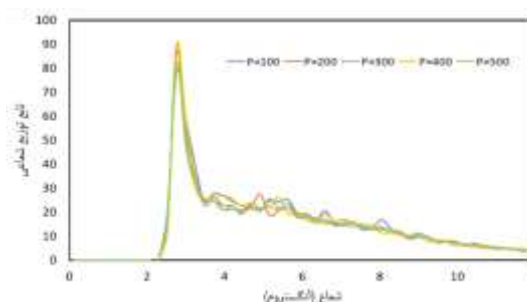
در شکل (۸) نمودار چگالی عددی در فشارهای رانش مختلف مشاهده می‌شود. نکته قابل توجه در شکل (۸)، ظهور دو قله در چگالی عددی است که دلالت بر تمایل مولکول‌های آب جهت تشکیل ساختار لایه‌ای (به صورت دولایه) در داخل

موجب افزایش نرخ عبور آب یا کاهش قدرت مورد نیاز برای پمپاژ در یک دبی مشخص شود. تابع توزیع شعاعی^۱ یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های ساختاری مواد است. این تابع بیانگر احتمال یافتن یک اتم در فاصله‌ی خاص از یک اتم مرکزی اختیاری است که با $g(r)$ نمایش داده می‌شود که r فاصله‌ی بین مولکولی است. در عمل می‌توان چنین تصور کرد که این تابع نمایانگر چگالی محلی اتم‌ها در تعادل و در فاصله‌ی r از مولکول مرکزی است. در شکل (۶) صورت کلی تابع توزیع شعاعی برای گاز، مایع و جامد نشان داده شده‌است [۲۶]. همان‌طور که مشخص است برای سیال گازی فقط یک قله با ارتفاع کم مشاهده می‌شود و هر چه به سمت فاز مایع پیش می‌رویم، تعداد قله‌ها بیشتر شده اما با فواصل منظم کوتاه و در نهایت به یک مقدار ثابت دائمی در فاصله طولانی ختم می‌شود. در فاز جامد بینهایت قله مشاهده می‌شود که ارتفاع و فاصله جدایی آن‌ها از مشخصات شبکه جامد است.



شکل ۶- مقایسه شکل کلی تابع توزیع شعاعی برای سه حالت مایع، جامد و گاز [۲۶]

شکل (۷) نمودار تابع توزیع شعاعی را برای جفت اتم‌های اکسیژن - اکسیژن در فشارهای مختلف، داخل نانوکanal نشان می‌دهد.



شکل ۷- تابع توزیع شعاعی پیوند اکسیژن- اکسیژن در اختلاف فشارهای مختلف در داخل نانوکanal

در فواصل کوتاه تابع توزیع شعاعی صفر خواهد بود. از

¹ Radial distribution function

می‌کند. طبق یافته‌های پیشین، نرخ پرش با ضریب انتشار^۱ مولکول‌های آب رابطه خطی دارد که به راحتی می‌توان مقدار آن را از طریق میانگین مجذور جابجایی $\langle \Delta x^2(t) \rangle$ آن‌ها در طول جهت جریان آب، توسط رابطه‌ی ۵ محاسبه نمود [۲۹].

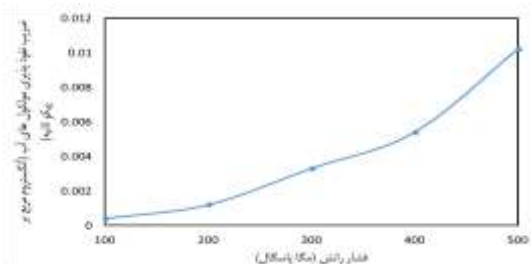
$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \approx 2Dt \quad (5)$$

در رابطه ۵، Δx جابجایی، D نرخ نفوذپذیری و t نشانگر زمان است. با توجه به خروجی‌های کد نرم‌افزاری، با رسم نمودار میانگین مجذور جابجایی مولکول‌های آب داخل نانوکanal، می‌توان معادله خط برای فشارهای رانش مختلف محاسبه کرد. معادلات مربوطه در جدول ۳ ارائه شده‌است.

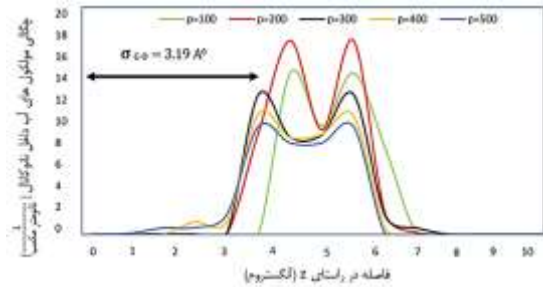
جدول ۳- معادلات میانگین مجذور جابجایی مربوط به اختلاف فشارهای مختلف

معادله	فشار رانش (مگاپاسکال)
$\Delta X^2 \approx 8 \times 10^{-4} t - 1521$	۱۰۰
$\Delta X^2 \approx 0.0028 t - 514$	۲۰۰
$\Delta X^2 \approx 0.0062 t - 11249$	۳۰۰
$\Delta X^2 \approx 0.0104 t - 18673$	۴۰۰
$\Delta X^2 \approx 0.0205 t - 36892$	۵۰۰

میزان ضریب نفوذپذیری مولکول‌های آب به داخل نانوکanal با استفاده از معادلات جدول ۳ محاسبه شده و در شکل (۹) گزارش شده‌است. مطابق شکل (۱۰)، با افزایش اختلاف فشار دو سر نانوکanal، ضریب نفوذپذیری افزایش می‌یابد. این می‌تواند به این معنی باشد که مولکول‌های آب از داخل مخازن به صورت آسان‌تری وارد نانوکanal می‌شوند؛ بنابراین افزایش دبی در فشارهای بیشتر را می‌توان به دو عامل نسبت داد. اول وجود نیروی رانش بیشتر برای غلبه بر اصطکاک میان دیواره کانال و مولکول‌های آب و دوم افزایش ضریب نفوذپذیری آب در فشارهای بالاتر.

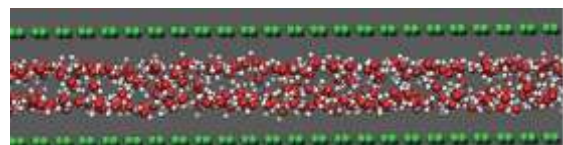


شکل ۱۰- نفوذپذیری مولکول‌های آب به داخل نانوکanal در فشارهای رانش مختلف



شکل ۸- تغییرات چگالی مولکول‌های آب در راستای z داخل نانوکanal در فشارهای رانش مختلف

نانو کانال گرافن دارد. فاصله‌ی بین اولین لایه که بیشترین تجمع مولکول‌های آب در آن قرار دارد، با صفحه گرافن حدود ۳٫۱۹ آنگستروم است که این عدد، فاصله صفر پتانسیل در معادله لنارد - جونز بین مولکول‌های اکسیژن و کربن است. طبق تعاریف، در این فاصله مولکول‌های اکسیژن و کربن در حالت تعادل نسبت به هم قرار دارند و در فواصل نزدیک‌تر از این مقدار، دافعه رخ داده و در فواصل بیش از آن جاذبه بین اتم‌ها ایجاد می‌شود. در نمودار به‌وضوح مشخص است که هیچ لایه‌ی آبی در فواصل نزدیک‌تر مجاور دیواره گرافن تشکیل نشده‌است. در تمام اختلاف فشارهای متفاوت، مولکول‌های آب در دولایه تجمع بیشتری دارند که این تجمع‌ها در فاصله‌ی صفر پتانسیل رخ داده‌است و مابقی مولکول‌های آب در بین این دولایه با تجمع کمتری در حرکت هستند. در شکل (۹) نحوه حرکت مولکول‌های آب در کانال گرافن مشاهده می‌شود.



شکل ۹- حرکت مولکول‌های آب در کانال گرافن که به صورت دولایه مجزا قابل تشخیص است (حرکت لایه‌ای). ذرات سبز رنگ اتم‌های گرافن و ذرات سفید و قرمز اتم‌های اکسیژن و هیدروژن متعلق به مولکول آب را نشان می‌دهد.

در اینجا تغییرات فشار بر نفوذپذیری بررسی می‌شود. مطالعات قبلی نشان داده که انتشار آب در نانوکanal‌ها همانند نانولوله‌ها، با پرش مولکول‌های آب از یک مکان به مکان دیگر تحقق می‌یابد [۲۸]. با کاهش نظم مولکول‌های آب، مولکول‌های آب محدودیت کمتری را در حین حرکت تجربه می‌کنند؛ بنابراین می‌توان نرخ پرش بیشتری را انتظار داشت که این امر به حرکت آن‌ها به داخل نانوکanal کمک

¹ Diffusion coefficient

گرفته‌شده است (ابعاد به آنگستروم است).

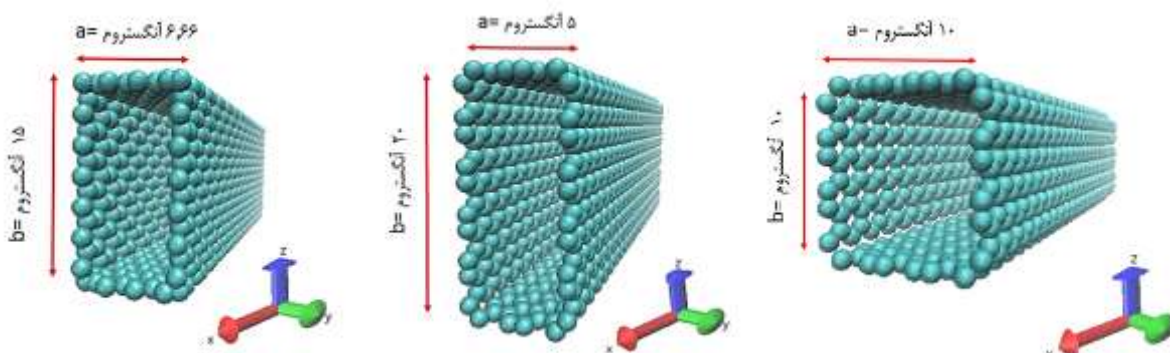
$$1- \quad a=10, b=10, \frac{a}{b}=1$$

$$2- \quad a=5, b=20, \frac{a}{b}=\frac{1}{4}$$

$$3- \quad a=6.66, b=15, \frac{a}{b}=\frac{9}{4}$$

با ایجاد هندسه نانوکانال‌های مختلف مطابق با ابعاد یادشده و بدون تغییر سایر شرایط حاکم بر مسئله که در قسمت‌های قبلی مطرح‌شد، خروجی‌های مربوط به خواص جریان مولکول‌های آب بررسی خواهد شد. این شبیه‌سازی‌ها در اختلاف فشار ۲۰۰ مگا پاسکال انجام شده‌است.

در این قسمت، ابعاد سطح مقطع نانوکانال با این شرط که مساحت مقطع ورودی نانوکانال ثابت بماند، تغییر می‌یابد. طبق توضیحات قبل، ابعاد سطح مقطع ورودی کانال در هندسه اصلی، 10×10 (آنگستروم) تعریف شد؛ بنابراین سطح مقطع ورودی کانال ۱۰۰ آنگستروم مربع به دست می‌آید. اگر a عرض نانوکانال در راستای محور y و b ارتفاع نانوکانال در راستای محور z در نظر گرفته شود، با شرط ثابت بودن سطح مقطع به میزان ۱۰۰ آنگستروم مربع، سه نسبت منظر (a/b) زیر مطابق با شکل (۱۱) در نظر



الف- هندسه مقطع نانوکانال با نسبت اضلاع

ب- هندسه مقطع نانوکانال با نسبت اضلاع

ج- هندسه مقطع نانوکانال با نسبت اضلاع

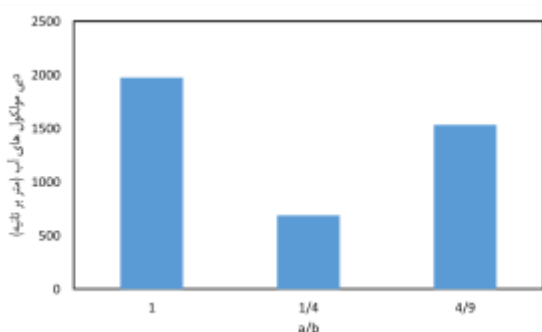
$$a/b=1$$

$$a/b=1/4$$

$$a/b=9/4$$

شکل ۳- هندسه مقطع نانوکانال با نسبت اضلاع مختلف

هر هندسه، در شکل (۱۲) آورده شده‌است.



شکل ۴- دبی مولکول‌های آب داخل نانوکانال در هندسه‌های مختلف

همان‌گونه که از شکل (۱۲) مشخص است، در حالت $a/b=1$ ، بیشترین میزان دبی عبوری مولکول‌های آب رخ می‌دهد. بعد از آن بیشترین دبی مربوط به $a/b=9/4$ و در نهایت حالت $a/b=1/4$ است. در حقیقت با توجه به ابعاد هندسی سه مدل بررسی شده، محیط پیرامونی سطح مقطع هندسه در حالت $a/b=1$ نسبت به $a/b=9/4$ و آن هم نسبت به $a/b=1/4$ کمتر است. در واقع، مقدار مساحت دیواره جامد

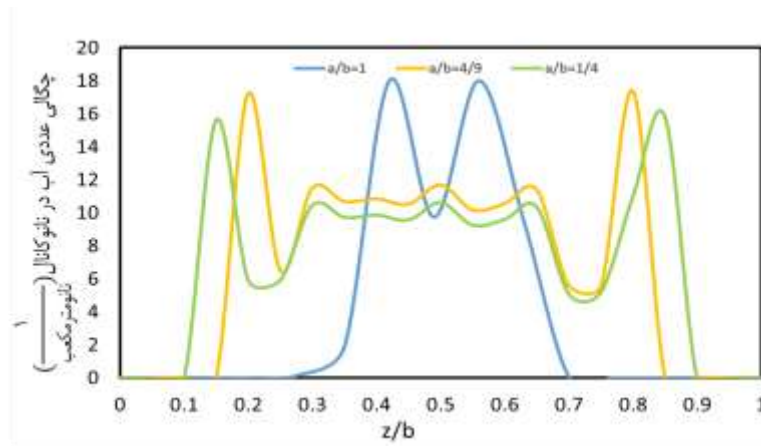
در این قسمت اثر تغییر نسبت منظر هندسی کانال بر دبی مولکول‌های آب بررسی می‌شود. با توجه به رابطه ۴، به‌منظور محاسبه جریان عبوری مولکول‌های آب از داخل نانو کانال ابتدا به بررسی تعداد و سرعت مولکول‌های آب در نانو کانال، در سه هندسه مدنظر مبادرت می‌شود. متوسط زمانی تعداد مولکول‌های آب داخل نانوکانال بعد از همگرایی مسئله، در جدول ۴ درج شده است.

جدول ۴- متوسط تعداد مولکول‌های آب داخل نانو کانال در

هندسه‌های مختلف

تعداد مولکول‌های آب داخل نانوکانال	a/b
۱۸۲	۱
۱۸۶	۱/۴
۱۸۳	۴/۹

همان‌طور که از جدول ۴ مشاهده می‌شود، تعداد مولکول‌های آب در سه هندسه مختلف، تفاوت قابل‌توجهی ندارد. با توجه به نتایج فوق و پس از محاسبه جمع سرعت مولکول‌های آب در کانال، میزان دبی مولکول‌های آب برای



شکل ۵- چگالی مولکول‌های آب در ۳ هندسه مختلف

مولکول‌های آب به صورت تقریباً یکنواخت در فاصله‌ی بین این دولایه جریان دارند. در نمودار مربوط به کانال با ضریب منظر $a/b=4/9$ ، به دلیل کمتر شدن فاصله دیوار بالا و پایین در راستای z با یکدیگر و مؤثرتر شدن اثر دو دیواره جامد، میزان حداکثر چگالی از حالت $a/b=1/4$ بیشتر شده است، اما مشابه نمودار حالت قبل، سایر مولکول‌های آب در بین دولایه‌ی مذکور به صورتی تقریباً یکنواخت، جریان دارند. در هندسه با ضریب منظر $a/b=1$ که دارای کمترین ارتفاع در جهت z و در نتیجه بیشترین تأثیر دیواره‌ها بر مولکول‌های سیال است، نظم اعمال شده توسط دیواره جامد بر سیال، باعث ایجاد ساختار کاملاً لایه‌ای برای مولکول‌های سیال شده است. این موضوع به نوبه خود سبب کاهش برخوردهای نامنظم مولکولی سیال و کاهش اتلاف انرژی ناشی از این برخوردها می‌شود. در نتیجه برای ایجاد یک جریان مشخص نیروی رانش کمتری نیاز است. به همین دلیل است که در شکل (۱۲) بیشترین دبی عبوری (در یک اختلاف فشار ثابت) متعلق به کانال مربعی است.

۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش مسئله جریان تحت فشار آب از داخل نانوکanal متشکل از دیواره‌های گرافنی با جزئیات مولکولی و به وسیله روش دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. شبیه‌سازی‌های مولکولی نشان داد توزیع چگالی سیال در نانوکanal، بر خلاف جریان‌های بزرگ مقیاس، به صورت غیر یکنواخت است. این غیریکنواختی به دلیل تأثیر نیروهای دیواره گرافنی کانال بر مولکول‌های سیال بوده و باعث تمایل مولکول‌های سیال به حرکت در فاصله‌های مشخصی از دیوار می‌شود (حرکت لایه‌ای). نتایج نشان داد هنگامی که دیواره‌های گرافنی به یکدیگر

نانوکanal‌ها که با مولکول‌های سیال در اندرکنش است و در نتیجه نیروی مقاوم به حرکت اعمال شده از طرف مولکول‌های جامد دیوار به آب عبوری به ترتیب از کم به زیاد نیز به ترتیب یاد شده است. اما این تنها دلیل افزایش دبی در هندسه مربعی نیست. افزایش دبی می‌تواند به دلیل تشدید حرکت لایه‌ای سیال در هندسه مربعی باشد. این مسئله در ادامه بررسی می‌شود.

در این قسمت اثر تغییر نسبت منظر هندسی کانال بر چگالی مولکول‌های آب بررسی می‌شود. نمودار چگالی در راستای محور Z ، برای سه هندسه مورد اشاره در شکل (۱۳) رسم شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، توزیع چگالی دارای ساختارهای قله‌ای شکل است. این مسئله نشان از پدیده لایه‌ای شدن سیال در هنگام عبور از داخل نانوکanal، به علت تأثیر گرفتن از نظم دیواره جامد است. یعنی در فاصله خاصی از دیواره جامد که بیشترین نیروی جاذبه بین مولکولی میان اتم‌های جامد و سیال وجود دارد، بیشترین تجمع مولکولی به وجود می‌آید. به گونه‌ای که گویی مولکول‌های سیال تمایل دارند، به صورت منظم و زنجیروار در لایه‌های مشخصی که دارای فاصله معینی از دیواره جامد است، جریان داشته باشند. همان‌گونه که از نمودارهای شکل (۱۳) مشخص است، ارتفاع قله‌های چگالی در نمودار $a/b=1$ بیش از نمودار $a/b=4/9$ و آن‌هم بیش از نمودار $a/b=1/4$ است. بدین معنی است که اثر دیواره در آرایش سیال در هندسه با ضریب منظر $a/b=1$ شدیدترین و در نمودار $a/b=1/4$ ضعیف‌ترین حالت را دارد. در هندسه با ضریب منظر $a/b=1/4$ که ارتفاع کانال در جهت z از دو کانال دیگر بیشتر است، دولایه از مولکول‌های آب در فاصله تعادلی با اتم‌های دیواره تشکیل شده است و مابقی

برابر جریان بیشتری را از خود عبور می‌دهد. نتایج شبیه‌سازی‌ها همچنین نشان داد که در یک مساحت سطح مقطع مشخص، دبی نانوکanal مربعی $\frac{2}{8}$ بیش از هنگامی است که نسبت اضلاع کانال ۴ به ۱ باشد. این بیشتر بودن دبی، نه فقط به دلیل کمتر بودن محیط هندسه مربعی نسبت به مقطع مستطیلی است بلکه علاوه بر آن به دلیل تشدید حرکت لایه‌ای سیال در هندسه مربعی و در نتیجه افزایش نظم حرکتی مولکول‌های سیال، کاهش برخوردهای بین مولکولی و کاهش اتلاف انرژی است.

نزدیک‌تر هستند، غیریکنواختی توزیع چگالی و تشخیص لایه‌های حرکتی سیال واضح‌تر می‌شود. نتایج همچنین نشان داد، تغییر اختلاف فشار در دوسر نانوکanal و در نتیجه اعمال نیرو به مولکول‌های آب، به صورت مؤثری موجب افزایش میزان آب عبوری از نانوکanal می‌شود. به طوری که با ۵ برابر کردن اختلاف فشار میان دوسر کانال، دبی عبوری بیش از ۴۵ برابر افزایش می‌یابد. همچنین مقایسه عملکرد این نانوکanal با نانولوله‌های کربنی نشان می‌دهد نانوکanal پیشنهادی در پژوهش حاضر در شرایط یکسان حداقل $\frac{2}{5}$

مراجع

- [1] M. Shannon, P. Bohn, M. Elimelech, J. Georgiadis, B. Marinas, and A. Mayes, "Science and technology for water purification in the coming decades", *Nature*, Vol. 452, March 2008, pp. 301–310.
- [۲] حدیقه محمدی، ابوالفضل اکبرپور و علی باقری، «مدل‌سازی اندرکنش منابع آب و ارزش افزوده دشت بیرجند»، نشریه مدل‌سازی در مهندسی، دوره ۱۶، شماره ۵۵، زمستان ۱۳۹۷، صفحه ۲۷۹-۲۹۸.
- [3] A. Nicolai, B. Sumpter, and V. Meunier, "Tunable water desalination across graphene oxide framework membranes", *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 16, No. 18, 2014, pp. 8646-54.
- [۴] احسان فتوحی بافقی، نادر رهبر و جواد ابوالفضل اصفهانی، «بهسازی تولید در آب‌شیرین‌کن خورشیدی لوله‌ای با استفاده از مدل‌سازی عددی»، نشریه مدل‌سازی در مهندسی، دوره ۱۱، شماره ۳۳، تابستان ۱۳۹۲، صفحه ۴۵-۵۶.
- [5] S. Dervin, D. Dionysiou, and S. Pillai, "2D nanostructures for water purification: graphene and beyond", *Nanoscale*, Vol. 8, No. 8, 2016, pp.15115-31.
- [۶] مریم نیری و مهدیه نیری، «طراحی و شبیه‌سازی مدار جمع‌کننده پنج ارزشی جدید مبتنی بر ترانزیستور نانو نوار گرافن»، نشریه مدل‌سازی در مهندسی، دوره ۱۱، شماره ۳۳، تابستان ۱۳۹۲، صفحه ۴۵-۵۶.
- [7] C. Sun, M. Liu, and B. Bai, "Molecular simulations on graphene-based membranes", *Carbon*, Vol. 153, No. 1, 2019, pp. 481-94.
- [8] G. Cicero, J. Grossman, E. Schwegler, F. Gygi, and G. Galli, "Water confined in nanotubes and between graphene sheets: A first principle study", *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 130, No. 13, February 2008, pp. 1871-8.
- [9] D. Cohen-Tanugi, and J. Grossman, "Water desalination across nanoporous graphene", *Nano letters*, Vol. 12, No. 7, July 2012, pp. 3602-8.
- [10] B. Liu, R. Wu, J. Baimova, H. Wu, A. Law, S. Dmitriev, and K. Zhou, "Molecular dynamics study of pressure-driven water transport through graphene bilayers", *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 18, No. 3, 2016, pp. 1886-1896.
- [11] R. Devanathan, D. Chase-Woods, Y. Shin, and D. Gotthold, "Molecular dynamics simulations reveal that water diffusion between graphene oxide layers is slow", *Scientific reports*, Vol. 6, No. 1, July 2016, pp. 1-8.
- [12] C. Sun, M. Liu, and B. Bai, "Molecular simulations on graphene-based membranes", *Carbon*, Vol. 153, November 2016, pp. 481-94.
- [13] W. Cao, J. Wang, and M. Ma, "Water diffusion in wiggling graphene membranes", *The journal of physical chemistry letters*, Vol. 10, No. 22, November 2019, pp. 7251-8.
- [14] Z. Zhao, R. Zhou, and C. Sun, "Molecular dynamics study of water diffusivity in graphene nanochannels", *International Journal of Thermophysics*, Vol. 41, No. 6, June 2020, pp. 1-2.
- [15] C. Sun, R. Zhou, Z. Zhao and B. Bai, "Unveiling the hydroxyl-dependent viscosity of water in graphene oxide nanochannels via molecular dynamics simulations", *Chemical Physics Letters*, Vol. 778, September 2021, pp. 138808.

- [16] C. Chen, L. Jia, J. Li, L. Zhang, L. Liang, E. Chen, Z. Kong, X. Wang, W. Zhang, JW. Shen, "Understanding the effect of hydroxyl/epoxy group on water desalination through lamellar graphene oxide membranes via molecular dynamics simulation", *Desalination*, Vol. 491, October 1 2020, pp. 114560.
- [17] B. Zheng, Y. Tian, S. Jia, X. Zhao, H. Li, "Molecular dynamics study on applying layered graphene oxide membranes for separating cadmium ions from water", *Journal of Membrane Science*, Vol. 603, May 2020, pp. 117996.
- [18] S. Plimpton, "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics", *Journal of Computational Physics*, Vol. 117, No. 1, 1995, pp. 1-19.
- [19] W. Jorgensen, J. Madura, and C. Swenson, "Optimized intermolecular potential functions for liquid hydrocarbons", *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 106, No. 22, October 1984, pp. 6638-46.
- [20] J. MacKerell, D. Bashford, M. Bellott, and R. Dunbrack, J. Evanseck, M. Field, S. Fischer, J. Gao, H. Guo, S. Ha, and D. McCarthy, "All-atom empirical potential for molecular modeling and dynamics studies of proteins", *The journal of physical chemistry B*, Vol. 102, No. 18, April 1998, pp. 3586-616.
- [21] D. Tildesley, and M. Allen, *Computer simulation of liquids*, Clarendon Press, 1987.
- [22] F. Zhu, E. Tajkhorshid, and K. Schulten, "Pressure-induced water transport in membrane channels studied by molecular dynamics", *Biophysical journal*, Vol. 83, No. 1, July 2002, pp. 154-160.
- [23] P. Waggoner, and H. Craighead, "Micro-and nanomechanical sensors for environmental, chemical, and biological detection", *Lab on a Chip*, Vol. 7, No. 10, 2007, pp. 1238-1255.
- [24] L. Wang, R. Dumont, and J. Dickson, "Nonequilibrium molecular dynamics simulation of water transport through carbon nanotube membranes at low pressure", *The Journal of chemical physics*, Vol. 137, No. 4, July 2012, pp. 044102.
- [25] J. Goldsmith, and C. Martens, "Molecular dynamics simulation of salt rejection in model surface-modified nanopores", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, Vol. 1, No. 2, January 2010, pp. 528-35.
- [26] J. Hansen, and I. McDonald, *Theory of simple liquids: with applications to soft matter*, Academic Press, 2013.
- [۲۷] مهدی صاحبی بهنمیری و احمدرضا عظیمیان، «بررسی مکانیزم جریان خزش گرمایی در نانولوله‌ها به وسیله روش دینامیک مولکولی»، *مهندسی مکانیک مدرس*، دوره ۱۵، شماره ۱۰، زمستان ۱۳۹۴، صفحه ۲۲۵-۲۳۲.
- [28] A. Berezhkovskii, and G. Hummer, "Single-file transport of water molecules through a carbon nanotube", *Physical review letters*, Vol. 89, No. 6, July 2002, pp. 064503.
- [29] B. Liu, R. Wu, J. Baimova, H. Wu, A. Law, S. Dmitriev, and K. Zhou, "Molecular dynamics study of pressure-driven water transport through graphene bilayers", *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 18, No. 3, 2016, pp. 1886-1896.