

KHẢO SÁT KHẢ NĂNG TÁCH CỦA TIA CHẤT LỎNG DƯỚI DẠNG TỈ LỆ NANO ĐỐI VỚI TẤM KIM LOẠI CÓ ĐƯỜNG KÍNH LỖ PHUN KHÁC NHAU

INVESTIGATING FOR SEPARATION ABILITY OF NANOSCALE LIQUID JETS FROM METAL PLATE WITH THE DIFERENT HOLE DIAMETERS

Nguyễn Văn Quảng^{1,*}, Phùng Xuân Sơn¹

TÓM TẮT

Để khảo sát khả năng tách của tia chất lỏng nano ra khỏi bề mặt tấm kim loại, phương pháp động học phân tử thì được sử dụng để mô phỏng cho quá trình phun của chất lỏng qua những miệng lỗ với đường kính khác nhau. Sơ đồ mô phỏng cấu tạo gồm lỗ phun dạng hình tròn được thiết kế ở trên nắp thiết bị bằng kim loại, tấm đẩy bằng kim loại ở dưới đáy của thiết bị và những phân tử chất lỏng được chứa đầy ở bên trong thiết bị. Phần mềm LAMMPS và C++ thì được sử dụng để làm công cụ cho việc mô phỏng và phân tích thông số. Kết quả mô phỏng chỉ ra rằng, với những lỗ có đường kính nhỏ hơn hoặc bằng 27,5 Å thì hầu như toàn bộ chất lỏng được phun ra khỏi lỗ để tạo thành tia dạng nano trên bề mặt nắp thiết bị, tuy nhiên những tia này không thể tách ra khỏi bề mặt tấm kim loại cho dù tác dụng lực đẩy có độ lớn bất kỳ lên tấm đẩy. Ngoài ra, khi tăng đường kính lỗ thì những tia nano cũng được hình thành và sẽ tách khỏi bề mặt nắp kim loại. Thông qua nghiên cứu này, chúng ta có thể quan sát rõ ràng và sâu sắc hơn về quá trình động học của phun chất lỏng.

Từ khóa: Mô phỏng; phân tử chất lỏng; khả năng tách của tia chất lỏng nano; đường kính lỗ.

ABSTRACT

In order to investigate for the separation ability of nanoscale liquid jets from the metal plate with the different hole diameters, the molecular dynamics method is used to simulate for the fluid nanojet ejection process through the different hole diameters. The compersition of simulation equipment diagram includes the circle hole at the center of the upper plate, the push plate at the equipment bottom and the fluid moleculars at the between of two plate. The LAMMPS software and C++ code are used for simulating and analysis the data. The simulation result shows that the hole diameters of 27.5 Å or smaller which almost all of nanofluid molecular eject out to form the jet but this jet cannot separate from the upper plate surface under any push force on the bottom plate. However, when increasing the hole diameter wich the nanofluid jet separates out from the upper plate surface. Through this research, we have a deep and clear sights about the ejection process dynamic of nanofluid.

Keywords: Simulation; Fluid molecular; Separation ability of nano jet; Hole diameters.

¹Khoa Cơ khí, Trường Đại học Công nghiệp Hà Nội

*Email: nguyenvanquang.kuas@gmail.com

Ngày nhận bài: 09/01/2018

Ngày nhận bài sửa sau phản biện: 26/03/2018

Ngày chấp nhận đăng: 25/04/2018

1. GIỚI THIỆU

Công nghệ phun chất lỏng thì được ứng dụng trong nhiều ngành công nghiệp khác nhau như ngành công nghiệp in, sản xuất các bo mạch của bảng mạch điện tử và các đầu phun có độ chính xác cao. Trong quá trình phun chất lỏng, sự hình thành tia chất lỏng và khả năng tách của chúng để tạo thành những giọt chất lỏng dưới dạng nano thì được qua tâm xem xét cho việc thiết kế cũng như vận hành thiết bị phun.

Phương pháp mô phỏng động lực học phân tử được ứng dụng để thực hiện cho việc mô phỏng của quá trình phun chất lỏng đối với những lỗ phun có đường kính từ 2 đến 6 nm [1,2].

Sự ảnh hưởng của kích cỡ lỗ phun, nhiệt độ, lực nén và loại của chất lỏng nghiên cứu cũng được điều tra cho quá trình phun và sự tạo thành giọt chất lỏng dạng nano [3,4].

Phương pháp thí nghiệm sử dụng để nghiên cứu cho quá trình phun của chất lỏng và ảnh hưởng của các yếu tố đến sự hình thành tia chất lỏng thì được trình bày trong [5,6].

Đa số những nghiên cứu ở trên đều có liên quan đến những công việc như mô phỏng và thực nghiệm của quá trình phun chất lỏng. Tuy nhiên, việc tìm hiểu về ảnh hưởng của đường kính lỗ phun đến khả năng tách của tia chất lỏng để tạo thành những giọt chất lỏng dạng nano thì vẫn chưa được điều tra. Do đó, tác giả dựa trên một nghiên cứu trước đây [7] để làm tiền đề và phát triển cho nghiên cứu này.

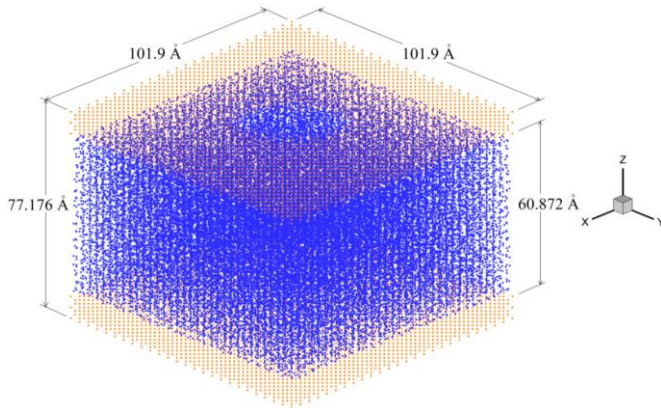
2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Cấu tạo của mô hình

Mô hình phân tử được thiết kế có dạng hình hộp lập phương như hình 1. Những phân tử nước nằm ở giữa hai tấm kim loại đỉnh và đáy. Điều kiện biên được sử dụng để giới hạn các phân tử chất lỏng thay cho các tấm kim loại xung quanh hộp. Kích thước của hộp lần lượt theo chiều cao, dài và rộng là 77,176, 101,9 và 101,9 Å. Số lượng phân tử nước dùng cho nghiên cứu là 20.691 có mật độ là 0,999972 g/cm³ và được sắp xếp ban đầu theo mạng lưới tinh thể khối lập phương với hằng số lưới là $a = 3,104$ Å.

Vật liệu dùng làm những tấm kim loại đỉnh và đáy là những nguyên tử vàng (Au), chúng được cấu tạo gồm 5 lớp với chiều dày mỗi tấm là 8,152 Å. Tấm đáy được thiết kế có thể dịch chuyển được theo chiều thẳng đứng và cấu tạo gồm 6.503 nguyên tử Au. Tấm ở đỉnh hộp được thiết kế cố định với đường kính lỗ hình tròn ở tâm tấm và cấu tạo gồm 6.200, 6.144, 6.060 nguyên tử Au tương ứng với đường kính lỗ là 25; 27,5 và 30 Å.

Nghiên cứu này sử dụng phần mềm LAMMPS và C++ để mô phỏng.



Hình 1. Mô hình phân tử

2.2. Sự tương tác giữa các nguyên tử

Phương pháp động lực học phân tử thì được sử dụng để mô phỏng quá trình phun của phân tử nước, cũng như động học của tia chất lỏng dạng nano. Mô hình điện thế đặc trưng được ứng dụng để diễn tả sự tương tác giữa những phân tử nước với nhau và giữa phân tử nước với nguyên tử vàng. Giá trị cân bằng đối với chiều dài và góc độ liên kết của phân tử nước lần lượt là 1,0 Å và 104,5°.

Trong mô hình phân tử [8] diễn tả sự liên kết cũng như tương tác giữa phân tử với nhau hay giữa phân tử với nguyên tử. Phương trình điện thế cho sự tương tác như sau:

$$\begin{aligned}
 U &= U_{\text{bond}} + U_{\text{bend}} + U_{\text{vdw}} + U_{\text{els}} \\
 &= \sum K_b^{\text{OH}} (r_i - r_{\text{eq}})^2 + \sum K_\theta^{\text{HOH}} (\theta_i - \theta_{\text{eq}})^2 \\
 &+ \sum \left[A_{\text{sc}} \epsilon_{ij} \left(\frac{r_0^{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2\epsilon_{ij} \left(\frac{r_0^{ij}}{r_{ij}} \right)^6 - S_{\text{vdw}}(r_{ij}) \right] \\
 &+ \sum \left[\frac{q^i q^j}{r_{ij}} - S_{\text{els}}(r_{ij}) \right]
 \end{aligned} \quad (1)$$

Với $S_{\text{vdw}}(r_{ij})$ được tính theo công thức:

$$S_{\text{vdw}}(r_{ij}) = \begin{cases} U_r - U_c - (r - r_c) \left(\frac{dU}{dr} \right)_{r_c} & \text{for } r < r_c \\ 0 & \text{for } r \geq r_c \end{cases} \quad (2)$$

và $S_{\text{els}}(r_{ij})$ thì theo công thức:

$$S_{\text{els}}(r_{ij}) = (r - r_c) \left[\frac{q^i q^j}{r_c^2} \right] \quad (3)$$

Trong đó A_{sc} , K_b^{OH} , K_θ^{HOH} , r_i , r_{eq} , r_{ij} và r_c là những hệ số điều chỉnh về khoảng cách, liên kết góc, chiều dài liên kết và cân bằng O-H, góc liên kết và cân bằng H-O-H và khoảng cách tương tác giữa những nguyên tử.

Sự tương tác giữa những phân tử nước và nguyên tử vàng được diễn tả bởi những hàm điện thế như sau:

$$U_{\text{Au-H}_2\text{O}} = U_{\text{Au-O}}(r_{\text{Au-O}}) + U_{\text{Au-H}_1}(r_{\text{Au-H}_1}) + U_{\text{Au-H}_2}(r_{\text{Au-H}_2}) \quad (4)$$

Với

$$U_{\text{Au-O}}(r) = S_2(r) D_0 [\exp(-2\beta_0(r-r_{e1})) - 2\exp(-2\beta_0(r-r_{e1}))] \quad (5)$$

Và

$$U_{\text{Au-H}}(r) = \gamma D_0 \exp(-2\beta_H(r-r_{e2})) \quad (6)$$

Trong đó hàm $S_2(r)$ có dạng:

$$S_2(r) = \begin{cases} 1 & \text{for } r \leq r_{\text{on}} \\ \frac{(r_{\text{off}}^2 - r^2)^2 (r_{\text{off}}^2 + 2r^2 - 3r_{\text{on}}^2)}{(r_{\text{off}}^2 - r_{\text{on}}^2)^3} & \text{for } r_{\text{on}} < r < r_{\text{off}} \end{cases} \quad (7)$$

Với r_{on} và r_{off} là giá trị bắt đầu và kết thúc của hàm tương ứng với 7,0 và 11,0 Å.

2.3. Sơ đồ mô phỏng

Nghiên cứu này thực hiện 3 trường hợp mô phỏng với 3 đường kính lỗ phun khác nhau. Mỗi phân tử được gán vận tốc ban đầu ngẫu nhiên nhờ có nhiệt độ hệ thống là 310K. Thời gian tác động để những phân tử nước phân bố đạt tới mức cân bằng ở trạng thái ngẫu nhiên là 10,000fs. Sau khi phân tử đạt trạng thái phân bố cân bằng ngẫu nhiên, dưới đáy của thiết bị chịu tác dụng một lực nén sao cho phân tử nước được phun ra khỏi miệng lỗ thiết bị. Độ lớn của lực nén đối với từng trường hợp là $9,25 \times 10^{-10}$; $9,0 \times 10^{-10}$ và $7,5 \times 10^{-10}$ (N) lần lượt tương ứng với đường kính lỗ thiết bị là 25; 27,5 và 30 (Å).

Các trường hợp nghiên cứu như trong bảng 1. Mỗi trường hợp được thực hiện trong thời gian là 150.000 (fs).

Bảng 1. Các trường hợp nghiên cứu

| Thứ tự | Đường kính lỗ (Å) | Nhiệt độ (K) | Lực nén (N) |
|--------|-------------------|--------------|------------------------|
| 1 | 25 | 310 | $9,25 \times 10^{-10}$ |
| 2 | 27,5 | 310 | $9,0 \times 10^{-10}$ |
| 3 | 30 | 310 | $7,5 \times 10^{-10}$ |

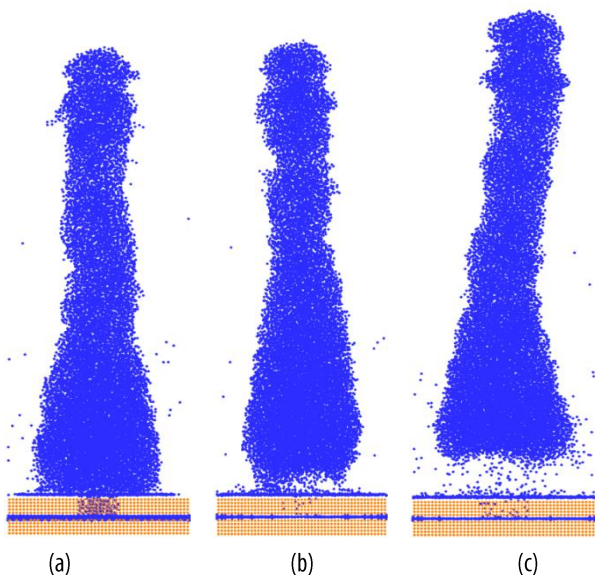
3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU

3.1. Kết quả quá trình phun tia nước dạng nano đối với những đường kính lỗ khác nhau

Hình ảnh những tia nước dạng nano đối với những lỗ có đường kính khác nhau ở 150.000fs thì như hình 2. Hình 2(a), (b) và (c) là những tia nước tương ứng với những lỗ có đường kính 25; 27,5 và 30 Å ở 150.000fs. Với những đường kính lỗ này thì lực nén nhỏ nhất tác dụng lên tấm kim loại đáy để phân tử nước có thể phun hết ra khỏi thiết bị lần lượt là $9,25 \times 10^{-10}$; $9,0 \times 10^{-10}$ và $7,5 \times 10^{-10}$ N. Trong đó, với trường hợp lỗ có đường kính 25 và 27,5 Å thì những phân tử nước sau khi phun ra khỏi lỗ tạo thành tia nước, tuy nhiên những tia này không thể tách ra khỏi bề mặt tấm kim loại

để tạo thành giọt nước dạng nano. Ngược lại với đường kính lỗ là 30Å thì tia nước được tách ra khỏi bề mặt tấm kim loại để tạo thành những giọt nước dạng nano.

Như vậy khả năng phun của tia nước dạng nano phụ thuộc vào đường kính của lỗ phun. Đường kính lỗ 27,5Å là trường hợp rõ ràng nhất khi tia nước gần như bị tách ra để tạo thành những giọt nước dạng nano, tuy nhiên tia nước này không tách ra được khỏi bề mặt tấm kim loại mà lại bị chuyển động ngược lại. Do đó hai đường kính lỗ phun là 27,5 và 30Å được sử dụng cho việc so sánh để chứng minh khả năng tách của tia nước không phụ thuộc vào thời gian phun cũng như độ lớn của lực nén tác dụng lên đáy thiết bị phun.



Hình 2. Hình ảnh tia nước dạng nano ở 150.000 fs đối với lỗ có đường kính là (a) 25 Å; (b) 27,5 Å và (c) 30 Å.

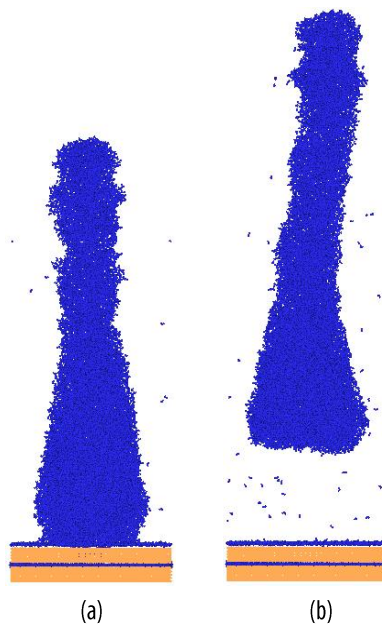
3.2. Các bằng chứng cho khả năng tách của tia nước nano

3.2.1. Ảnh hưởng của thời gian phun đến khả năng tách của tia nước nano

Hình 3 (a) và (b) là tia nước dạng nano ở 200.000 fs đối với lỗ có đường kính là (a) 27,5 Å và (b) 30 Å dưới tác dụng của lực nén tương ứng là $9,0 \times 10^{-10}$ và $7,5 \times 10^{-10}$ N. Chúng ta thấy rằng ở cùng điều kiện về đường kính lỗ, lực nén và nhiệt độ nhưng tăng thời gian phun thì khả năng tách của tia nước càng thể hiện rõ hơn.

Đối với đường kính lỗ 30 Å, giọt nước sau khi tách ra khỏi tia nước nano thì theo thời gian chúng càng phun ra xa bề mặt tấm kim loại như trong hình 3 (b). Nguyên nhân là do lực phun của giọt nước để thắng trọng lượng của chính nó cũng như lực hút giữa phân tử nước và nguyên tử vàng của tấm kim loại.

Trong khi đó, với đường kính lỗ 27,5 Å hoặc nhỏ hơn thì tia nước không những không thể tách ra để tạo thành giọt nước dạng nano mà sau khi phun ra đạt độ cao nhất định chúng di chuyển ngược lại bề mặt tấm kim loại. Nguyên nhân của hiện tượng này là do lực phun của tia nước không đủ lớn để thắng lại lực hút giữa các phân tử nước cũng như lực hút giữa các phân tử nước và nguyên tử vàng.

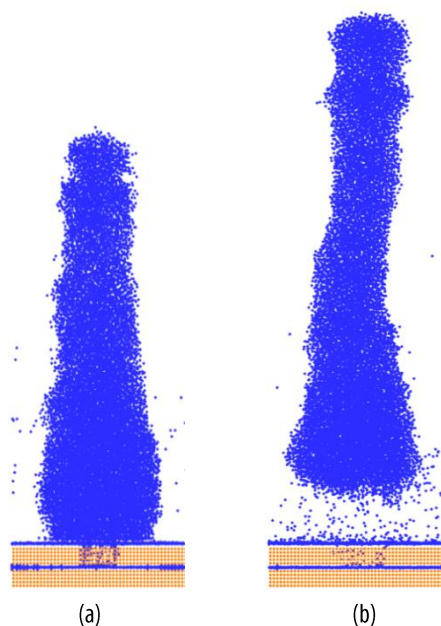


Hình 3. Hình ảnh tia nước dạng nano ở 200.000 fs đối với lỗ có đường kính là (a) 27,5 Å và (b) 30 Å.

Như vậy ta có thể kết luận rằng thời gian phun không ảnh hưởng đến khả năng tách của tia nước khỏi bề mặt tấm kim loại để tạo thành giọt nước dạng nano.

3.2.2. Ảnh hưởng của lực nén đến khả năng tách của tia nước nano

Hình 4 (a) và (b) là hình ảnh tia nước ở 150.000 fs đối với lỗ có đường kính là (a) 27,5 Å và (b) 30 Å dưới tác dụng của lực nén tương ứng là $11,0 \times 10^{-10}$ và $9,5 \times 10^{-10}$ N. Khi ở cùng điều kiện về đường kính lỗ, thời gian và nhiệt độ nhưng tăng độ lớn của lực nén thì giọt nước vẫn tiếp tục phun ra xa đối với đường kính lỗ 30 Å như hình 4 (b).



Hình 4. Hình ảnh tia nước dạng nano ở 150.000 fs đối với lỗ có đường kính (a) 27,5 Å và (b) 30 Å tương ứng với lực nén là $11,0 \times 10^{-10}$ và $9,5 \times 10^{-10}$ N.

Tương tự như trường hợp trên, đối với đường kính lỗ 27,5 Å thì khi tăng độ lớn tác dụng của lực nén thì tia nước cũng không thể tách ra khỏi bề mặt tấm kim loại để phun ra xa. So sánh giữa trường hợp hình 4 (a) với hình 2 (b), vẫn ở cùng thời gian phun nhưng khác nhau về độ lớn của lực nén tác dụng, khi lực tác dụng lớn hơn thì quá trình phun diễn ra nhanh hơn nhưng không ảnh hưởng đến khả năng tách của tia nước để tạo thành giọt. Trong trường hợp hình 4 (a), tia nước sau khi phun đạt độ cao nhất định thì chúng không tách ra được mà lại di chuyển quay trở lại bề mặt tấm kim loại. Nguyên nhân là do lực phun của tia nước yếu hơn lực liên kết giữa các phân tử nước với nguyên tử vàng của tấm kim loại.

Đây là bằng chứng để chứng minh rằng khả năng tách của tia nước khỏi bề mặt tấm kim loại không bị ảnh hưởng bởi độ lớn của lực nén tác dụng lên tấm đáy của thiết bị phun.

4. KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, phương pháp động lực học phân tử thì được sử dụng để mô phỏng cho quá trình phun của chất lỏng dưới dạng nano qua những lỗ phun có đường kính khác nhau. Từ đó có cái nhìn rõ hơn về động học của sự phun chất lỏng cũng như biết được về khả năng tách được hay không của tia để tạo thành những giọt chất lỏng dạng nano. Theo kết quả mô phỏng thì chúng ta có những kết quả như sau:

- Ở cùng điều kiện về thiết bị, chất lỏng, nhiệt độ và độ lớn của lực tác dụng, những lỗ phun có đường kính nhỏ hơn hoặc bằng 27,5 Å thì tia nước sau khi được hình thành không thể tách ra khỏi bề mặt tấm kim loại để tạo thành những giọt nước nano.

- Ngược lại, với những lỗ phun có đường kính lớn hơn hoặc bằng 30 Å thì tia nước được tách ra để tạo thành những giọt nước nano và bắn ra xa khỏi bề mặt tấm kim loại.

- Khi giữ nguyên những điều kiện ban đầu và tăng thời gian phun, cũng như tăng độ lớn của lực tác dụng, đối với những lỗ phun có đường kính nhỏ hơn hoặc bằng 27,5 Å thì tia nước không những không được tách ra mà chúng còn di chuyển ngược lại về phía bề mặt tấm kim loại sau khi chúng đạt tới độ cao nhất định.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Moseler, M. and Landman, U., 2000. "Formation, stability, and breakup of nanojets". *Science*, Vol. 289, No. 5482, pp. 1165-1170.
- [2]. Li, Y., Xu, J. and Li, D., 2010. "Molecular dynamics simulation of nanoscale liquid flows". *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 9, No. 6, pp. 1011-1031.
- [3]. Gopan, N. and Sathian, S.P., 2013. "The role of thermal fluctuations on the formation and stability of nano-scale drops". *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Vol. 432, pp. 19-28.
- [4]. Shin, D.Y., Grassia, P. and Derby, B., 2005. "Oscillatory incompressible fluid flow in a tapered tube with a free surface in an inkjet print head". *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 127, No. 1, pp. 98-109.
- [5]. Chang, K.T. and Weng, C.I., 2008. "An investigation into the structure of aqueous NaCl electrolyte solutions under magnetic fields". *Computational Materials Science*, Vol. 43, No. 4, pp. 1048-1055.
- [6]. Beulen, B., Jong, J.D., Reinten, H., Berg, M.V.D., Wijshoff, H. and Dongen, R.V., 2007. "Flows on the nozzle plate of an inkjet printhead". *Experiments in Fluids*, Vol. 42, No. 2, pp. 217-224.
- [7]. Lin, J.W. and Chu, S.X., 2008. "Molecular dynamics simulations of nanoscale water jet". *Proceedings of MNHT2008 Micro/Nanoscale heat transfer international conference, Taiwan, Taiwan*, No. MNHT2008-52044, pp. 519-524, January 6-9.
- [8]. Levitt, M., Hirshberg, M., Sharon, R., Laidig, K.E. and Daggett, V., 1997. "Calibration and testing of a water model for simulation of the molecular dynamics of proteins and nucleic acids in solution". *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 101, No. 25, pp. 5051-5061.