ME-NETT23 The 23rd Conference of the Mechanical Engineering Network of Thailand

CST-022186

การประชุมวิชาการเครือข่ายวิศวกรรมเครื่องกลแห่งประเทศไทย ครั้งที่ 23
4 – 7 พฤศจิกายน 2552 จังหวัดเชียงใหม่

การศึกษาอิทธิพลของความเรียบผิวในช่องการไหลระดับนาโนด้วยวิธีการจำลองเชิงโมเลกุล

Study of Surface Roughness Effect in Nanochannel using Molecular Dynamics

ธีรวุฒิ ล้อมลาย[1], ปราโมทย์ เดชะอำไพ[2], เอกชัย จันทสาโร[3] และ วรางค์รัตน์ จันทสาโร[1*]

[1*] ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ บางเขน กรุงเทพฯ 10900
โทร 02-942-8555 ต่อ 1829 โทรสาร 02-579-4576 อีเมล์ fengvrj@ku.ac.th

[2] ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ถนนพญาไท แขวงวังใหม่ เขตปทุมวัน กรุงเทพฯ 10330

[3] หลักสูตรวิศวกรรมเครื่องกล (การจำลองและการออกแบบ) บัณฑิตวิทยาลัยวิศวกรรมศาสตร์นานาชาติสิรินธร ไทย-เยอรมัน มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าพระนครเหนือ ถนนพิบูลสงคราม เขตบางซื่อ กรุงเทพฯ 10800

บทคัดย่อ

บทความเสนอการจำลองการไหลภายในช่องการไหลระดับนาโนเมตร (Nanochannel) ด้วยวิธีการจำลองเชิงโมเลกุล (Molecular Dynamics Simulation) โดยที่จะทำการศึกษาถึงอิทธิพลของความเรียบผิว ต่อพฤติกรรมของการไหลที่เกิดขึ้นในช่องการไหลในระดับนาโนเมตร งานวิจัยนี้จะศึกษาถึงลักษณะของการเปลี่ยนแปลงอุหภูมิที่เกิดขึ้น ต่อลักษณะความสูงของความเรียบผิวในช่องการไหลระดับนาโนเมตร ซึ่งผนังของช่องการไหลในระดับนาโนเมตรนั้นถูกสร้างด้วยอะตอมซิลิกอน ระยะระหว่างพันธะของอะตอมซิลิกอนมีขนาดความยาว 0.243 นาโนเมตร ขนาดของช่องการไหลในระดับนาโนอยู่ระหว่าง 0.95 ถึง 3.49 นาโนเมตร ของไหลภายในเป็นสารละลายของน้ำที่ประกอบไปด้วย Na^+ และ Cl^- โดยผลจากงานวิจัยนี้เพื่อที่จะเป็นแนวทางในการสร้างการทดลองในอนาคตและนำองค์ความรู้ที่ได้นำไปเป็นแนวทางในการพัฒนาประสิทธิภาพทางด้านต่างๆ ของ Micro Electro Mechanical Systems (MEMS) และ Nano Electro Mechanical Systems (NEMS)

คำหลัก: ความเรียบผิว,นาโนชาแนล,นาโนเมตร,ท่อขนาดเล็ก

Abstract

The paper aim aims to study the effect of surface roughness on the characteristics of fluid flow through a nanochannel using molecular dynamics simulation. The rate of exchange Temperature are the main characteristics to be considered. The fluid studied is water with Na^+ and Cl^- ion and the wall of the nanochannel is created by silicon atom with the length of the silicon bond of 0.234 nm. The effects of the height and the width of the roughness element on the fluid flow are studied for different widths of the nanochannels (eg. 0.95, 3.49 nm). The results from this study can be used to improve the efficiency of Nano Electro Mechanical Systems (NEMS) in the future.

Keywords: Surface roughness ,Molecular Dynamics Simulation, MD simulation, Nanochannel

1. บทนำ

ปัจจุบันวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีในปัจจุบันมีความก้าวหน้าไปอย่ารวดเร็ว จนทำให้นักวิทยาศสตร์ วิศวกร และนักวิจัยหลายสาขาต้องพยายามพัฒนาประดิษฐ์ เพื่อสร้างงานวิจัยเครื่องมือระดับจิ๋ว (MEMS and NEMS) เครื่องมือระดับจิ๋วนี้มีสามารถใช้ได้ในหลายลักษณะ ไม่ว่าจะเป็นทางด้านการแพทย์ ทางด้านวิศวกรรม ทางด้านอิเล็คทรอทนิกส์ และทางด้านอุตสาหกรรมรถยนต์ในปัจจุบัน เซลล์พลังงาน (Fuell Cell) ยกตัวอย่างเช่น ปั๊มขนาดจิ๋ว (Micro pump and Nano pump) ซึ่งมีองค์ประกอบ และชิ้นส่วนที่สำคัญ ท่อขนาดเล็กหรือช่องการไหลขนาดเล็ก ซึ่งทำหน้าทางด้านพาของไหลไปยังชิ้นส่วนอื่นของปั๊มขนาดจิ๋ว และในเซลล์พลังงานนั้น ท่อและช่องการไหลมีหน้าที่นำน้ำเข้าสู่กระบวนการการแยกก๊าซอ๊อกซิเจนกับไฮโดรเจน โดยที่ท่อขนาดจิ๋วนี้ยังเป็นส่วนประกอบสำคัญของตัวทำความเย็นในอุปกรณ์อิเล็คทรอนิคส์ขนาดเล็กอีกด้วย

เหตุผลสำคัญที่ต้องมีต้องมีการวิจัยและพัฒนาประสิทธิภาพของท่อหรือช่องการไหลขนาดเล็กนั้นเพื่อช่วย 1.เพิ่มประสิทธิภาพของการถ่ายเทความร้อนของเครื่องมือขนาดจิ๋ว (Micro Device) และอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ขนาดเล็ก (Micro Electronics Device) ให้ดีขึ้น 2.เพิ่ม Heat Flux dissipation ภายในเครื่องมืออิเล็คโทรนิกส์ขนาดจิ๋ว (Micro Electronics Device) 3.เครื่องมือขนาดจิ๋วและอุปกรณ์อิเล็คทรอนิกส์ขนาดเล็กจำเป็นต้องมีการหล่อเลี้ยงและควบคุมอุณหภูมิทางความเย็นสูงตลอดเวลา ซึ่งจำเป็นต้องมีการลำเลียงสารทำความเย็นไปยังส่วนต่างๆของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ขนาดเล็กและเครื่องมือขนาดจิ๋ว ส่งผลให้การศึกษาการไหลภายในท่อขนาดเล็กและช่องการไหลขนาดเล็ก(Microchannel and Nanochannel) มีความสัญและเป็นที่สนใจเป็นอย่างมาก

ในการไหลในระดับไมโครและนาโนเมตรนั้นพื้นที่ผิวของท่อและช่องการไหลมีขนาดเล็กมากๆ และสัดส่วนระหว่างพื้นที่ผิวกับปริมาตรของของไหล (Surface to Volume Ration) มีค่ามากๆ ส่งผลให้คุณสมบัติการไหลมีการเปลี่ยนแปลงไปจากระดับโดยทั่วไป (Macro Scale Flow) โดยเฉพาะคุณสมบัติการไหลที่มีต่อความเรียบผิวมีผลกระทบโดยตรงต่อการไหลภายในท่อและช่องการไหลในระดับนาโนเมตร ซึ่งส่งผลให้มีการทำการวิจัยกันอย่างแพร่หลาย ในปี 2006 ได้มีการทำการทดลองการไหลด้วย liquid crystalline polymer (LCP) melts ภายในช่องการไหลขนาดนาโนเมตร (Nanochannel) ที่มีความเรียบผิวในลักษณะต่าง เมื่อขนาดของความสูงของความเรียบผิวเพิ่มขึ้น โดยที่ขนาดของความสูงที่มากกว่า 1.2 นาโนโมตร ส่งผลทำให้ Shear viscosity มีค่าเพิ่มขึ้นตามไปด้วย[2] ความเรียบผิวแบบ Groove Roughness มีผลต่อการไหลแบบ elector osmotic flow ภายในช่องการไหลในระดับนาโนเมตร ส่งผลให้ค่าความหนืดของของไหล รูปแบบการไหลมีการเปลี่ยนแปลง [1]

การคำนวณเชิงตัวเลขและจำลองการไหลเชิงพลศาสตร์นั้นในปัจจุบันมีหลายประเภท ซึ่งขึ้นอยู่ตามลักษณะของการไหลในแต่ล่ะประเภท วิธีที่เป็นที่นิยมใช้ในการคำนวณเชิงตัวเลขและการจำลองการไหลคือการทฤษฎีการไหลเชิงคำนวณ (Computational Fluid Dynamics CFD) แต่เมื่อท่อมและช่องการไหลมีขนาดเล็กลงมากๆ แต่อัตรส่วนระหว่างพื้นที่ผิวของท่อกับช่องการไหลกับปริมาตรของของไหลมีค่าเพิ่มขึ้นมากๆ ส่งผลให้การไหลของของไหลเข้าสู้ของไหลเชิงโมเลกุล ส่งผลทำให้ทฤษฎีการไหลเชิงคำนวนไม่สามารถทำนายพฤติกรรมต่างๆของของไหลได้ ซึ่งการจำลองของไหลเชิงโมเลกุลนั้น จำเป็นต้องใช้วิธีการคำนวนเชิงโมเลกุล (Molecular Dynamics Simulations) ได้มีการจำลองการไหลด้วยวิธีแบบของไหลพลศาสตร์โดยการใช้ระเบียบวิธีทางไฟไนส์อีลิเมนต์เปรียบเทียบกับการไหลด้วยวิธีการเชิงโมเลกุล พบว่าการจำลองของไหลแบบพลศาสตร์สามารถทำนายพฤติกรรมของของไหลในบริเวณกลางท่อได้ แต่ไม่สามารถทำนายพฤติกรรมบริเวณชั้นของของเหลวที่ติดกับผิวท่อได้ แต่วิธีการของการจำลอง [4] และเมื่อเปรียบเทียบกับ Computational Fluid

Dynamic แล้วพบว่า ที่ขนาดของท่อที่มีเส้นผ่านศูนย์กลางน้อยกว่า 0.95 นาโนเมตร CFD ไม่สามารถทำนายพฤติกรรมใดๆได้ [3]

2. ทฤษฎี

2.1 การวิเคราะห์ระบบการไหล(Flow Regime)

ระบบของการไหลนั้นได้จะถูกแบ่งออกโดยค่า Knudsen Number (Kn) โดยที่ของไหลที่เป็นแก๊สจะใช้ค่า Kn ที่ถูกกำหนดโดยค่าของความห่างของโมเลกุลที่น้องที่สุดที่มีโอกาสจะชนกันระหว่างโมเลกุลต่อโมเลกุล (λ Mean Free path) ค่า Kn สามารถหาได้จากสมการที่ (1)

$$Kn \equiv \sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}}\frac{M}{\mathrm{Re}} \quad (1)$$

ในส่วนของไหลที่เป็นของเหลวนั้นสามารถแบ่งประเภทของระบบการไหลของของไหลได้จากค่า Global Knudsen number (Kn_g)

$$Kn_g \equiv \lambda / h \quad (2)$$

และจาก Local Knudsen number

$$Kn_g \equiv \lambda / A \quad (3)$$

โดยทั่วไประบบการไหลได้เป็น 4 ประเภท

ที่ค่า $Kn<10^{-2}$ เป็นระบบการไหลแบบ Continuum flow

ที่ค่า $10^{-2}<Kn<0.1$ เป็นแบบ Slip Flow

ที่ค่า $0.1<Kn<10$ เป็นการไหลแบบ Transition Flow

ที่ค่า $Kn>10$ เป็นกาไหลแบบเชิงโมเลกุล (Free Molecular Flow)

2.2 พฤติกรรมการไหลในช่องการไหลขนาดเล็ก

เมื่อท่อและช่องการไหลมีขนาดเล็กไปมากๆจนทำให้ถึงระบบการไหลแบบเชิงโมเลกุลนั้น พฤติกรรมของไหลจะมีการเปลี่ยนแปลงไปจากระบบการไหลแบบมาโคร (Macro Scale Flow) ไปอย่างมาก พฤติกรรมที่สำคัญที่เกิดขึ้นในระบบการไหลเชิงโมเลกุลนี้

การดูดซับ(Adsorption Effect) เป็นพฤติกรรมหนึ่งทีเกิดขึ้นในระบบการไหลเชิงโมเลกุล จะเกิดขึ้นกับวัสดุที่มีรูพรุ่น(Nano pore) กาไหลแบบ Electro kinetic Flow เป็นพฤติกรรมที่สำคัญเพราะเป็นตัวควบคุมการไหลภายในระบบนี้ พฤติกรรมที่น่าสนใจเป็นอย่างมากคือการไหลที่เกิดจากความเรียบผิว (Surface Roughness Effect) เมื่อค่าของความสูงของความเรียบผิวเกิดการเปลี่ยนแปลงเมื่อเทียบกับ mean free path ส่งผลให้ Velocity silp ที่ใกล้ๆผื้นที่ผิวลดลง อีกทั้งยังส่งผลให้ Shear viscosity และ ค่าความหนืดเพิ่มขึ้น

2.3 ทฤษฎีการคำนวนเชิงโมเลกุลเบื้องต้น

การคำนวณการไหลแบบเชิงโมเลกุล การคำนวนเชิงโมเลกุล เป็นการจำลองการไหลของของไหลที่มีปริมาตรควบคุมขนาดเล็กมากที่มีขนาดอยู่ที่ 100 นาโนเมตรหรือเล็กว่านั้น โดยที่ MD จะเป็นการจำลองการเคลื่อน ของวัตถุภายใต้กฎข้อที่ 2 ของนิวตัน ที่มีความสัมพันธ์จากการเกิดปฏิกิริยาจากแรงภายในของอณุภาคของอะตอมภายในระบบของของไหล โดยที่ การคำนวนเชิงโมเลกุล จะทำการประมวลผลเป็นช่วงของเวลา ซึ่งบ่งออกได้เป็น 2 ประเภทคือ

- Equilibrium MD (EMD) simulations
- Non Equilibrium MD (NEMD) simulations

ในการคำนวนและการจำลองการไหลเชิงโมเลกุล การเคลื่อนที่ของโมเลกุลหรืออะตอมของของไหลจะเคลื่อนที่เป็นไปตามกฎข้อที่ 2 ของนิวตัน

$$F = m\ddot{r} \quad (4)$$

จากการพิจจารณาแรงที่กระทำต่อโมเลกุลหรืออะตอมของของไหลแล้วพบว่า แรงที่กระทำต่อโมเลกุลหรืออะตอมของของไหลนั้นมีแรงจากภายนอก(External Force , F_i^e) และแรงที่เกิดจากแรงกระทำภายในโมเลกุลหรืออะตอมของของไหลนั้นเอง (Internal Force , F_{ij}) ทำให้สามารถเขียนสมการที่มีความสัมพันธ์ต่อการไหลของของไหลในรูปของสมการกฎข้อที่สองของนิวตันใหม่ได้เป็น

$$\sum_j F_{ij} + F_i^e = m_i \ddot{r}_i \quad (5)$$

Intermolecular Potential เป็นตัวหัวใจหลักและสำคัญในการทำการจำลองการไหลแบบโมเลกุล ซึ่งโดยทั่วไปจะเขียนอยู่ในรูปของ Potential Energy (V)

เกี่ยวข้องสัมพันธ์กับระบบของของไหลและของอนุภาค เมื่อความสัมพันธ์ของโมเลกุลหรืออะตอม โดยที่ค่าของ Intermolecular Potential มีด้วยกันหลายชนิด สามารถแบ่งออกได้เป็น 6 ประเภทแต่ที่นิยมใช้กันอยู่เป็นของ Lennard-Jones Potential , WCA Potential (Week-Chandler-Andersen) และ Coulomb potential.

Lennard-Jone Potentail นั้นได้อธิบายถึงปฏิกริยาความสัมพันธ์ระหว่าง โมเลกุลที่ไม่มีขั้ว กับแรงปฏิกิริยา ที่เกิดขึ้นภายในระบบของการจำลองการเคลื่อนไหวเชิงโมเลกุล โดยที่ Lennard –Jone Potential นั้นเป็นที่นิยมในการนำมาใช้ในการจำลองทางโมเลกุล

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

WCA Potentia (Week-Chandler-Andersen) เป็นการปรับปรุงประสิทธิภาพของ Lennard-Jones Potential ให้มีประสิทธิภาพสูงขึ้น

$$V(r) = \begin{cases} 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] & , r \le \sigma \\ 0 & , r > \sigma \end{cases} \quad (7)$$

3.การจำลองทางคอมพิวเตอร์

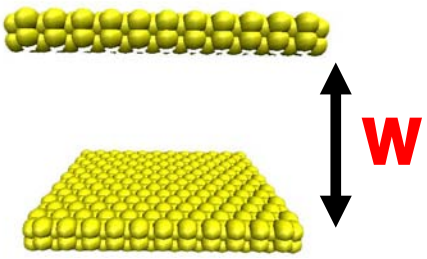
ในการจำลองเชิงโมเลกุลด้วยคอมพิเตอร์นั้นในงานวิจัยนี้ใช้โปรแกรม GROMACS ซึ่งเป็นโปรแกรมคำนวนโมเลกุลที่มีความนิยมอย่างสูงโปแกรมนึง ในการจำลองเชิงโมเลกุลด้วยโปรแกรม GROMACS นั้นจำเป็นต้องมีเอกสาร (File) เริ่มต้นเป็นเอกสาร Protein Data Bank (PDB) ซึ่งเป็นไฟล์ที่ประกอบไปด้วย ชนิดของอะตอม น้ำหนักของอะตอม ขนาดของอะตอม รวมถึงระยะของพันธะ (Bond Length) ซึ่งในการสร้างไฟล์ Protein Data Bank สามารถสร้างได้จาก โปรแกรม Molecular Modeling ซึ่งในงานวิจัยนี้ใช้โปรแกรม HyperChem เป็นตัวสร้างเอกสาร Protein Data Bank ท่อและช่องการไหลขนาดเล็กถูกสร้างด้วยโปแกรม HyperChem โดยท่อหรือช่องการไหลนั้นจะประกอบไปด้วยผนังที่บรรจุไปด้วยอะตอมของซิลิก่อน (Silicon Atom ,Si) ที่มีโครงสร้างผลึกเป็นแบบ Diamond Cubic มีระยะของพันธะระหว่างอะตอม 2.43 นาโนเมตร และขนาดความกว้างของท่อที่ใช้ในการคำนวน 1 – 3.49 นาโนเมตร ซึ่งลักษณะของ ท่อหรือช่องการไหที่ใช้ในการจำลองทางโมเลกุลนั้นจะมีสองลักษณะ คือ

-แบบราบเรียบ (Smooth Channel)

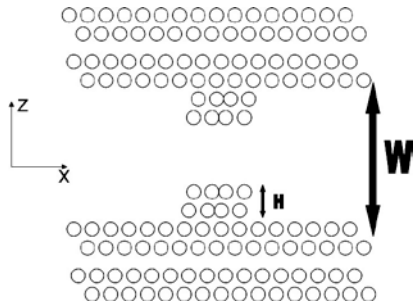
-แบบมีความเรียบผิว (Rough channel)

โดยในแบบช่องการไหลแบบมีความเรียบผิวนั้นเราเลือกความเรียบผิวเป็นแบบ Groove Roughn

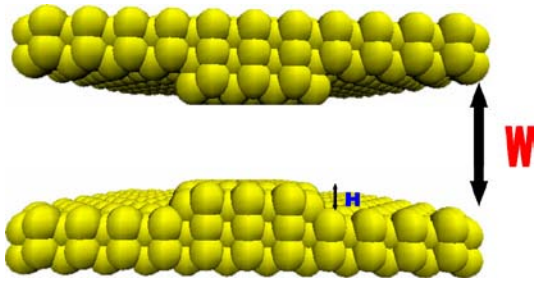
รูปที่ 1 ภาพแสดงลักษณะของท่อหรือช่องการไหลแบบราบเรียบ



รูปที่ 2 ภาพแสดงลักษณะของท่อหรือช่องการไหลแบบราบเรียบที่สร้างด้วยโปรแกม HyperChem

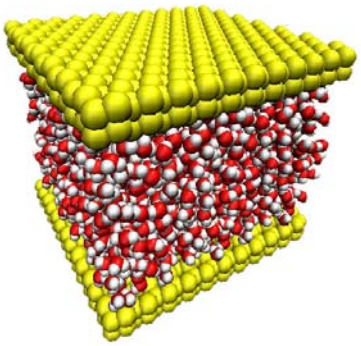


รูปที่ 3 ภาพแสดงลักษณะของท่อหรือช่องการไหลแบบมีความเรียผิวแบบ Groove Roughness



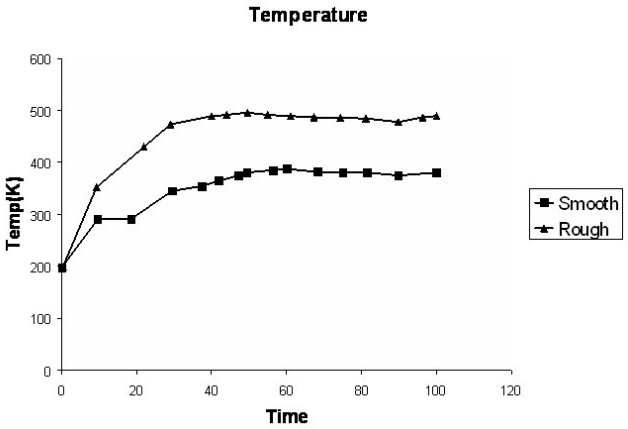
รูปที่ 4 ภาพแสดงลักษณะของท่อหรือช่องการไหลแบบมีความเรียผิวแบบ Groove Roughness ที่สร้างโดยโปรแกรม HyperChem

สำหรับการจำลองการไหลเชิงโมเลกุลนั้น จะใช้ของไหลเป็นของเหลวคือน้ำ โดยใช้โมเดลของ SPC/E model ซึ้โมเลกุลของน้ำจะอยู่ในรูปของแข็งของอะตอมของไฮโดรเจนและน้ำ ซึ่งในการจำลองเชิงโมเลกุลนั้นจะทำการพิจารณา Intermolecular Potential สองลักษณะคือ Lennard-Jones Potential , และ Coulomb potential โดยที่ Lennard-Jones Potential จะพิจารณาถึงปฏิกิริยาต่าง ๆของคู่อะตอมทุกอะตอม เช่น ซิลิกอน ต่อ ซิลกอน และ Coulomb Potential จะพิจารณาถึงการบรรจุค่าของประจุไฟฟ้าหรือพลังงานไฟฟ้าของคู่อะตอม ค่าของ Lenard – Jone Potential จะถูกบรรจุลงใน GROMACS Force filed เทคนิคและการกำหนดค่าต่างในเบื้องต้นของโปรแกรม GROMACS สมการของการเคลื่อนที่ของอะตอมและโมเลกุลภายในระบบใช้ leap-frog algorithm กำหนดค่า cutoff radius 1.1 นาโนเมตร เพื่อในการใช้คำนวน Lenard-Jone Potential การคำนวนหาค่า Electrostatic Interactions จะใช้วิธี Particle Mesh Method น้ำที่ใช้เป็นของไหลในระบบจะถูกกำหนดอุณหภูมิที่ 300 องศาเคลวิน โดยใช้ค่าอุณหภูมิคู่ควบ (Temperature Capping) ด้วย Berendsen Thermostat ที่เวลาคงที่ที่ 0.1 ps



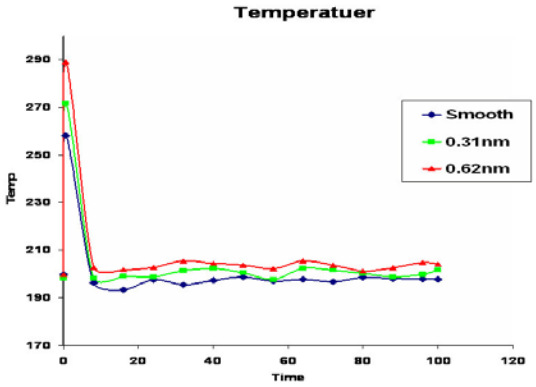
รูปที่ 5 ภาพแสดงลักษณะของท่อหรือช่องการไหลที่บรรจุไปด้วยอะตอมและโมเลกุลของน้ำ

4.ผลของการจำลองทางคอมพิวเตอร์



รูปที่ 6 แผนภูมิเส้นแดงอัตราการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิในช่องการไหลที่มีขนาดความกว้าง 1 นาโนเมตร

จากภาพที่ 6 แผนภูมิเส้นแสดงอัตราเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิในช่องการไหลที่มีขนาดความกว้าง 1 นาโนเมตร พบว่าเมื่อมีการเพิ่มความเรียบผิวแบบ Groove Roughness Element เข้าไปในช่องการไหลส่งผลให้อัตราการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิในท่อหรือช่องการไหลแบบ Groove Roughness Element มีอัตรการการของอุณหภูมิที่สูงกว่าในช่องการไหลแบบราบเรียบเป็นอย่างมาก (Smooth Roughness Element) โดยที่ขนาดของความสูงของความเรียบผิวมีค่าเท่า 0.313 นาโนเมตร



รูปที่ 7 แผนภูมิเส้นแดงอัตราการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิในช่องการไหลที่มีขนาดความกว้าง 3.49 นาโนเมตร

จากภาพที่ 7 แผนภูมิเส้นแสดงอัตราเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิในช่องการไหลที่มีขนาดความกว้าง 3.49 นาโนเมตร พบว่าเมื่อมีการเพิ่มความเรียบผิวแบบ Groove Roughness Element ที่มีขนาดความสูง 0.313 นาโนเมตรกับ 0.626 นาโนเมตร เข้าไปในช่องการไหลส่งผลให้อัตราการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิในท่อหรือช่องการไหลแบบ Groove Roughness Element มีอัตรการการของอุณหภูมิที่สูงขึ้นไปเพียงเล็กน้อยเมื่อเทียบกับอุณหภูมิที่เปลี่ยนแปลงในช่องการไหลแบบราบเรียบ (Smooth Roughness Element) ซึ่งค่าของความสูงของความเรียบผิวที่ 0.626 นาโนเมตรให้ค่าอุณหภูมิของน้ำสูงสุด

5.สรุปผลและการวิจารณ์

จากการออกแบบการจำลองการไหลในท่อหรือช่องการไหลในระดับนาโนเมตรพบว่า ความเรียบผิวส่งผลกระทบที่สำคัญต่อการไหลของของไหล ซึ่งทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิของของไหลที่ไหลผ่านท่อหรือช่องการไหลในระดับนาโนเมตร และอีกตัวแปรที่สำคัญอีกตัวนึงที่ส่งผลกระทบโดยตรงต่อการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิของของไหลที่ไหลผ่านท่อหรือช่องการไหลนั้นขนาดของความกว้างของท่อ ยิ่งความกว้างของท่อมีขนาดเล็กและประกอบกับมีความเรียบผิวจะทำให้การเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิสูงขึ้นอย่างมาก

6.กิตติกรรมประกาศ

ขอขอบคุณ Thai Grid Nation และ High Performance Computing and Networking Center Lab (HPCNC) ของมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ และบุคคลากรใน HPCNC Lab ที่ให้ความช่วยเหลือในการทำงานวิจัย

7. สัญลักษณ์และคำย่อ

A	พื้นที่หน้าตัดของท่อ, nm^2
H	ความสูงของ Groove Roughness
K_n	Knudsen Number
K_{nl}	Local Knudsen Number
K_{ng}	Global Knudsen Number
n	จำนวนอะตอม อะตอม
ps	Picosecond
u_i	ความเร็วเฉลี่ยของแต่ล่ะ bins
v_i	ความเร็วเฉลี่ยของแต่ล่ะอะตอม
$V(r)$	Intermolecular Potential
r	รัศมีของอะตอม nm
σ	ระยะห่างระหว่างพันธะของคู่อะตอม nm

8. เอกสารอ้างอิง

[1] Daejoong Kim ,and Eric Darve ,(2006), Molecular dynamics simulation of electro-osmotic flows in rough wall nanochannels , PHYSICAL REVIEW E 73, 051203 _2006

[2] Kai Leung Yung , Lan He , Yan Xu , and Yun Wen Shen, (2006) ,Study of surface conditions and shear flow of LCP melts in nanochannels through molecular dynamics simulation ,*Science Direct* ,Polymer 47 (2006) 4454–4460

[3] R. Qiao and N. R. Aluru ,(2002) , Molecular dynamics simulation of electro-osmotic flows in rough wall nanochannels , JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS VOLUME118 NUMBER10

[4] Xiao-Bing Mi and Allen T. Chwang , Molecular Dynamics Simulations of Nanochannel Flows at Low Reynolds Numbers , molecules ISSN 1420-3049