



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

شبیه سازی دینامیک ملکولی غیر تعادلی جریان گاز
در کانال های نانوی ارگانیک

عنوان انگلیسی مقاله :

Non-equilibrium molecular dynamics simulation of
gas flow in organic nanochannels



توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.



بخشی از ترجمه مقاله

4. Conclusions

Adsorption and force-driven transport of Helium, Argon, and Methane in four graphite channels of 2, 4, 6, and 8 nm high is studied by performing GCMC and NEMD simulations. Methane and Argon show similar adsorption behavior (absolute and excess adsorptions) while the density of Helium across the channel height is approximately constant.

For all gases, whether the adsorption affinity is high (Argon and Methane) or low (Helium), plug-shaped velocity profiles are established for all the channel heights. Therefore, due to the higher adsorbed density values of the Argon and Methane, the adsorbed phase contribute significantly to the overall mass flux across the channel. Mass flux profiles of Argon and Methane across the channels demonstrate a significant contribution of adsorbed molecules to total mass flux. According to these results, as Knudsen number increases, the contribution of the adsorbed phase transport to the total mass flux of the channels becomes higher. This contribution is 42% for Argon and Methane at Knudsen number of 0.1, which increases to approximately 53% at Knudsen number of 0.2.

۴- نتیجه گیری ها

جذب و انتقال نیرو-محور هلیوم، آرگون و متان در چهار کانال گرافیت با ارتفاع های ۲، ۴، ۶ و ۸ نانومتری توسط اجرای شبیه سازی های GCMC و NEMD مورد مطالعه قرار گرفته است. متان و آرگون رفتار جذب مشابهی (جذب های مطلق و اضافی) را نشان می دهند درحالیکه چگالی هلیوم در سراسر ارتفاع کانال تقریباً ثابت است.

برای همه گازها [چه کشش جذب آنها زیاد باشد (آرگون و متان) و چه کم باشد (هلیوم)]، خصوصیات سرعت به شکل دو شاخه، برای همه ارتفاعات کانال ایجاد شده است. بنابراین بخاطر مقادیر چگالی جذب شده بیشتر آرگون و متان، مرحله جذب شده کمک زیادی به شار جرم کلی در سراسر کانال می کند. خصوصیات شار جرم آرگون و متان در سراسر کانال ها، کمک مهم ملکول های جذب شده به شار جرم کلی را اثبات می کند. طبق این نتایج، وقتی که عدد نودسن افزایش می یابد، کمک انتقال مرحله جذب شده به شار جرم کلی کانال ها بیشتر می شود. این کمک در عدد نودسن ۰٫۱ برای آرگون و متان ۴۲ درصد است، و در عدد نودسن ۰٫۲ به حدود ۵۳ درصد افزایش می یابد.



توجه!

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت

ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.

برای جستجوی جدیدترین مقالات ترجمه شده، [اینجا](#) کلیک نمایید.