



ویژگی های سطحی و نحوه انتقال گرما در نانوسامانه طلا – آب به روش مدلسازی دینامیک مولکولی

محمد رضا نیک زاد | صفورا نیک زاد*

۱. گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه آزاد اسلامی شاخه خمینی شهر، خمینی شهر، اصفهان
۲. گروه فیزیک پزشکی، دانشکده پزشکی، دانشگاه علوم پزشکی همدان، همدان، همدان

چکیده: هدف از این پژوهش، شبیه سازی سامانه ای متشکل از آب-نانوذرات طلا، بررسی ویژگی ها و نحوه انتقال گرما از نانوذرات به محلول است. شرایط اولیه سامانه با دو نرم افزار Packmol و Moltemplate و معادلات حاکم در نرم افزار LAMMPS برای سامانه مورد نظر تعریف شد. بررسی های پس از شبیه سازی با نرم افزارهای VMD، MATLAB، Python و انجام شد. برای بررسی فرایند انتقال گرما از نانوذرات به محلول، از روش SNEMD استفاده شد. طبق نتایج، افزودن نانوذرات طلا به آب باعث کاهش ضخامت سطح تقابل و افزایش انسجام ذرات سیال می شود. سرعت افزایش کشش سطحی با افزایش غلظت نانوذرات و کسر مولی، در نانوذرات با قطر بیشتر، نسبت به نانوذرات کوچک تر، بیشتر است. در فرایند خنک سازی نانوذرات، گرما در محلول در فاصله ۲nm در فاصله زمانی کمتر از ۵ps انتقال پیدا می کند. رسانش گرمایی در نخستین لایه آب نزدیک به نانوذره ۵۰٪ بیش از دیگر قسمت های محلول است. بنابراین، با افزایش چگالی مولکولی در سطح نانوسیال و کاهش سطح تقابل لایه سطحی، احتمال اختلاط نانوسیال با مایعات کاهش می یابد. این پدیده می تواند منجر به بالا رفتن بازده نانوسیال در روش های تشخیصی درمانی شود. در صورت استفاده از نانوذرات طلا در هایپرترمیا، افزایش دما، اثر بیشتری بر مرگ سلول های سرطانی نزدیک نانوذره نسبت به بافت های سالم دورتر خواهد داشت.

واژگان کلیدی: دینامیک مولکولی، نانوذرات طلا، انسجام مولکولی نانوسیال، کشش سطحی، رسانش گرمایی.

s.nikzad@umsha.ac.ir

به طوری که بسته به شکل، به صورت نیم رسانا در می آید [۱]. همچنین، دمای ذوب طلا نیز در شرایط عادی بسیار بالا و حدود ۱۰۶۴ درجه سانتی گراد است اما این دما نیز در مقیاس نانو ثابت نمی ماند و در ابعاد ۳ تا ۴ نانومتر به شدت افت می کند [۲]. افزایش جذب انرژی فوتون ها به علت عدد اتمی بالای طلا، آن را برای استفاده در درمان و تصویربرداری با فوتون های پرنانرژی ارزشمند می کند. اثبات شده نانومیله های طلا در فوتودرمال تراپی کاربرد و تأثیر بهینه دارند. همچنین، این نانوذرات در زمینه های تشخیصی پزشکی نیز کاربرد دارند. در واقع افزایش شدت اثرگذاری پرتوهای یونش با این نانوذرات، باعث افزایش کنتراست

۱- مقدمه

در سال های اخیر، استفاده از نانوذرات تحول عظیمی در علوم متفاوت از جمله پزشکی ایجاد کرده است. یکی از عناصر پرکاربرد در تهیه نانوسامانه های مورد استفاده در شاخه های متفاوت تشخیص و درمان در پزشکی و زیست فناوری، طلا است. طلا به علت دارا بودن رسانایی بالای الکتریکی و مقاومت بالا در برابر اکسایش، یکی از عناصر مهم در حوزه الکترونیک محسوب می شود اما در مقیاس نانو این ویژگی خود را از دست می دهد

تصاویر در روش‌های متفاوت تصویربرداری می‌شود [۳، ۴]. از ویژگی تقویت‌کنندگی نوری نانوذرات طلا در هایپرترمیا در پزشکی، برای ارسال نانوذرات طلا به داخل سلول‌های بدخیم و بالا بردن هدفمند دمای این سلول‌ها و از بین بردن آن‌ها استفاده می‌شود [۵].

مطالعات تجربی زیادی در رابطه با ویژگی‌های متفاوت نانوذرات و اثر آن بر درمان سلول‌های سرطانی و تومورهای حیوانی انجام شده است. در بررسی‌ای که توسط Zhang و همکارانش در سال ۲۰۱۲ انجام شد، حساسیت پرتویی نانوذرات طلا با پوشش PEG با اندازه‌های متفاوت بر سلول‌های Hela در محیط سلولی و حیوانی بررسی شد. نتایج نشان می‌داد از بین اندازه‌های متفاوت ۴/۸، ۱۲/۱، ۲۷/۳ و ۴۶/۶ نانومتر، اندازه‌های ۱۲/۱ و ۲۷/۳ نانومتر بیشترین اثر حساس‌کنندگی در برابر پرتو را دارند. سمیت اندازه ۴۶/۶ نانومتر از همه کمتر و بهترین اندازه برای کاهش حجم تومور ۱۲/۱ نانومتر است [۶].

در بررسی که توسط Wang و همکارانش در سال ۲۰۱۶ انجام شد، نانوذرات طلا با بارهای مثبت، منفی و خنثی از نظر توزیع زیستی، دفع، سمیت، مقدار جذب در تومور و افزایش حساس‌کنندگی پرتویی در تومور موشی برای ۹۰ روز بررسی شدند. نتایج نشان می‌داد بار منفی سطح نانوذره باعث می‌شود، دفع کمتر و جذب در تومور بیشتر باشد و اثرات مربوط به کشندگی سلول‌های توموری بیشتر مشاهده شود [۷].

در بررسی‌ای که توسط Ma و همکارانش در سال ۲۰۱۷ انجام شد، اثر حساس‌کنندگی پرتویی نانو ذرات طلا با شکل‌های متفاوت معمولی، کروی و میله‌ای با اندازه یکسان ۵۰ نانومتر بر سلول بررسی شد که نشان‌دهنده افزایش اثر برای نانو ذرات معمولی نسبت به نوع کروی و میله‌ای بود [۸].

در بررسی‌ای که توسط Sirotkina و همکارانش در سال ۲۰۱۰ انجام شد اثر رسانش گرمایی نانو ذرات طلا با استفاده از تابش پرتوهای لیزر بر تومور حیوانی بررسی شد. نتایج نشان می‌داد که تجمع نانو ذرات طلا در تومور ۴ تا ۵ ساعت بعد از تزریق اتفاق می‌افتد و تابش پرتوهای لیزر در این زمان به تومور می‌تواند دمای تومور را تا ۴۴-۴۵ درجه سانتی‌گراد بالا برده و منجر به آپوپتوز و مرگ سلول‌های تومور شده و رشد تومور را تا ۱۰۴٪ بعد از ۵ روز مهار کند [۹].

در بررسی دیگری که توسط Shiotani و همکارانش در سال ۲۰۱۰ انجام شد، از نانوذرات میله‌ای طلا با پوشش‌های متفاوت برای افزایش جذب گرما در سلول‌های سرطانی استفاده شد، نتایج نشان می‌داد با تجمع این نانوذرات در سلول‌های سرطانی و تابش نور فرسرخ نزدیک تومور، دما به طور معناداری بالا رفته و مرگ و میر در تومور افزایش می‌یابد [۱۰].

اگرچه این نانوذرات سال‌ها است که وارد عرصه علم شده و پژوهش زیادی بر آن‌ها انجام شده است، اما گستره کامل عملکرد آن‌ها در مجاورت مواد متفاوت و اثرات آن بر بدن انسان هنوز به طور دقیق مشخص نیست.

اگرچه به نظر می‌رسد اندازه نانوذرات تأثیر مهمی بر ویژگی و رفتار آن‌ها دارد، اما نتایج گاهی ضد و نقیض در مطالعات سلولی و حیوانی وجود دارد که برخی استفاده از اندازه‌های کوچک‌تر برای ورود نانوذرات به داخل سلول را توصیه می‌کنند و برخی حاکی از سمیت اندازه‌های کوچک و استفاده از نانوذرات بزرگ‌تر هستند [۶]. از طرفی تهیه نانو ذرات با اندازه کوچک‌تر از ۱۰ نانومتر که غالباً در تهیه نانو سامانه‌های زیستی توصیه می‌شود، بسیار دشوار است [۱۱، ۱۲]. همچنین بررسی انتقال حرارت در اطراف نانو ذرات احاطه‌شده با محلول‌ها، به‌ویژه آب که قسمت عمده داروها و همچنین، بافت‌های بدن را در برمی‌گیرد، یکی از موضوعات بسیار مهم در این زمینه است. در واقع مقدار افزایش دمای این ذرات و زمان موردنیاز و شرایط کاهش دما همچنین فرایند انتقال گرما به آب اطراف، از موضوعات مهم در این زمینه است [۱۳-۱۵]. واضح است که ویژگی‌های انتقال حرارتی این نانو ذرات می‌تواند بر عملکرد سامانه‌های زیستی تأثیر بسزا بگذارد، برای مثال مقدار گرمای انتقال‌یافته به پروتئین‌ها و زمان موردنیاز و فرایند کاهش دمای پروتئین‌ها جهت حفظ عملکرد آن‌ها اهمیت زیادی دارد. به طوری که باوجود انجام مطالعات بسیار زیاد سلولی و حیوانی به دلیل عدم اطمینان از نتایج و کمبود اطلاعات، هنوز از این نانوذرات برای درمان و تشخیص بیماری‌ها استفاده نمی‌شوند. هزینه بالای آزمایش‌ها و همچنین، مقیاس بسیار کوچک این ذرات، امکان بررسی‌های دقیق تفاوت‌های رفتاری و اثرگذاری آن‌ها را دشوار می‌کند. امروزه برای حل این مشکل از روش‌های شبیه‌سازی عددی استفاده می‌شود. از جمله این روش‌های عددی می‌توان به روش دینامیک مولکولی اشاره کرد [۱۶].

سامانه در آب به عنوان بخش عمده تشکیل دهنده بدن و سپس نحوه انتقال گرما از نانوذرات طلا به آب اطراف بررسی می شود.

۲- بخش تجربی

۲-۱- معادلات حرکت و پتانسیل

در این پژوهش، برای انجام شبیه سازی، هر مولکول به صورت جزء صلبی در نظر گرفته شده (منظور از هر جزء یک مولکول است) که این جزء، تحت تأثیر حرکات دورانی حول مرکز جرم خود قرار می گیرد. این حرکات به کمک معادلات اوایلر محاسبه شد. در پژوهش های علمی برای مولکول های متفاوت، بسته به شرایط محیطی از مدل مولکولی مناسب استفاده می شود. بیش از ۳۳ مدل مولکولی برای آب آورده شده است که از این بین، مدل TIP4P/2005 [۲۰] برای شبیه سازی تنش سطحی قابل مایع- بخار مناسب تر و مدل SPC/E [۲۱] مدلی ساده تر و مناسب تر در شبیه سازی آب در حالت مایع است [۲۲]. در این پژوهش، از هر دو مدل پتانسیل TIP4P/2005 و SPC/E برای مولکول آب، برای بررسی ویژگی سطح تقابل مایع- بخار آب و از مدل پتانسیل اتم های احاطه شده (Embedded Atom Model) یا EAM برای شبیه سازی اتم های طلا استفاده شد.

۲-۲- الگوریتم انتگرال گیری زمانی

در این بررسی از الگوریتم سرعت ورله برای انتگرال گیری در واحد زمان استفاده شد. از آنجایی که لازم است پیوندها و زوایای پیوندی هر مولکول صلب در نظر گرفته شود، ضروری است که این قیدها ثابت شوند. بنابراین، از الگوریتم SHAKE برای ثابت کردن قیدها در انتگرال گیری معادلات سرعت ورله استفاده شد.

۲-۳- شرایط مرزی تناوبی و اعمال نیروهای بلند برد

به طور کلی در شبیه سازی های دینامیک مولکولی برای کاهش هزینه محاسبات و از بین بردن اثرات سطح که تأثیر بسیاری در شبیه سازی اعمال می کند، از شرط مرزی تناوبی استفاده می شود. اگرچه در این پروژه استفاده از شرایط مرزی تناوب در محاسبات نقشی ندارد و کل میدان حل شبیه سازی شده است اما به علت

بر اساس بررسی های انجام شده، مطالعاتی در زمینه بررسی برخی ویژگی های نانوذرات و از جمله نانوذرات طلا در محلول های متفاوت انجام شده است. در بررسی ای که توسط Merabia و همکارانش در سال ۲۰۰۹ انجام گرفت، انتقال گرمایی نانوذرات طلا در اکتان و آب با استفاده از معادلات لنارد جونز بررسی شد [۱۷]. در بررسی Hu و همکارانش در ۲۰۱۰، اثر چگالی و پوشش سطحی بر ویژگی نانوذرات طلا در دی اکسید کربن بررسی شد [۱۸]. در بررسی ای که توسط Rajabpour و همکارانش در سال ۲۰۱۹ بر نانوذرات نقره و نحوه انتقال گرما با این نانوذرات بر آب انجام شد، روش های متفاوت مدل سازی از جمله روش های SNEMD، TNEMD و EMD استفاده و با هم مقایسه شدند. نتایج نشان می داد روش SNEMD از اعتبار بالاتری در بررسی نحوه انتقال گرما به لایه های متفاوت آب اطراف نانوذره برخوردار است [۱۹].

با توجه به اندازه بسیار کوچک نانوذرات و عدم امکان بررسی تجربی دقیق ویژگی های این نانوذرات، استفاده از روش های مدل سازی می تواند زمینه علمی و دقیق تری در توضیح و استفاده از رفتار نانوذرات در محیط های زیستی ارائه دهد. مرور پژوهش های انجام شده در این زمینه نیز نشان می دهند، مدل های بسیار زیاد و عوامل مؤثر متعددی وجود دارد که نتایج را تحت تأثیر قرار می دهد و بنابراین، برای دستیابی به نتایج درست و نزدیک به واقعیت، تکمیل و انجام مدل سازی های متعدد و با روش های متفاوت ضروری است.

با توجه به نتایج به دست آمده از مقایسه مدل های متفاوت در بررسی انجام شده توسط Rajabpour و همکارانش در سال ۲۰۱۹ نتیجه گرفتیم که از مدل توصیه شده در این بررسی برای شبیه سازی رفتار نانوذرات در آب استفاده کرده و با روش های پیشین و مطالعات تجربی انجام شده مقایسه کنیم.

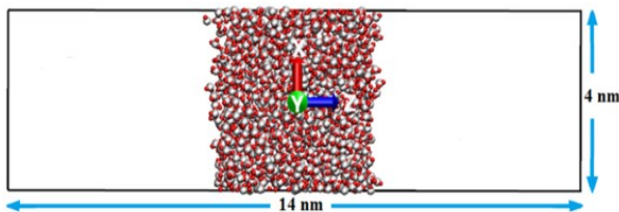
بنابراین، در پژوهش پیش رو، ابتدا به کمک روش دینامیک مولکولی سامانه ای متشکل از آب و نانوذرات طلا ایجاد کرده، به صورتی که نانوسیال تشکیل شده یک سطح تقابل مایع- بخار تشکیل دهد. پس از به تعادل رساندن سامانه، با تغییر در ویژگی های نانوذرات و غلظت نانوسیال، چگالی نانوسیال و کشش سطحی سطح تقابل مایع- بخار بررسی و اثرات آن بر رفتار نانو

جدول ۱: پارامترهای متد PPPM/dispersion

Parameters	Value
Ewald	0.28 \AA^{-1}
Interpolation order	5
Real space cutoff	10 \AA
Grid spacing	4.17 \AA

۲-۵- سامانه شبیه‌سازی

برای شبیه‌سازی سطح تقابل مایع-بخار همانند شکل ۱، ۲۰۰۰ مولکول آب در یک جعبه مکعب مستطیل با ابعاد $4 \times 4 \times 3.8 \text{ nm}$ در مرکز حجم شبیه‌سازی با ابعاد $4 \times 4 \times 14 \text{ nm}$ قرار داده شدند. موقعیت‌های اولیه اتم‌ها به کمک دو نرم‌افزار متن‌باز Packmol و Moltemplate ساخته شد. شرایط مرزی تناوبی در تمام جهات لحاظ شده و مرکز مختصات نیز در مرکز جعبه شبیه‌سازی مطابق شکل قرار داده شد.



شکل ۱: حجم شبیه‌سازی سطح تقابل مایع-بخار

لازمه اجرای یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، به تعادل رساندن سامانه یا سامانه‌های شبیه‌سازی، قبل از اجرای محاسبات است. برای به تعادل رساندن سامانه، شبیه‌سازی با گام زمانی 0.5 fs و با تعداد تکرار 100000 در شرایط NVE آغاز شد. سپس برای اعمال دمایی 300 کلین به سامانه، انسامبل به NVT تغییر داده و دما تا 150000 تکرار با گام زمانی 1 fs از 280 درجه تا 300 کلین افزایش داده شد. درنهایت، سامانه به مدت $1/5 \text{ ns}$ تحت ترموستات Nose-Hoover قرار گرفته تا به تعادل برسد. پس از تعادل، نتایج در گستره زمانی 0.5 ns استخراج شد. با افزودن نانوذرات طلا به این سامانه، زمان به تعادل رساندن سامانه 4 ns افزایش داده شد و نتایج در گستره زمانی 1 ns استخراج شد.

نانوذرات طلا به صورت کلاسترهای اتمی از ذرات طلا ساخته شده‌اند. این کلاسترها با تعداد متفاوت اتم طلا ساخته شده‌اند تا نانوذرات با 8 ، 10 و 12 آنگستروم را تشکیل

محدودیت‌های موجود، استفاده از این شرایط مرزی در پژوهش لحاظ شده است. برای اعمال پتانسیل‌های بلند برد کولمب از حلگر PPPM استفاده شده که یک الگوریتم ترکیبی ارتقاء یافته است که توسط Hockney ارائه شده است [۲۳]. اساس این روش تقسیم تابع پتانسیل به دو قسمت و استفاده از معادلات و توابعی است که در بررسی Essmann و همکارانش توضیح داده شده است [۲۴].

۲-۴- پیکربندی اولیه و معادلات حاکم بر مسئله

در این پژوهش، از ابتدا موقعیت اتم‌های آب و نانوذرات طلا به کمک نرم‌افزارهای Moltemplate و Packmol مشخص شده و سپس، نحوه ارتباط اتم‌ها با یکدیگر به کمک الگوریتم SHAKE و نوع پتانسیل تقابل مولکول‌ها و اتم‌ها تعریف شد. برای محاسبه تنش سطحی لازم است تا فشار نرمال و برشی در ناحیه سطح تقابل مایع-بخار محاسبه شود. معادله محاسبه تنش سطحی توسط Nijmeijer و همکارانش به صورت زیر تعریف شده است [۲۵]:

$$\gamma = \int_{z_1}^{z_2} (P_N - P_T) dz \quad (1)$$

که در اینجا Z_1 و Z_2 ابتدا و انتهای ناحیه سطح تقابل است و P_N و P_T به ترتیب فشار نرمال و برشی هستند. پتانسیل‌های لnard-جونز و کولمب نیز به صورت زیر لحاظ شده‌اند:

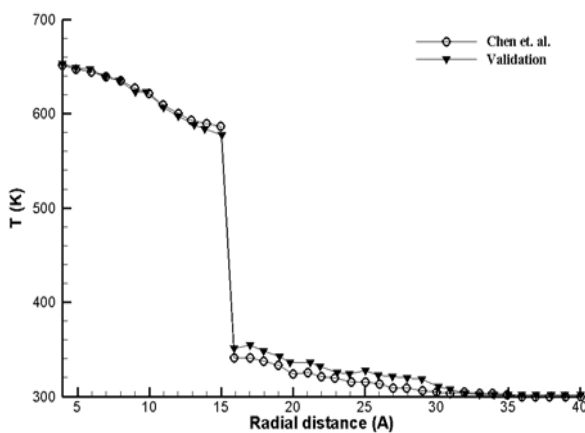
$$\phi(r_{ij}) = 4\epsilon_{LJ} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{1}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_r} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \quad (2)$$

که r_{ij} فاصله بین اتم‌های i و j ، ϵ و σ پارامترهای لnard-جونز برای مدل آب TIP4P/2005، q بار الکتریکی هر ذره و ϵ_r و ϵ_0 به ترتیب نفوذپذیری خالص و نسبت نفوذپذیری هستند.

همان‌طور که پیشتر گفته شد، برای شبیه‌سازی دقیق‌تر سامانه لازم است تا نیروهای بلند برد نیز در محاسبات وارد شوند. از این رو از روش PPPM/dispersion ارائه شده توسط Isele-Holder و همکارانش استفاده شد [۲۶]. پارامترهای موجود در این روش در جدول ۱ لحاظ شده‌اند:

حصول اطمینان از نحوه اعمال پتانسیل EAM به نانوذرات، کشش سطحی نانوسیال آب-طلا در شرایط یکسان با کار Lu و همکاران [۲۸] مقایسه شد. در این قسمت نیز با غلظت حجمی ۳/۴ نانوذره طلا با قطر ۶ nm و خطای حدود ۴ درصد کشش سطحی ۷۸ mN/m محاسبه شد.

در بررسی اثرات گرمایی بر نانوسیال طلا ابتدا لازم است شبیه‌سازی، اعتبار‌سنجی مجدد شود، چون برای محاسبه دما لازم است معادلات حاکم دیگری لحاظ شوند. بر این اساس ابتدا به اعتبار‌سنجی سامانه، شامل یک نانوذره طلا با ۸۲۰ اتم طلا داخل یک استخر آب با ۲۰۰۰۰ مولکول آب پرداخته و نتایج با کار Chen و همکارانش [۲۹] مقایسه شد. نتایج به‌دست‌آمده حدود ۵ درصد خطا داشت که به علت تفاوت در مدل انتخابی برای مولکول آب (تفاوت در مدل TIP4P و TIP3P) منطقی است. در شکل ۴ مقایسه نتایج به‌دست‌آمده با نتایج Chen و همکارانش نمایش داده‌شده است.



شکل ۴: مقایسه نتایج به‌دست‌آمده از اعتبار‌سنجی شبیه‌سازی دما با بررسی Chen

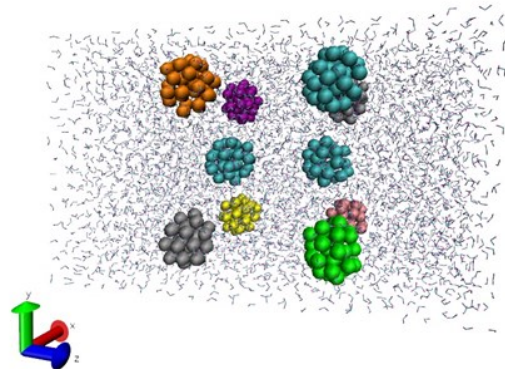
۲-۷- روش مدل‌سازی SNEMD برای بررسی انتقال حرارت

یکی از روش‌های بررسی و مدل‌سازی نحوه انتقال و رسانش گرمایی بین سطوح نانوذره و محلول، روش SNEMD است. در این روش نانو ذرات و مولکول‌های آب اطراف آن به‌صورت یک BOX با مرزهای مشخص مدل می‌شوند. نانوذرات و مولکول‌های آب اطراف به ترتیب با استفاده از یک ترموستات گرم در دمای ۳۹۵ K و یک ترموستات سرد در دمای ۳۰۰ K ثابت نگه‌داشته شده‌اند. سپس، با تعریف لایه‌های هم‌مرکز

دهند. تعداد اتم‌های طلا در این نانو ذرات به ترتیب ۷، ۱۶، ۳۲ و ۴۲ است. در شبیه‌سازی، ابتدا هر نانوذره طلا به‌طور مجزا شبیه‌سازی شده و پس از متعادل‌سازی به آب افزوده شد. در شکل‌های ۲ و ۳ به ترتیب یک نانوذره طلا با ۳۲ اتم طلا و نانو سیال آب-طلای شبیه‌سازی شده نمایش داده‌شده است.



شکل ۲: نانوذره طلا با قطر ۱۰ آنگستروم



شکل ۳: نانو سیال آب-طلا شبیه‌سازی شده در LAMMPS

۲-۶- اعتبار‌سنجی

برای اعتبار‌سنجی شبیه‌سازی، نتایج این کار با نتایج حاصل از سه بررسی انجام‌گرفته، مقایسه شد. ابتدا با مدل آب SPCE، تنش سطحی آب مشابه کار Isele-Holder و همکارانش به دست آمد [۲۶] تا به‌نوعی روش حل بلند برد این کار اعتبار‌سنجی شود. در این اعتبار‌سنجی مقدار کشش سطحی ۶۱ mN/m محاسبه شد که با مقایسه با مقدار محاسبه شده در مقاله حدود ۱ درصد خطا مشاهده شد. سپس، مدل آب از SPCE به TIP4P/2005 تغییر داده و نتیجه با کار Mountain [۲۷] مقایسه شد تا از نحوه شبیه‌سازی مدل آب اطمینان حاصل شود. کشش سطحی به‌دست‌آمده ۷۲ mN/m بود که خطا کمتر از ۲ درصد است. در پایان نیز پس از افزودن نانوذرات به سامانه، برای

با ضخامت 0.2 nm از آب که در اطراف نانوذره قرار گرفته اند، پروفایل گرمایی در آب محاسبه شدند.

برای محاسبه رسانش گرمایی بین نانو ذرات و نخستین لایه آب اطراف آن از معادله زیر استفاده می شود:

$$G = \frac{dE}{A \Delta T} \quad (3)$$

که dE/dt ، A و ΔT شار گرمایی، سطح تماس نانوذره و آب و تغییر و افت گرمایی بین نانوذره و نزدیک ترین لایه آب اطراف آن را نشان می دهد. سامانه نانوذرات و آب در ابتدا در طول گستره زمانی 100000 step در فواصل زمانی 20 ps متعادل شدند. سپس، در حالی که مولکول های آب در فاصله 20 \AA از نانوذرات قرار گرفته بودند، نانوذرات با یک توان ثابت تا در دمای 395 K گرم شدند.

۲-۸- سازوکار انتقال گرما در آب اطراف نانوذره

از مطالعات پیشین انجام شده در رابطه با سازوکار انتقال حرارت از نانوذره به آب اطراف آن، می توان نتیجه گرفت که چگالی نخستین لایه آب اطراف نانوذره متفاوت از سایر لایه ها است [۳۰، ۳۱]. بر اساس مدل های ارائه شده در سایر مقالات، رفتار گرمایی لایه های آب در نزدیکی نانوذره می تواند با یک مدل شبه جامد و یک سازوکار هدایت گرمایی بین لایه ها توضیح داده شود [۳۲]. این مدل این فرضیه را بیان می کند که مقداری آب ساختاریافته در نزدیکی نانوذره وجود دارد و می توان معادلات هدایت گرمایی برای نانوذرات و آب اطراف آن ها را با دو معادله زیر برای نانوذره

$$\frac{\partial^2(rT_{np})}{\partial r^2} = \frac{1}{\alpha_{np}} \frac{\partial(rT_{np})}{\partial t} \quad 0 < r < R \quad (4)$$

$$\frac{\partial T_{np}(r,t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \quad (5)$$

$$k_{np} \frac{\partial T_{np}(r,t)}{\partial r} \Big|_{r=R} = G(T_{np} - T_W(R,t)) \quad (6)$$

$$T_{np}(r,0) = T_i \quad (7)$$

و آب

$$\frac{\partial^2(rT_W)}{\partial r^2} = \frac{1}{\alpha_W} \frac{\partial(rT_W)}{\partial t} \quad (8)$$

$$-k_W \frac{\partial T_W(r,t)}{\partial r} \Big|_{r=R} = G(T_{np} - T_W(R,t)) \quad (9)$$

$$T_W(r \rightarrow \infty, t) = T_{W0} \quad (10)$$

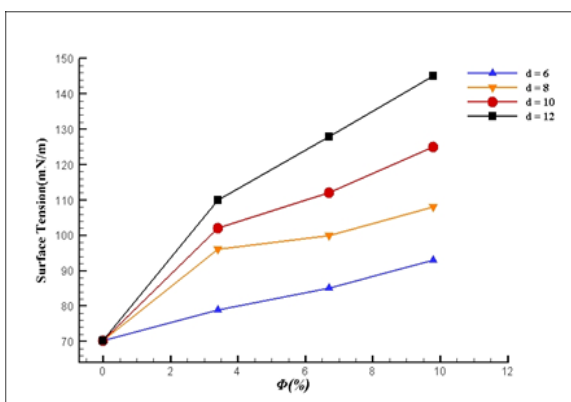
$$T_W(R,0) = T_{W0} \quad (11)$$

بررسی کرد. که T_i دمای اولیه نانوذرات است که معادل 395 K است و T_{W0} همدمای اولیه آب دور از نانوذرات است که بر اساس نتایج مطالعات دینامیک مولکولی که نشان داده اند، لایه های آب در ناحیه دورتر از 2 nm دمای نزدیک 300 K دارند، 300 K فرض می شود. برای حل دو معادله ویژگی های ترموفیزیکی نانوذرات و آب اطراف آن نیاز است. برای این منظور، فرض می کنیم که نانوذرات ویژگی های یک توده طلا را دارند.

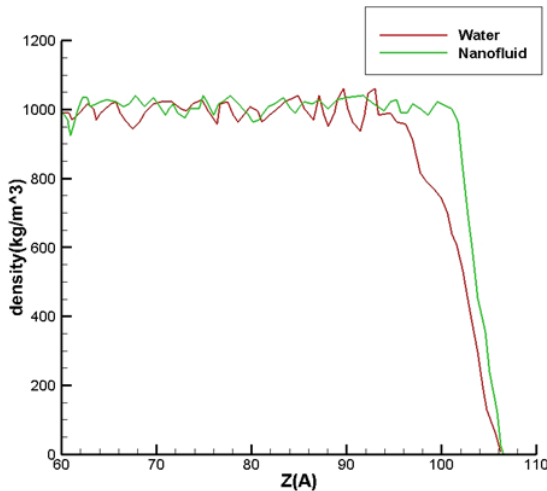
۳- بحث و نتایج

۳-۱- نتایج حاصل از محاسبه کشش سطحی

نتایج حاصل از محاسبه کشش سطحی نانو سیال آب- طلا در قطرهای متفاوت نانوذرات و نسبت چگالی نانوذرات به آب در شکل ۵ نشان داده شده است.



شکل ۵: محاسبه کشش سطحی نانو سیال آب- طلا در قطرهای متفاوت نانو ذرات و نسبت چگالی نانو ذرات به آب



شکل ۶: چگالی آب درون نانو سیال با غلظت حجمی ۳/۴ و نانو ذرات با قطر ۶ آنگستروم در مقایسه با حالت خالص

جدول ۲: چند نمونه از ضخامت لایه گذار مایع به بخار یا سطح تقابل مایع-بخار

غلظت حجمی نانو ذره	ضخامت (Å)	قطر نانو ذرات (Å)
۳/۴	۵/۳	۶
۳/۴	۴/۲	۱۲
۶/۷	۴/۱	۱۰
۶/۷	۳/۶	۱۲
.	۱۲/۱	.

۳-۳- نتایج حاصل از بررسی رسانش گرمایی نانو ذرات به آب

همان طور که گفته شد، در مرحله نخست برای بررسی رسانش حرارتی بین نانو ذرات و آب لازم است دو سامانه نانو ذرات و مولکول های آب با دو ترموستات گرم و سرد به ترتیب در درمای ۳۹۵K و ۳۰۰K ثابت نگه داشته شوند. سپس، با در نظر گرفتن لایه های هم مرکز از انتقال آب در اطراف نانو ذره، پروفیل گرمایی در آب حل می شود. نتایج حاصل از محاسبات نشان می دهد که G بین $150 \text{ MW/m}^2/\text{k}$ تا 160 در گستره گرمای مورد بررسی متغیر است. برای سامانه آب-طلا مقدار محاسبه شده برای هدایت و رسانش گرمایی در دمای ۳۹۵k، 0.56 W/mk و $10^{-7} \text{ m}^2/\text{S}$ به دست آمد.

۳-۴- سازوکار انتقال حرارت در آب اطراف نانو ذرات

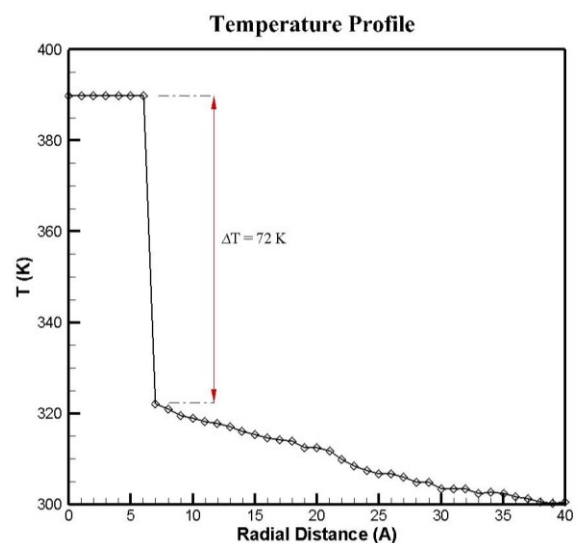
همان طور که گفته شد، دمای اولیه نانو ذرات ۳۹۵k و دمای آب اطراف نانو ذرات در لایه های دورتر از ۲nm، ۳۰۰k فرض شد.

نتایج حاصل از رسم این نمودار نشان می دهد که با افزایش نسبت حجمی نانو ذرات، کشش سطحی نانوسیال افزایش می یابد. همچنین، افزایش قطر نانو ذرات نیز باعث افزایش این پارامتر می شود. افزایش کشش سطحی به معنای افزایش انسجام مولکولی در سطح نانوسیال و در نتیجه، جلوگیری از اختلاط نانوسیال با سیالات دیگر است. که این نمایانگر انسجام بیشتر نانو ذرات برای ارسال آن در ناحیه هدف، و حفظ قابلیت ها و ویژگی های آن است. همچنین، با استفاده از این نتایج می توان نانو ذرات با قطر و غلظت های متفاوت ولی اثر گذاری مشابه را محاسبه کرد. برای مثال، با توجه به شکل ۴، نانوسیال با غلظت حجمی ۳/۴ و قطر ۱۲ آنگستروم، کشش سطحی تقریبی یکسانی با نانو سیال با غلظت حجمی ۶/۷ و قطر ۱۰ آنگستروم دارند.

۳-۲- نتایج حاصل از بررسی اثر حضور نانو ذرات بر چگالی

شکل ۶: چگالی آب درون نانوسیال با غلظت حجمی ۳/۴ و نانو ذرات با قطر ۶ آنگستروم در مقایسه با حالت خالص را نشان می دهد. با توجه به نمودار، افزودن نانو ذره به آب، باعث کاهش ضخامت سطح مایع-بخار می شود. این پدیده با مقادیر کشش سطحی به دست آمده در بالا همخوانی دارد. چراکه افزایش کشش سطحی خود دلیلی بر انسجام مولکولی بیشتر در سطح سیال است. در جدول ۲، ضخامت لایه گذار از مایع به بخار در سطح نانو سیال آورده شده است. این نتایج نیز اثر نانو ذرات در کاهش ضخامت این لایه را نشان می دهند. افزایش تراکم مولکولی نیز با بررسی ضخامت لایه سطح تقابل یا لایه گذار مشخص است. با افزایش نانو ذرات این ضخامت کاهش می یابد (جدول ۲).

ظرفیت گرمایی ویژه و رسانش گرمایی آب به ترتیب $KJ/Kg K$ و $4/2$ و $0/8 W/Mk$ بر اساس TIP4P/2005 [33] در نظر گرفته می‌شود. نتایج حاصل از محاسبات نشان می‌دهد که چگالی نخستین لایه آب اطراف نانوذره متفاوت از دیگر لایه‌ها است و رسانش گرمایی این لایه نیز شبیه دیگر قسمت‌های آب نیست. نتایج نشان می‌دهد که در فرایند خنک‌سازی نانوذرات، گرما در محلول در فاصله 2 nm در فاصله زمانی کمتر از 5 ps انتقال پیدا می‌کند و رسانش گرمایی در نخستین لایه آب نزدیک به نانوذره 50% بیش از دیگر قسمت‌های محلول است.



شکل ۷: توزیع دمای نانوذره با قطر ۱۲ آنگستروم احاطه‌شده با آب

نمودار توزیع دما برای نانوذره با قطر ۱۲ آنگستروم در شکل ۷ نشان داده شده است. از این توزیع دما مقدار اختلاف دمای بین سطح نانوذره و سیال استخراج شده و به کمک معادله ۳ رسانش گرمایی $160\text{ k}/2\text{ MW/m}$ به دست می‌آید. تغییر رسانش گرمایی برای قطره‌های کوچک‌تر نانوذره به صورت خطی تا $150\text{ k}/2\text{ MW/m}$ کاهش پیدا می‌کند.

۴- نتیجه‌گیری

نتایج حاصل از محاسبات در این بررسی نشان داد که با افزایش نسبت حجم و قطر نانوذرات، کشش سطحی نانوسیال افزایش می‌یابد. افزایش کشش سطحی به معنای افزایش انسجام مولکولی در سطح نانوسیال و در نتیجه، کاهش اختلاط نانوسیال با سیالات دیگر است. به این ترتیب ارسال آن به ناحیه هدف با

حفظ قابلیت‌ها و ویژگی‌های آن محتمل‌تر و تصویربرداری یا درمان در ارگان موردنظر، در سطح مطلوب‌تری انجام می‌شود. همچنین، با جلوگیری از پخش شدن ناخواسته نانوسیالات در بدن اثرات جانبی و آسیب به ارگان‌های دیگر داخل بدن کاهش می‌یابد. به کمک این نتایج می‌توان نانوسیال با اندازه متفاوت ولی مناسب‌تر و یا با اثرگذاری مشابه برای سنتز را تعیین کرد. از آنجایی که سنتز نانوسیال با نانوذرات کوچک‌تر پرهزینه و دشوار است، می‌توان نانوسیال با نانوذرات بزرگ‌تر با غلظت متفاوت را جایگزین دیگری کرد. نتیجه دیگری که از این بررسی به دست آمد نشان داد افزودن نانوذره به آب خالص، باعث کاهش ضخامت سطح مایع-بخار می‌شود. کاهش سطحی مایع-بخار از مقدار اختلاط سیال با سیالات دیگر می‌کاهد. در نتیجه، با تزریق نانو سیال داخل بدن، احتمال حل شدن و پخش شدن نانوذرات کاهش می‌یابد. این موضوع کمک می‌کند تا نتایج بهتری از عکس‌برداری‌ها و پرتودهی به سلول‌های سرطانی به دست آید. ارتباط کشش سطحی و پایداری نانو سیال به‌طور کامل در کار Estelle و همکارانش [34] اشاره شده است. افزون بر این، Young [35] ارتباط بین کشش‌های سطحی با زاویه تماس یک قطره آب روی سطح جامد را ارائه کرد. طبق این معادله زاویه تماس بیشتر از 90° درجه بیانگر آب‌گریز بودن سطح، و کمتر از آن آب‌دوست بودن سطح را نشان می‌دهد. با محاسبه کشش‌های سطحی می‌توان زاویه تماس را پیش‌بینی کرد. این کار کمک می‌کند تا آب‌گریز یا آب‌دوست بودن سطح جامد را پیش‌بینی نمود. آب‌دوست بودن سطح نانوذره باعث افزایش تراکم مولکولی بر روی سطح نانوذره شده که نتیجه آن انسجام مولکولی بیشتر نانو سیال است. در مطالعاتی که Erb [36] در سال ۱۹۶۷ انجام داد، زاویه تماس قطره آب با سطح طلا را حدود 65° درجه به دست آورد. از طرفی، در پژوهش انجام‌شده توسط Lu و همکارانش [28] نیز به بررسی اثر نانوسیال طلا بر کشش سطحی پرداخته شده است، با این تفاوت که در آن کار با تغییر پارامتر ε (که پارامتر تقابل بین طلا و آب در شبیه‌سازی مولکولی است) به‌عنوان متغیر، اثرات آن بر نتایج کشش سطحی بررسی شده است. این پارامتر با توجه به ویژگی‌های جامد از آزمایش‌ها استخراج می‌شود و نتایج حاصل از تغییر آن، دید روشن‌تری از اثر آب‌دوستی و آب‌گریزی بر مسائل را ارائه می‌دهد. در این پژوهش،

با کاهش ε ویژگی طلا از آب‌دوستی به آب‌گریزی تغییر کرده و نتایج کامل متناقض با بررسی پیش را نشان می‌دهد. این تناقض اثبات می‌کند که آب‌دوستی به پایداری نانوسیال کمک می‌کند که این موضوع به‌طور واضح در نتایج ارائه‌شده در نمودار ۵ و ۶ مشهود است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی فرایند انتقال حرارت از نانو ذرات طلا به آب نشان می‌دهد که آب اطراف نانوذره می‌تواند تا دمای بالا گرم شود و تا نقطه‌جوش بالا رود بدون اینکه تغییر فازی در آن اتفاق بیفتد. وقتی دیواره نانوذره گرم می‌شود آب اطراف گرم شده و تبدیل به بخار می‌شود که این لایه بخار منجر به افت مقدار انتقال گرما می‌شود. همچنین، نتایج نشان می‌دهد که در فرایند خنک‌سازی نانو ذرات، گرما در محلول در فاصله ۲ nm در فاصله زمانی کمتر از ۵ps انتقال پیدا می‌کند و رسانش گرمایی در نخستین لایه آب نزدیک به نانوذره ۵۰٪ بیش از دیگر قسمت‌های محلول است که این نتایج با بررسی انجام‌شده توسط رجب پور و همکارانش در بررسی انتقال حرارتی از نانوذرات نقره در آب در توافق است [۱۹]. مطالعات متفاوتی به بررسی اثر عوامل متفاوت بر مقدار انتقال حرارتی نانوذرات متفاوت در محلول‌های متفاوت پرداخته‌اند. Lervik و همکارانش به بررسی هدایت گرمایی بین نانو ذرات الکان و آب با استفاده از روش شبیه‌سازی TNEMD با و بدون بررسی مقاومت حرارتی داخلی نانوذرات پرداختند. نتایج نشان می‌داد که رسانش گرمایی با کاهش قطر ذرات کاهش می‌یابد [۳۷]. همچنین، Wang همکارانش با استفاده از روش SNEMD تأثیر سطح ناهمواری سطح نانوذرات و خیسی آن‌ها را بر مقدار مقاومت kapitza و رابطه سطح مؤثر مایع جامد را بررسی کردند. نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها نشان می‌داد که مهم‌ترین فاکتور بر مقاومت kapitza طول پیوند اتمی مایع جامد است و مقاومت با افزایش ناهمواری سطح و خیسی کاهش می‌یابد [۳۸]. Xue و همکارانش به بررسی اثر لایه‌بندی مایع بر سطح مؤثر مایع و نانو ذرات و مقدار مقاومت حرارتی آن پرداختند و نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های آن‌ها نشان می‌داد لایه‌بندی فاکتور مهمی در انتقال حرارت نانو سیال ناست [۳۹]. Hu و Sun با انجام شبیه‌سازی‌های SNEMD اثر نانو ساختارها بر مقدار مقاومت kapitza بین مولکول‌های آب و طلا در حال جوش را بررسی کردند. نتایج نشان می‌داد که جوشاندن تأثیری بر مقاومت

سطحی kapitza ندارد [۱۸]. Pham و همکارانش با انجام بررسی مشابه، نقش فشار بر مقاومت kapitza در نانو سامانه آب-طلا و آب-سیلیکون را با روش SNEMD بررسی کردند و دریافتند که فشار نقش مهمی در هدایت حرارتی سطحی در سطح آب‌گریز جامد ایفا می‌کند [۴۰]. Wu و همکارانش نیز با استفاده از روش EMD و همچنین، آزمایش‌های تجربی، انتقال بسیار سریع و سازوکار انتقال حرارتی در سراسر لایه‌های سوفاکتانت از نانو میله‌های طلا را در محلول‌های آبی مشاهده کردند. نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها نشان می‌داد که رابطه بین لایه‌های سوفاکتانت و نانو میله‌های طلا به‌طور چشمگیری مانع از جریان گرما می‌شود [۴۱]. درحالی‌که در بررسی Soussi و همکارانش با استفاده از روش مشابه EMD و شبیه‌سازی نانو سامانه طلا-آب و با یک پوشش بسپاری بر نانو ذرات طلا، نتایج حاکی از افزایش انتقال حرارتی سطح رسانا باوجود پوشش بسپاری بود [۴۲]. با افزایش چگالی مولکولی در سطح نانوسیال و کاهش سطح تقابل لایه سطحی، احتمال اختلاط نانوسیال با مایعات داخل بدن کاهش می‌یابد. این پدیده می‌تواند به منجر به بالا رفتن بازده نانوسیال در روش‌های تشخیصی و درمانی شود. نتایج حاصل از این بررسی و مطالعات دیگر بر فرایند خنک‌سازی نانوذرات نشان می‌دهد، رسانش گرمایی در نخستین لایه اطراف نانوذره (در فاصله کمتر از ۲nm، ۵۰٪ بیش از قسمت‌های دیگر است، هرچند احتمال رسانش گرمایی با کاهش قطر ذرات کاهش می‌یابد و طول پیوند اتمی جامد-مایع، خیسی، ناهمواری سطح نانوذره، فشار و جنس مایع اطراف نانوذره از عوامل دیگر مؤثر بر هدایت گرمایی نانوذرات هستند. اما دمای مایع اطراف نانوذره از فاصله ۲nm به بعد به‌شدت افت می‌کند. با این نتیجه‌گیری می‌توان نتیجه گرفت که در صورت استفاده از نانوذرات طلا در هایپرترمیا، در صورت ورود صحیح نانوذرات به داخل بافت‌های سرطانی، می‌توان مقدار مناسب گرما به داخل بافت تومور منتقل کرده و در اثر افزایش دما سلول‌های سرطانی را نابود کرد. درحالی‌که، در اثر افت شدید گرما از لایه اول اطراف نانوذره، در بافت‌های سالم اطراف تومور مقدار حرارت بسیار کم بوده و منجر به آسیب به این سلول‌ها نخواهد شد.

تشکر و قدردانی

این مقاله بر اساس طرح تحقیقاتی مصوب دانشگاه علوم پزشکی همدان با شماره ۹۶۱۰۱۹۶۶۲۴ مورخ ۹۶/۱۰/۱۹ انجام شده و کلیه هزینه‌های مربوطه توسط معاونت تحقیقات و فناوری دانشگاه علوم پزشکی همدان تأمین شده است.

مراجع

- [6] X.D. Zhang, D. Wu, X. Shen, J. Chen, Y.M. Sun, P.X. Liu, X.J. Liang, "Size-dependent radiosensitization of PEG-coated gold nanoparticles for cancer radiation therapy", *Biomaterials*, 33, 27,6408-19, 2012.
- [7] J.Y. Wang, J. Chen, J. Yang, H. Wang, X. Shen, Y.M. Sun, M. Guo, X.D. Zhang, "Effects of surface charges of gold nanoclusters on long-term in vivo biodistribution, toxicity, and cancer radiation therapy", *International Journal of Nanomedicine*, 11,27,3475-3485, 2016.
- [8] N. Ma, F.G Wu, X. Zhang, Y.M. Jiang, H.R. Jia, H.Y. Wang, Y.H. Li, P. Liu, N. Gu, Z. Chen, "Shape-Dependent Radiosensitization Effect of Gold Nanostructures in Cancer Radiotherapy: Comparison of Gold Nanoparticles, Nanospikes, and Nanorods" *ACS Appl Mater Interfaces*, 9,15, 13037-13048, 2017.
- [9] M.A. Sirotkina, V.V. Elagin, M.V. Shirmanova, M.L. Bugrova, L.B. Snopova, V.A. Kamensky, V.A. Nadtochenko, N.N. Denisov, E.V. Zagaynova, "OCT-guided laser hyperthermia with passively tumor-targeted gold nanoparticles" *J Biophotonics*, 3, 718-27, 2010.
- [10] A. Shiotani, Y. Akiyama, T. Kawano, Y. Niidome, T. Mori, Y. Katayama, T. Niidome, "Active accumulation of gold nanorods in tumor in response to near-infrared laser irradiation", *Bioconjug Chem.*, 17,21,11,2049-54, 2010.
- [11] Z. Zdrojewicz, M. Waracki, B. Bugaj, D. Pypno, K. Cabała, "Medical applications of nanotechnology", *Postępy higieny i medycyny doświadczalnej*, 69,1196, 2015.
- [12] G. Frens, "Controlled Nucleation for the Regulation of the Particle Size in Monodisperse Gold Suspensions", *Nature: Phys. Sci*, 241, 20-22, 1973.
- [13] B. Shi, Y.K. Shin, A.A. Hassanali, S.J. Singer, "Biomolecules at the amorphous silica/water interface: Binding and fluorescence anisotropy of peptides", *Colloids Surfaces B Biointerfaces*, 157, 83-92, 2017.
- [1] M. Faraday, "The bakerian lecture: Experimental relation of gold (and other metals) to light". *Philos. Trans. R. Soc. Lond*, 147, 145-181, 1857.
- [2] M. Giersig, P. Mulvaney, "Preparation of ordered colloid monolayers by electrophoretic deposition. *Langmuir*", 9, 3408-3413, 1993.
- [3] M. Haruta, T. Kobayashi, H. Sano, N. Yamada, "Novel Gold Catalysts for the Oxidation of Carbon Monoxide at a Temperature far below 0 °C", *Chem. Lett*, 405-406, 1987.
- [4] A. Henglein, "Radiolytic Preparation of Ultrafine Colloidal Gold Particles in Aqueous Solution: Optical Spectrum, Controlled Growth, and Some Chemical Reactions", *Langmuir*, 15, 6738, 1999.
- [5] مریم فرحناک ضرابی، زهرا صفاری، عظیم اکبرزاده، "تهیه و کاربردهای زیستی، کاتالستی و پزشکی نانوذره های طلا"، *مجله تازه های بیوتکنولوژی سلولی-مولکولی*، ۱۳، ۴، ۱۷-۹، ۱۳۹۲.

- [26] R.E. Isele-Holder, W. Mitchell, A.E. Ismail, "Development and application of a particle-particle particle-mesh Ewald method for dispersion interactions", *The Journal of chemical physics*, 137, 17, 174107-174121, 2012.
- [27] R.D. Mountain, "An internally consistent method for the molecular dynamics simulation of the surface tension: application to some tip4p-type models of water", *The Journal of Physical Chemistry*, 113, 2, 482-486, 2008.
- [28] G. Lu, Y.Y. Duan, X.D. Wang, "Surface tension, viscosity and rheology of water-based nanofluids: a microscopic interaction on the molecular level", *Journal of Nanoparticle Research*, 16, 112-118, 2014.
- [29] P.C. Chen, P. Roy, L.Y. Chen, R. Ravindranath, H.T. Chang, "Gold and Silver Nanomaterial-Based Optical Sensing Systems", *Part Part Syst Charact*, 31, 917-942, 2014.
- [30] M.M. Heyhat, A. Rajabpour, M. Abbasi, S. Arabha, "Importance of Nanolayer Formation in Nanofluid Properties: Equilibrium Molecular Dynamic Simulations for Ag-Water Nanofluid", *J. Mol. Liq*, 12, 67-78, 2018.
- [31] Y. Ma, Z. Zhang, J. Chen, K. Sääskilähti, S. Volz, J. Chen, "Ordered water layer induced by interfacial charge decoration leads to an ultra-low Kapitza resistance between graphene and water", *Carbon N.Y.*, 135, 263-269, 2018.
- [32] M. Frank, D. Drikakis, "Solid-like heat transfer in confined liquids," *Microfluid. Nanofluidics*, 21, 9, 148, 2017.
- [33] F. Römer, A. Lervik, F. Bresme, "Nonequilibrium molecular dynamics simulations of the thermal conductivity of water: A systematic investigation of the SPC/E and TIP4P/2005 models", *J. Chem. Phys.*, 137, 134-142, 2012.
- [34] P. Estelle, D. Cabalerio, G. Zyla, L. Lugo, S.M.S. Murshed, "Current trends in surface tension and wetting behavior of nanofluids", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 94, 931-944, 2018.
- [14] A. Vallee, V. Humblot, C.M. Pradier, "Peptide Interactions with Metal and Oxide Surfaces", *Acc. Chem. Res.*, 43, 10, 1297-1306, 2010.
- [15] P.L. Kapitza, "Heat transfer and superfluidity of helium II", *Phys. Rev.*, 60, 4, 354-355, 1941.
- [16] Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas. 2014.
- [17] S. Merabia, S. Shenogin, L. Joly, P. Keblinski, J. L. Barrat, "Heat transfer from nanoparticles: A corresponding state analysis", *PNAS*, 106, 36, 15113-15118, 2009.
- [18] H. Hu, Y. Sun, "Effect of nanopatterns on Kapitza resistance at a water-gold interface during boiling: A molecular dynamics study" *J. Appl. Phys.*, 112, 5, 2012.
- [19] A. Rajabpour, R. Seif, S. Arabha, M.M. Heyhat, S. Merabia, A. Hassanali, "Thermal transport at a nanoparticle-water interface: A molecular dynamics and continuum modeling study", *J. Chem. Phys.*, 150, 11-20, 2019.
- [20] B.J. Alder, T.E. Wainwright, "Studies in molecular dynamics. I. General method", *The Journal of Chemical Physics*, 31, 2, 459-466, 1959.
- [21] A.I. Jewett, Z. Zhuang, J.E. Shea, "Moltemplate a coarse-grained model assembly tool" *Biophysical Journal*, 104, 2, 2013, 169, 2013.
- [22] M. Nikzad, A.R. Azimian, M. Rezaei, S. Nikzad, "Water liquid-vapor interface subjected to various electric fields: A molecular dynamic study", *The Journal of Chemical Physics*, 147, 20, 204701-7, 2017.
- [23] R.W. Hockney, J.W. Eastwood, "Computer simulation using particles", *crc Press*, 1988.
- [24] U. Essmann, L. Perera, M.L. Berkowitz, T. Darden, H. Lee, "Pedersen LG. A smooth particle mesh Ewald method", *The Journal of chemical physics*, 103, 8577-8593, 1995.
- [25] M.J.P. Nijmeijer, C. Bruin, A.F. Bakker, J.M.J. Van Leeuwen, "Wetting and drying of an inert wall by a fluid in a molecular-dynamics simulation", *Physical Review*, 42, 10, 6052-6059, 1990.

- [35] T. Young, Phil. Trans. R. Soc. Lond. 95, 65-71, 2006.
- [36] R.A. Erb, "The wettability of Gold", The Journal of Physical Chemistry, 14, 112-119, 1967.
- [37] A. Lervik, F. Bresme, S. Kjelstrup, "Heat transfer in soft nanoscale interfaces: the influence of interface curvature" Soft Matter, 5, 2407-2412, 2019.
- [38] Y. Wang, P. Keblinski, "Role of wetting and nanoscale roughness on thermal conductance at liquid-solid interface", Appl Phys Lett, 99, 1-3, 2011.
- [39] L. Xue, P. Keblinski, S.R. Phillpot, S.U.S. Choi, J.A. Eastman, "Effect of liquid layering at the liquid-solid interface on thermal transport", Int. J. Heat Mass Transf, 47, 4277-4284, 2004.
- [40] A. Pham, M. Barisik, B. Kim, "Pressure dependence of Kapitza resistance at gold/water and silicon/water interfaces", J. Chem. Phys, 139, 1-10, 2013.
- [41] X. Wu, "Thermal Transport across Surfactant Layers on Gold Nanorods in Aqueous Solution", ACS Appl. Mater. Interfaces, 8, 10581-10589, 2016.
- [42] J. Soussi, S. Volz, B. Palpant, A. Chalopin, "A detailed microscopic study of the heat transfer at a water gold interface coated with a polymer", Appl. Phys. Lett, 106, 9, 93113-93117, 2015.

Surface characteristics and thermal conductivity of Gold-water nanostructure using Molecular Dynamic simulation

MR. Nikzad,¹ S. Nikzad^{2*}

¹ Department of Mechanical Engineering, Khomeinishahr Branch, Islamic Azad University, Khomeinishahr, Isfahan, Iran

² Department of Medical physics, Faculty of Medicine, Hamadan University of Medical Physics, Hamadan, Iran

Abstract: The aim of this study is simulating a system of water-GNPs and investigating nanofluid specifications and heat transfer processes from nanoparticles to solution. The initial condition is coordinated by the use of Packmol and Moltemplate codes, General equations were applied by the use of LAMMPS open-source code. Post-Processing methods were done by the use of MATLAB, VMD and Python software. Heat transfer processes from GNPs to solution investigated by the use of SNEMD method.

According to the result, adding GNPs reduces the interface layer and increases surface tension value. The rate of surface tension and mole fraction enhancement with the bigger GNPs is greater than the system with smaller GNPs. In cooling processes, the heat transfers fewer than 5ps in 2mm and heat conduction in the first layer of water is 50% greater than other parts of the fluid. It can be concluded that, when the molecular density increases near the surface of Nanofluid, and reduction of surface tension, Nanofluids dispersion with organic fluid is less possible. This phenomenon helps to increase the diagnosis and treatment efficiency. Therefore, by the use of GNPs in Hyperthermia, Increasing temperature has higher impacts on cancer cells closer to GNPs than far normal cells.

Key words: Molecular dynamic, liquid vapor interface, Gold Nanoparticles, Thermal conductivity