

مروری بر نانو حباب‌ها: روش‌های تولید، ویژگی‌ها و مطالعات محاسباتی

معصومه فروتن^{۱*}، مریم حمزه جونقانی^۲

^۱استاد گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، پردیس علوم، دانشگاه تهران، ایران
^۲دانشجوی کارشناسی ارشد گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، پردیس علوم، دانشگاه تهران، ایران

چکیده

نانو حباب‌ها، حباب‌هایی با ابعاد نانو هستند که می‌توانند بر سطوح جامد و یا در محلول تشکیل شوند. از این رو کاربردهای مهمی در بسیاری از فرایندهای فیزیکی و شیمیایی و زیستی دارند. درک ویژگی‌های اساسی حباب‌ها مانند پایداری، رشد و انحلال آن‌ها می‌تواند در کاربردهای بیشتر آن‌ها کمک کند. در سال‌های اخیر مطالعات تجربی و نظری بسیاری در حوزه‌ی نانوحباب‌ها انجام شده است. در این مقاله‌ی مروری، روش‌های تولید نانوحباب‌ها، کاربرد، پایداری و طول عمر و برخی از ویژگی‌های آن‌ها به صورت تجربی و نظری به ویژه با رویکرد شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ارائه شده است.

واژه‌های کلیدی: نانو حباب‌های سطحی، پایداری نانو حباب‌ها، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

ایمیل نویسنده‌ی مسئول: Foroutan@khayam.ut.ac.ir

۱- مقدمه

نانوحباب‌ها اشاره شده است سپس، عوامل موثر بر پایداری نانوحباب‌ها بیان شده است.

۲- روش‌های تولید نانوحباب‌ها

۲-۱- فرایند تبادل حلال

از جمله روش‌های پرکاربرد برای تشکیل نانو حباب‌ها، فرایند تبادل حلال است [۴ و ۵]. اولین آزمایش در این زمینه توسط لوهس^۵ و همکارانش انجام شده است [۳]. آن‌ها از اتانول برای تمیز کردن سطوح جامد استفاده کردند و بعد از تزریق آب برای تبادل با اتانول توانستند نانو حباب‌ها را بر روی بستر مشاهده کنند. علاوه بر اتانول، سایر حلال‌های آلی مانند متانول و ایزوپروپانول در فرایند تبادل حلال به کار می‌روند. دیگر فرایندهای مبادله مانند تبادل آب سرد با آب گرم [۶] و محلول اتانول با محلول نمک [۷] برای تولید نانو حباب‌ها موفقیت‌آمیز بوده است. هم‌چنین فرایند تبادل حلال می‌تواند برای تولید نانوحباب‌های سطحی [۸ و ۹] در فصل مشترک مایع-جامد و حتی یک ماده امتزاج ناپذیر استفاده شود. از این رو مکانیسم هسته‌زایی نانو حباب‌ها مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته است. کیانشیانگ^۶ و همکارانش ویژگی‌های دینامیکی فرایند تبادل حلال را برای تولید نانوحباب‌ها به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. که در شکل ۱ نشان داده شده است [۱۰].

ایجاد حباب فعالیت لذت بخشی است که همه‌ی ما در دوران کودکی خود تجربه کرده‌ایم. یک مثال واضح، دمیدن هوا به داخل مایع است که مقداری انرژی یا کار برای غلبه بر اثر کشش سطحی لازم است تا حباب ایجاد شود. انرژی کلی سطح حباب را می‌توان با به حداقل رساندن سطح، کاهش داد و حباب کوچکی به شکل کره ایجاد می‌شود. کره شکلی است که کمترین سطح را برای حجم معینی از گاز دارد. نانو حباب‌ها در واقع فضاهای خالی یا پر از گاز هستند که به شکل یک کلاهک کروی با ارتفاعی تا ده‌ها نانومتر و قطر جانبی در محدوده‌ی صدها نانومتر تا چندین میکرومتر در فصل مشترک جامد-مایع مشاهده شده‌اند. نانو حباب‌ها، اولین بار توسط پارکر^۱ و همکارانش در سال ۱۹۹۴ برای توضیح جاذبه‌ی بلندبردی که بین سطوح آب‌گریز در محلول‌های آبی وجود داشت، مطرح شدند [۱]. کمی بعد دو گروه ایشیدا^۲ [۲] و لویی^۳ [۳] توانستند در سال ۲۰۰۰ با کمک میکروسکوپ نیروی اتمی در مد تماسی^۴ نانوحباب‌های سطحی را به تصویر درآورند. پس از آن گروه‌های متفاوتی با بهره‌گیری از میکروسکوپ نوری و طیف‌سنجی، وجود نانوحباب‌های سطحی و ماهیت گازی آن‌ها را تایید کردند. در این مقاله‌ی مروری به صورت تجربی و شاخه‌های متفاوت علوم نظری مانند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی نانو حباب‌ها می‌پردازیم. ابتدا به روش‌های پرکاربرد تولید

^۱ Parker

^۲ Ishida

^۳ Lou

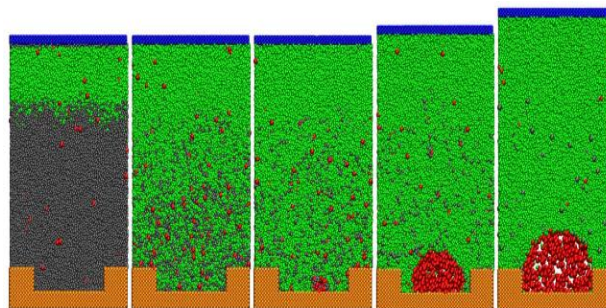
^۴ Tapping mode atomic force microscopy

^۵ Lohse

^۶ Qianxiang

مناطق را دارند که عمل جراحی در آنها دشوار است. هم‌چنین طراحی نانوذرات به گونه‌ای است که می‌توانند به طور انتخابی به غشای سلول‌های تومور متصل شوند و با قرارگیری در معرض لیزر، نانوحباب‌هایی تولید می‌کنند که به طور مکانیکی به غشای سلولی آسیب می‌رسانند و سلول‌های تومور را از بین می‌برند. بنابراین از نانو ذرات طلا به دلیل خواص شیمیایی، بیولوژیکی [۲۳]، هدایت خوب گرما و نور در روش‌های تجربی [۲۴ و ۲۵] و علوم نظری برای مطالعه پدیده‌های انتقال حرارت مرتبط با نانو ذرات به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شده است [۲۶]. نانو ذرات را می‌توان با قرار دادن در معرض لیزرهای پرقدرت [۲۱ و ۲۲] و حتی با تابش مستقیم نور خورشید [۱۳ و ۱۴] گرم کرد.

شناخت دقیق مکانیسم تولید نانوحباب‌ها می‌تواند پدیده‌های جالبی را در ارتباط با انتقال حرارت و تغییر فاز در مقیاس نانو نشان دهد. البته پژوهش‌های مشابهی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام شده است که چنین آزمایشاتی را تقلید می‌کند. ساسیکومار^{۱۴} و همکارانش به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از تشکیل یک نانو حباب بخار هنگامی که دمای مایع اطراف نانو ذره تقریباً ۹۰ درصد دمای بحرانی باشد، خبر دادند [۲۷]. مرابیا^{۱۵} و همکارانش به کمک شبیه‌سازی نشان دادند که یک نانو ذره‌ی کروی که کاملاً در مایع غوطه‌ور است در دمای بالاتر از دمای ذوب مایع گرم می‌شود [۲۸]. تشکیل یک نانو حباب فرایندی بسیار زودگذر است که پس از شکل‌گیری متلاشی می‌شود. از طرفی سینتیک شکل‌گیری و فروپاشی نانوحباب‌ها به صورت تجربی بررسی نشده است که عمدتاً به دلیل دشواری در توصیف دقیق خصوصیات انتقال فاز مایع-بخار در نزدیکی سطح نانو ذرات است. بنابراین طراحی آزمایشات برای درک فیزیک این پدیده و مشاهده‌ی خصوصیات آن یک کار چالش برانگیز است. لومبارد^{۱۶} و همکارانش به تازگی توانستند شبیه‌سازی مبتنی بر سینتیک تولید نانوحباب‌ها را در اطراف نانو ذرات گرم شده انجام دهند [۲۹] و گزارش کردند که در جریان شبیه‌سازی ابتدا نانو حباب بخار شکل می‌گیرد، سپس منبسط و در آخر متلاشی می‌شود. شانتانو^{۱۷} و همکارانش تأثیر گاز محلول در تشکیل نانو حباب در دمای بالاتر از دمای بحرانی مایع اطراف نانوذره گرم شده را به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی گزارش کردند [۳۰] که در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل ۱. هسته‌زایی نانوحباب با کمک فرایند تبادل حلال [۱۰]

شکل ۱ هسته‌زایی نانوحباب‌ها را در فرایند تبادل حلال به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان می‌دهد که ذرات سبز آب، خاکستری اتانول، قرمز گاز، آبی بستر بالایی و نارنجی بستر پایینی است. همان طور که شکل نشان می‌دهد وقتی از سمت چپ به راست حرکت می‌کنیم آب با اتانول جایگزین می‌شود و تعداد مولکول‌های گاز در توده‌ی محلول افزایش می‌یابد. بدین ترتیب اشباع بیش از حد گاز در نزدیکی بستر نسبت به فاصله‌های دورتر از آن منجر به هسته‌زایی نانوحباب‌ها بر بستر آب‌گریز پایینی می‌شود.

۲-۲- افزایش دمای بستر:

انتقال حرارت در موضوعات بنیادی و تکنولوژیکی با مقیاس میکرون به تازگی توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده است. گسترش سریع این موضوع تا حد زیادی با توسعه‌ی فناوری‌های نانو همراه شده است. بر این اساس تبادل گرما بین یک نانو ذره‌ی جامد و مایع اطراف آن موضوعی مهم در بحث انتقال حرارت با مقیاس نانو است. علاوه بر این نانو ذرات فلزی می‌توانند به عنوان منبع گرما موضعی در مقیاس نانومتر عمل کنند. از این رو در زمینه‌های متفاوتی مانند واکنش‌های کاتالیزوری [۱۱ و ۱۲]، تبدیل انرژی خورشیدی [۱۳ و ۱۴]، رشد گیاه و جوانه‌زنی بذر [۱۵ و ۱۶]، شناورسازی^۹ [۱۷]، تصفیه‌ی آب^۸ [۱۸ و ۱۹]، تمیز کردن سطوح [۲۰] و پزشکی مانند انتقال دارو، تصویربرداری، درمان سرطان^{۱۰} [۲۱ و ۲۲]، درمان‌های فوتوترمال^{۱۱} و هایفوترپی^{۱۲} کاربرد دارند.

روش‌های درمان حرارتی نسبت به روش‌های متداول برای معالجه‌ی سرطان چندین مزیت دارند. از جمله این که غیرتهاجمی^{۱۳} و ساده هستند و پتانسیل درمان تومورهای جاسازی شده در

⁷ Seed germination

⁸ Froth flotation

⁹ Water remediation

¹⁰ Cancer treatment

¹¹ Photothermal therapy

¹² Hippotherapy

¹³ Noninvasive

¹⁴ Sasikumar

¹⁵ Merabia

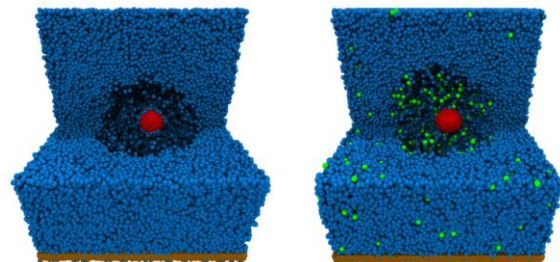
¹⁶ Lombard

¹⁷ Shantanu

شش لایه‌ی داخلی (صورتی) به عنوان منبع حرارت و یک لایه‌ی خارجی (بنفش) همانند ترموستات عمل می‌کند. فضای بین بستر بالا و پایین با اتم‌های آرگون سبز رنگ پر شده است. طبق شکل، هسته‌ی اولیه‌ی نانو حباب بخار در ۱۰۰ پیکوثانیه بر روی بستر پایینی که شیاردار است، تشکیل می‌شود و با گذشت زمان اندازه و موقعیت مکانی آن تغییر می‌کند تا تعادلی بین حرکت اتم‌های آرگون در داخل و خارج نانو حباب بخار ایجاد شود.

۳-۲- الکتروشیمیایی

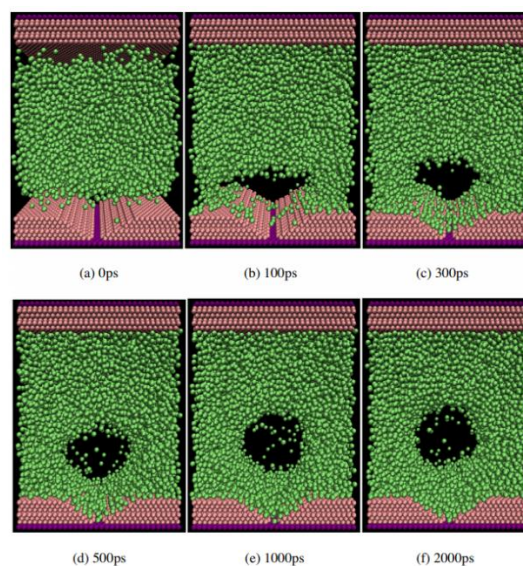
تولید الکتروکاتالستی نانو حباب‌ها نقش مهمی در فرایندهایی مانند کاهش سوخت با کاهش کربن دی‌اکسید [۳۲]، تشکیل نانو حباب هیدروژن [۳۳]، اکسیداسیون الکتریکی متانول [۳۴ و ۳۵] و سنتز صنعتی کلر [۳۶] دارد. تشکیل نانو حباب‌های گاز در فصل مشترک الکتروود و الکترولیت [۳۷ و ۳۸] آثار مخربی دارد که می‌توان به کاهش کارایی فرایندهای الکتروشیمیایی به دلیل مسدود شدن سطوح کاتالیزوری و افزایش بیش از حد انرژی پتانسیل واکنش اشاره کرد [۳۹-۴۲]. درک مولکولی مکانیسم‌ها و عواملی که تشکیل، انحلال و رفتار الکتروشیمیایی نانو حباب‌های گاز را کنترل می‌کنند، در طراحی فرایندهای الکتروشیمیایی حائز اهمیت است. در همین راستا تولید نانوحباب‌های گازهای اکسیژن، هیدروژن و نیتروژن بر نانوالکترودهایی با شعاع ۲/۵ تا ۹ نانومتر گزارش شده است [۴۳ و ۴۴] و در همه‌ی آن‌ها وقتی که مقدار گاز در سطح الکتروود به حد اشباع برسد، نانو حباب تشکیل می‌شود. اخیراً مطالعات چن^{۲۰} و همکارانش ثابت کرده است که مقدار گاز اشباع شده مورد نیاز برای هسته‌زایی نانو حباب‌ها بر روی سطح الکترودهای طلا، پلاتین و پالادیوم یکسان است [۴۵ و ۴۶]. روش‌های تجربی به طور واضح نتایجی را در مورد چگونگی و محل ایجاد نانوحباب‌ها، شکل و اندازه‌ی آن‌ها در حالت ساکن نشان نمی‌دهند. علیرغم چندین مطالعه‌ی محاسباتی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی روشی ایده‌آل برای حل این مسئله است. یامیلا^{۲۱} و همکارانش با انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی توانستند مراحل ایجاد نانوحباب بر سطح الکتروود را گزارش کنند [۴۷] که در شکل ۴ نشان داده شده است.



شکل ۲. نمایش نانو حباب بخار برای مایع تک جزئی (چپ) و در حضور گاز محلول در مایع (راست) [۳۰]

در شکل ۲ تشکیل نانو حباب بخار اطراف نانوذره جامد گرم شده برای دو حالت نشان داده شده است. تصویر سمت چپ مایع تک جزئی و راست در حضور گاز محلول است. ذرات آبی مایع، سبز گاز، قرمز و قهوه‌ای به ترتیب نانو ذره‌ی مرکزی و دیواره را نشان می‌دهند. افزایش دمای نانو ذره‌ی مرکزی باعث ایجاد نانو حباب بخار در اطراف آن می‌شود. افزودن گاز باعث کاهش دمای مایع اشباع می‌شود در نتیجه هسته‌زایی نانو حباب‌ها در دماهای پایین‌تر نسبت به مایع خالص اتفاق می‌افتد.

شیائوئی^{۱۸} و همکارانش با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نحوه‌ی تشکیل نانوحباب را درون آرگون مایع بر روی سطح پلاتین گزارش کردند [۳۱] که در شکل ۳ نشان داده شده است.



شکل ۳. مراحل تشکیل هسته‌ی نانو حباب و رشد آن [۳۱]

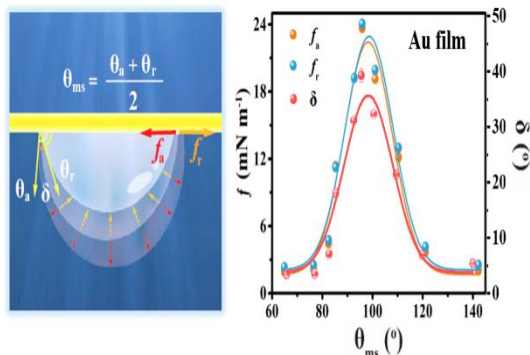
شکل ۳ نشان دهنده‌ی مراحل تشکیل نانو حباب و رشد آن است. همان‌طور که شکل نشان می‌دهد هر دو بستر بالا و پایین از هفت لایه پلاتین با اف سی سی^{۱۹} (۱۱۱) تشکیل شده است که

²⁰ Chen

²¹ Yamila

¹⁸ She

¹⁹ Face centered cubic



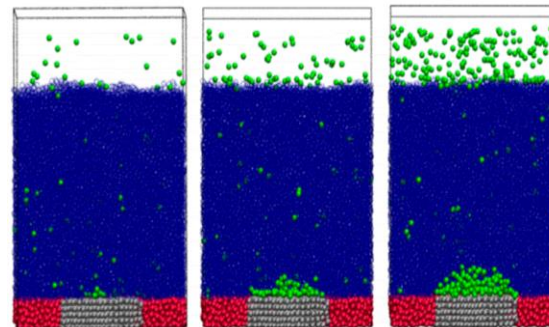
شکل ۵. نمایش انواع زاویه تماس و نیروهای چسبندگی (چپ) و نمودار نیروهای چسبندگی جانبی نانو حباب سطحی بر روی فیلم طلا (راست) [۴۸]

در تصویر سمت چپ شکل ۵، زاویه تماس افزایشی، کاهشی و نیروهای چسبندگی^{۲۸} متناظر با هریک که به ترتیب f_r و f_a است و بر خط تماس سه فاز^{۲۹} وارد می‌شود، نشان داده شده است θ_{ms} ، میانگین زاویه تماس افزایشی و کاهشی تعریف شده است و زاویه تماس هیستریس^{۳۰} (δ)، تفاضل بین آن دو است. در تصویر سمت راست زاویه تماس هیستریس، نیروهای چسبندگی افزایشی و کاهشی نانو حباب به عنوان تابعی از θ_{ms} رسم شده است. طبق نمودار اگر θ_{ms} برابر ۹۰ درجه باشد، نیروهای چسبندگی به حداکثر مقدار خود می‌رسند که در این حالت بستر فوق‌العاده چسبنده است و از حرکت جانبی نانوحباب جلوگیری می‌کند در نتیجه حرکت نانوحباب بسیار کند خواهد بود.

محاسبه زاویه تماس برای بررسی و توصیف رفتار ترشوندگی قطرات نانو بر سطوح متفاوتی مانند ناهمگن شیمیایی [۴۹]، ناهموار [۵۰] و نانویی مانند گرافن [۵۱] در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شده است.

۲-۳- خط تماس سه فاز

به گفته لیو^{۳۱} و همکارانش ناهمگنی سطح می‌تواند منجر به تثبیت خط تماس سه فاز شود که برای پایداری نانو حباب‌های سطحی بسیار مهم است [۵۲]. از این رو جینگ کیان^{۳۲} و همکارانش به طور تجربی نشان دادند که نانو حباب‌ها می‌توانند در شرایط اشباع نشده ساعت‌ها پایدار بمانند [۵۳]. مشابه این پژوهش‌ها شانتانو^{۳۳} و همکارانش توانستند پایداری نانو حباب



شکل ۴. شکل‌گیری نانو حباب سطحی بر روی سطح الکتروود [۴۷]

شکل ۴ نشان دهنده مراحل شکل‌گیری نانو حباب بر روی سطح الکتروود است. که ذرات آبی مایع، سبز گاز، طوسی الکتروود و قرمز بستر است. از سمت چپ به راست سه مرحله (الف) القای، (ب) هسته‌زایی و رشد حباب، (ج) حالت ساکن و پویایی نشان داده شده است که رقابت بین مولکول‌های گاز و آب برای جذب شدن بر روی سطح الکتروود منجر به ایجاد نانو حباب می‌شود.

۳- عوامل موثر بر پایداری نانوحباب‌ها

۳-۱- اثر کشش سطحی بر زاویه تماس

نانو حباب‌های سطحی در آزمایشگاه می‌توانند برای چند روز پایدار بمانند. چنین پایداری طولانی مدتی بحث برانگیز و متناقض با نتایج نظری لیونگرن^{۳۲} و همکارانش است که طول عمری کوتاه بین ۱ تا ۱۰۰ میکروثانیه را برای نانو حباب‌های کوچک منفرد با شعاع بین ۱۰ تا ۱۰۰ نانومتر نشان می‌دهد. جینگشان^{۳۳} و همکارانش رفتار ترشوندگی نانو حباب را بررسی و گزارش کردند [۴۸] که زاویه تماس^{۳۴} نانو حباب معمولاً در محدوده زاویه تماس افزایشی^{۳۵} (θ_a) و کاهشی^{۳۶} (θ_r) نوسان می‌کند و با محاسبه پایداری زاویه تماس^{۳۷} (θ_{ms})، می‌توان رفتار دینامیکی نانو حباب را توصیف کرد که در شکل ۵ نشان داده شده است.

²⁸ Adhesion force

²⁹ Three-phase contact line

³⁰ Contact angle hysteresis

³¹ Liu

³² Jing

³³ Shantanu

²² Ljunggren

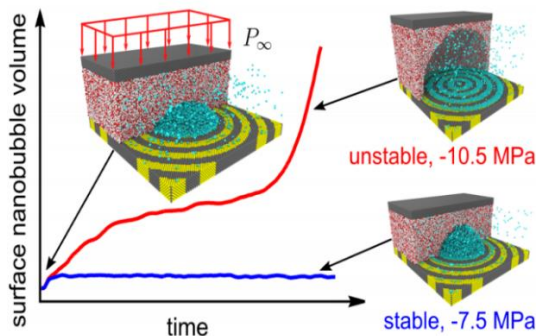
²³ Jingshan

²⁴ Contact angle

²⁵ Advancing contact angle

²⁶ Receding contact angle

²⁷ Most-stable contact angle



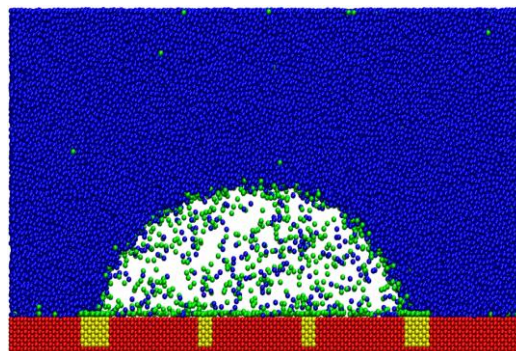
شکل ۷. نمایش آستانه‌ی فشار خارجی بحرانی برای نانو حباب سطحی نیتروژن [۵۶]

شکل ۷ نشان دهنده‌ی آستانه‌ی فشار خارجی برای نانو حباب سطحی نیتروژن است که اتم‌های قرمز اکسیژن، سفید هیدروژن، فیروزه‌ای نیتروژن، خاکستری و زرد به ترتیب بستر آب‌دوست و آب‌گریز هستند. یک محدوده از افت فشار به کار برده شده است که در ۷/۵- مگاپاسکال پایدار و در ۱۰/۵- مگاپاسکال ناپایدار است.

۴-۳- ماهیت بستر

سطح فوق آب‌گریز با زاویه تماس بیشتر از ۱۵۰ درجه مشخص می‌شود و زاویه تماس کمتر از ۱۰ درجه یک سطح فوق آب‌دوست تعریف می‌شود. در سال‌های اخیر، رفتار ترشوندگی منحصر به فرد بسیاری از سطوح مانند دستگاه‌های حمل و نقل، مبدل‌های حرارتی و رگ‌های خونی مورد توجه قرار گرفته است. در واقع نانو حباب‌های هوا، داخل آب باعث انسداد در انتقال مایعات می‌شوند [۵۷-۵۹]. طبق گزارشات نانو حباب‌های هوا اغلب به سطوح فوق آب‌گریز متصل می‌شوند و برای ایجاد سطوح ضد حباب از سطوحی با قابلیت ترشوندگی فوق آب‌دوست استفاده شده است که نانو حباب‌ها مانند قطرات روغن در آب رفتار می‌کنند [۶۰-۶۲]. در همین راستا برای بررسی مکانیسم چسبندگی و جدا شدن نانو حباب از سطح، جینیونگ^{۳۷} و همکارانش موفق به ساخت لوله‌ی پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان فوق آب‌دوست شدند [۶۳] که در شکل ۸ نشان داده شده است. در زمینه پلیمرها به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پژوهش‌هایی انجام شده است که می‌توان به مواردی مانند بررسی رفتار ترشوندگی بسپارها [۶۴]، مقایسه‌ی انواع پلیمر [۶۵] و تقویت استحکام پلیمر [۶۶] اشاره کرد.

سطحی را بر یک سطح ناهمگن شیمیایی به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بازسازی کنند [۵۴] که در شکل ۶ نشان داده شده است.



شکل ۶. نمایش نانو حباب سطحی بر روی یک سطح ناهمگن شیمیایی [۵۴]

شکل ۶ نشان دهنده‌ی نانو حباب سطحی بر روی یک سطح ناهمگن شیمیایی است که ذرات آبی مایع، سبز گاز و قرمز سطح جامد را نشان می‌دهند. قسمت‌های ناهمگن شیمیایی با رنگ زرد به عنوان مکان‌های پین^{۳۴} عمل می‌کنند که منجر به تثبیت خط تماس سه فازی و پایداری نانو حباب سطحی می‌شوند.

۳-۳- فشار خارجی

در محلول‌هایی که از گاز اشباع هستند، پایداری نانو حباب‌های سطحی می‌تواند به تعادل بین فشار لاپلاس و فشار فوق اشباع آن گاز وابسته باشد که منجر به تثبیت نانو حباب در خط تماس سه فازی می‌شود. ویتالی^{۳۵} و همکارانش چگونگی تأثیر فشار بر پایداری نانو حباب‌های سطحی را مورد بررسی قرار دادند [۵۵] و با تحلیل و بررسی نمودارهای انرژی آزاد گیبس توانستند دیگر ویژگی‌های ترمودینامیکی نانو حباب را بدست آورند. از طرفی به طور تجربی نشان داده شده است که نانو حباب‌های سطحی در فشار منفی ۶ مگاپاسکال پایدار و در مقادیر کمتر از آن ناپایدار هستند. در همین راستا دانکن^{۳۶} و همکارانش به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی آستانه‌ی کاویتاسیون تانسور فشار خارجی بحرانی را برای نانو حباب سطحی نیتروژن که در آب غوطه‌ور است، گزارش کردند [۵۶] که در شکل ۷ نشان داده شده است.

³⁴ Pin sites

³⁵ Vitaly

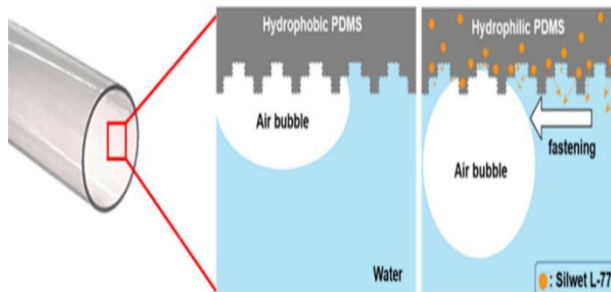
³⁶ Duncan

³⁷ Jinyoung

دلیل محدودیت‌های روش‌های تجربی، درک اساسی برخی جنبه‌ها هنوز ناکافی است. از این رو شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ابزار قدرتمندی برای حل این مسئله است و می‌تواند برای رد یا تایید نتایج تجربی استفاده شود که به مواردی از آن در متن اشاره شد. همچنین، به کمک آن می‌توانیم اطلاعات خوبی در مورد اتفاق-هایی که در سیستم‌های پرکاربرد مانند پزشکی، کشاورزی، تصفیه-ی آب و غیره می‌افتد، داشته باشیم. بنابراین، با توجه به موفقیت شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در بازسازی رفتار نانوحباب‌ها، انتظار می‌رود فناوری نانو حباب‌ها بتواند آینده‌ی درخشانی داشته باشد.

۵. منابع

- [1] J.R. Seddon, D. Lohse, J. Phys. Condens. Matter, 23, 133001-133023, (2011).
- [2] N. Ishida, T. Inoue, M. Miyahara, K. Higashitani, Langmuir, 16, 6377-6380, (2000).
- [3] S.T. Lou, Z.Q. Ouyang, Y. Zhang, X.J. Li, J. Hu, M.Q. Li, F.J. Yang, J. Vac. Sci. Technol. B, 18, 2573-2575, (2000).
- [4] M.A. Hampton, B.C. Donose, A.v. Nguyen, J. Colloid. Interface. Sci, 325, 267-274, (2008).
- [5] S. Peng, T.L. Mega, X. Zhang, Langmuir, 32, 11265-11272, (2016).
- [6] M. Guan, W. Guo, L. Gao, Y. Tang, J. Hu, Y. Dong, Chem Phys Chem, 13, 2115-2118, (2012).
- [7] W. Guo, H. Shan, M. Guan, L. Gao, M. Liu, Y. Dong, Surf. Sci, 606, 1462-1466, (2012).
- [8] X.H. Zhang, W. Ducker, Langmuir, 23, 12478-12480, (2007).
- [9] Z. Lu, S. Peng, X. Zhang, Langmuir, 32, 1700-1706, (2016).
- [10] J.R. Adleman, D.A. Boyd, D.G. Goodwin, D. Psaltis, Nano Lett, 9, 4417-4423, (2009).
- [11] P. Christopher, H. Xin, S. Linic, Nat. Chem, 3, 467-472, (2011).
- [12] O. Neumann, A. Urban, J. Day, S. Lal, P. Nordlander, N.J. Halas, ACS nano, 7, 42-49, (2013).
- [13] A. Polman, ACS Nano, 7, 15-18, (2013).
- [14] A.K. Ahmed, X. Shi, L. Hua, L. Manzueta, W. Qing, T. Marhaba, W. Zhang, J. Agric. Food Chem, 66, 5117-5124, (2018).



شکل ۸. پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان آبدوست (چپ) و آب‌گریز (راست) [۶۳]
شکل ۸ برشی از دیواره‌ی داخلی لوله‌ی پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان را نشان می‌دهد که داخل آن آب جریان دارد. تصویر سمت چپ پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان (طوسی) آب‌گریز است و نانوحباب سفید رنگی به سطح آن چسبیده است که با افزودن سورفکتانت سیلیکونی که با رنگ نارنجی در تصویر سمت راست نشان داده شده است، ماهیت ترشوندگی بستر از آب‌گریزی به آبدوستی تغییر می‌کند و نانوحباب از سطح جدا می‌شود.

۳-۵- لایه‌ی آلودگی

داکر^{۳۸} پیشنهاد کرد که لایه‌ی نازکی از آلودگی در فصل مشترک گاز-مایع تشکیل می‌شود که از خروج گاز درون نانو حباب جلوگیری می‌کند و با کاهش کشش سطحی، زاویه تماس حباب را افزایش می‌دهد در نتیجه شعاع نانو حباب تثبیت می‌شود [۶۷]. از طرفی دس^{۳۹} و همکارانش معتقد بودند که تأثیر آلودگی یونی و غیریونی بر کاهش کشش سطحی می‌تواند زاویه تماس بالا را توجیه کند اما برای توضیح پایداری طولانی مدت نانو حباب‌های سطحی کافی نیست [۶۸]. کمی بعد ژانگ^{۴۰} و همکارانش شواهد تجربی علیه نظریه آلودگی داکر ارائه دادند (۶۹) که نشان می‌دهد پایداری نانوحباب‌ها حتی پس از شستشوی مواد احتمالی جذب شده در فصل مشترک گاز-مایع، باقی می‌ماند. سورفکتانت‌ها از قسمت‌های آبدوست و آب‌گریز تشکیل شده‌اند. همین ویژگی سبب شده است تا بر هم کنش‌های سورفکتانت [۷۰ و ۷۱]، تأثیر دما بر محلول‌های آبی سورفکتانت‌های یونی و غیریونی [۷۲] و در جداسازی آب از روغن [۷۳]، به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار بگیرند.

۴. نتیجه گیری

نانو حباب‌ها با ابعاد و ویژگی‌های خاص در زمینه‌های متفاوتی کاربرد دارند که درک درست و دقیق از مکانیسم‌ها و عواملی که تشکیل، انحلال، پایداری و طول عمر آن‌ها را کنترل می‌کنند در طراحی و پیشرفت فرایندها بسیار حائز اهمیت است. از طرفی به

³⁸ Ducker

³⁹ Das

⁴⁰ Zhang

- [33] L. Zhang, Y. Zhang, X. Zhang, Z. Li, G. Shen, M. Ye, C. Fan, H. Fang, J. Hu, *Langmuir*, 22, 8109–8113, (2006).
- [34] Y. Li, W. Gao, L. Ci, C. Wang, P.M. Ajayan, *Carbon*, 48, 1124–1130, (2010).
- [35] M.A. Rahim, R.A. Hameed, M.W. Khalil, J. *Power Sources*, 134, 160–169, (2004).
- [36] R.K. Karlsson, A. Cornell, *Chem. Rev*, 116, 2982–3028, (2016).
- [37] L. Luo, H.S. White, *Langmuir*, 29, 11169–11175, (2013).
- [38] Q. Chen, L. Luo, H.S. White, *Langmuir*, 31, 4573–4581, (2015).
- [39] S.K. Mazloomi, N. Sulaiman, *Renew. Sustain. Energy Rev*, 16, 4257–4263, (2012).
- [40] S. Mao, Z. Wen, T. Huang, Y. Hou, J. Chen, *Energy Environ Sci*, 7, 609–616, (2014).
- [41] Q. Chen, L. Luo, H. Faraji, S.W. Feldberg, H.S. White, J. *Phys. Chem. Lett*, 5, 3539–3544, (2014).
- [42] Q. Chen, H.S. Wiedenroth, S.R. German, H.S. White, J. *Am. Chem. Soc*, 137, 12064–12069, (2015).
- [43] A.M. Soto, S.R. German, H. Ren, D. van der Meer, D. Lohse, M.A. Edwards, H.S. White, *Langmuir*, 34, 7309–7318, (2018).
- [44] M.A. Edwards, H.S. White, H. Ren, *ACS Nano*, 13, 6330–6340, (2019).
- [45] Q. Chen, L. Luo, *Langmuir*, 34, 4554–4559, (2018).
- [46] Q. Chen, R. Ranaweera, L. Luo, J. *Phys. Chem. C*, 122, 15421–15426, (2018).
- [47] Y.A. Perez Sirkin, E.D. Gadea, D.A. Scherlis, V. Molinero, J. *Am. Chem. Soc*, 141, 10801–10811, (2019).
- [48] L. Luo, H. Xu, X. Sun, J. Qin, D. Zhou, F. Chen, L. Luo, A. Kumar, C. Wang, X. Lin, S. Sheng, W. Xu, Z. Shang, *Langmuir*, 36, 11422–11428, (2020).
- [49] M. Foroutan, S.M. Fatemi, F. Esmacilian, V.F. Naeini, *Langmuir*, 34, 14085–14095, (2018).
- [50] H. Yaghoubi, M. Foroutan, *Phys. Chem. Chem. Phys*, 20, 22308–22319, (2018).
- [51] F. Akbari, M. Foroutan, *Phys. Chem. Chem. Phys*, 20, 4936–4952, (2018).
- [15] S. Liu, S. Oshita, S. Kawabata, Y. Makino, T. Yoshimoto, *Langmuir*, 32, 11295–11302, (2016).
- [16] S. Calgaroto, A. Azevedo, J. Rubio, *Miner. Eng*, 89, 24–29, (2016).
- [17] M. Fan, D. Tao, R. Honaker, Z. Luo, *Min Sci Technol*, 20, 641–671, (2010).
- [18] A. Agarwal, W.J. Ng, Y. Liu, *Chemosphere*, 84, 1175–1180, (2011).
- [19] A.J. Atkinson, O.G. Apul, O. Schneider, S. Garcia-Segura, P. Westerhoff, *Acc. Chem. Res*, 52, 1196–1205, (2019).
- [20] Z.H. Wu, H.B. Chen, Y.M. Dong, H.L. Mao, J.L. Sun, S.F. Chen, J. Hu, J. *Colloid. Interface. Sci*, 328, 10–14, (2008).
- [21] E.Y. Lukianova Hleb, E.Y. Hanna, J.H. Hafner, D.O. Lapotko, *Nanotechnology*, 27, 085102–085112, (2016).
- [22] J. Shao, M. Xuan, L. Dai, T. Si, J. Li, Q. He, *Angew. Chem. Int. Ed*, 54, 12782–12787, (2015).
- [23] Z. Qin, J.C. Bischof, *Chem. Soc. Rev*, 41, 1191–1217, (2012).
- [24] A.O. Govorov, W. Zhang, T. Skeini, H. Richardson, J. Lee, N.A. Kotov, *Nanoscale Res. Lett*, 1, 84–90, (2006).
- [25] G. Baffou, H. Rigneault, *Phys. Rev. B*, 84, 035415–035428, (2011).
- [26] M. Foroutan, M. Darvishi, S.M. Fatemi, *Phys. Rev. E*, 96, 1–10, (2017).
- [27] K. Sasikumar, P. Keblinski, J. *Chem. Phys*, 141, 234508–234515, (2014).
- [28] S. Merabia, P. Keblinski, L. Joly, L.J. Lewis, J.L. Barrat, *Phys. Rev. E*, 79, 2–5, (2009).
- [29] J. Lombard, T. Biben, S. Merabia, *Phys. Rev Lett*, 112, 105701–105706, (2014).
- [30] S. Maheshwari, M. van der Hoef, A. Prosperetti, D. Lohse, J. *Phys. Chem. C*, 122, 20571–20580, (2018).
- [31] X. She, T.A. Shedd, B. Lindeman, Y. Yin, X. Zhang, *Int. J. Heat Mass Transf*, 95, 278–287, (2016).
- [32] D. Voiry, H.S. Shin, K.P. Loh, M. Chhowalla, *Nat. Rev. Chem*, 2, 0105–0122, (2018).

- [66] S.M. Fatemi, M. Foroutan, J. Nanostructure Chem, 6, 29–40, (2016).
- [67] W.A. Ducker, Langmuir, 25, 8907–8910, (2009).
- [68] S. Das, J.H. Snoeijer, D. Lohse, Phys. Rev. E, 82, 1–24, (2010).
- [69] X. Zhang, M.H. Uddin, H. Yang, G. Toikka, W. Ducker, N. Maeda, Langmuir, 28, 10471–10477, (2012).
- [70] S.M. Fatemi, M. Foroutan, Adv. Sci. Eng. Med, 6, 583–590, (2014).
- [71] S.M. Fatemi, M. Foroutan, J. Iran. Chem. Soc, 12, 1905–1913, (2015).
- [72] M. Foroutan, N. Heidari, M. Mohammadlou, A.J. Sojahrood, J. Chem. Thermodyn, 40, 1077–1081, (2008).
- [73] K.H. Babazadeh, M. Foroutan, Appl. Surf. Sci, 495, 143628–143638, (2019).
- [52] Y. Liu, X. Zhang, J. Chem. Phys, 141, 134702–134709, (2014).
- [53] J. Qian, V.S. Craig, M. Jehannin, Langmuir, 35, 718–728, (2019).
- [54] S. Maheshwari, M. van der Hoef, X. Zhang, D. Lohse, Langmuir, 32, 11116–11122, (2016).
- [55] V.B. Svetovoy, I. DeviĆ, J.H. Snoeijer, D. Lohse, Langmuir, 32, 11188–11196, (2016).
- [56] D. Dockar, M.K. Borg, J.M. Reese, Langmuir, 35, 9325–9333, (2018).
- [57] M. DI, Jasma, 20, 252–263, (2003).
- [58] T.V. Quoc, H. Nguyen Dac, T. Pham Quoc, D. Nguyen Dinh, T. Chu Duc, Microsyst. Technol, 21, 911–918, (2015).
- [59] J. Han, J. Zhang, J.W. Carey, Int. J. Greenh. Gas Control, 5, 1680–1683, (2011).
- [60] Z. Liu, W. Ma, M. Zhang, Q. Zhang, R. Xiong, C. Huang, J. Appl. Polym. Sci, 136, 1–8, (2019).
- [61] A.K. Kota, G. Kwon, W. Choi, J.M. Mabry, A. Tuteja, Nat. Commun, 3, 1–8, (2012).
- [62] C. Zhou, J. Cheng, K. Hou, A. Zhao, P. Pi, X. Wen, S. Xu, Chem. Eng. J, 301, 249–256, (2016).
- [63] J. Park, S. Woo, S. Kim, M. Kim, W. Hwang, ACS Omega, 4, 18304–18311, (2019).
- [64] M. Darvishi, M. Foroutan, RSC Adv, 6, 74124–74134, (2016).
- [65] A.T. Nasrabadi, M. Foroutan, J. Phys. Chem. B, 114, 15429–15436, (2010).

A review on nanobubbles: Methods of production, characterizations and computational studies

Nanobubbles are nano-scaled bubbles that can form on solid surfaces or in solution. Therefore, they have important applications in many physical, chemical, and biological processes. Understanding the fundamental properties of nanobubbles like stability, growth, and solubility can provide more applications for them. In recent years, many experimental and theoretical studies have been performed on nanobubbles. In this review article, different methods for producing nanobubbles and also about their applications, stability, lifetime have been presented from experimental and computational approaches, especially from molecular dynamics simulation approach.

Keywords: Nanobubbles, Stability of nanobubbles, Molecular dynamics simulation.