

بررسی رفتار ترشوندگی سطوح با استفاده شبیه سازی دینامیک مولکولی

معصومه فروتن^{۱*}، احمد بوداگی^۲

۱-دانشگاه تهران، دانشیار دانشکده شیمی

۲-دانشگاه تهران، پردیس بین المللی کیش

چکیده

شبیه سازی دینامیک مولکولی یکی از روش های محاسباتی کامپیوتری است که برای بازسازی رفتار سیالات بر سطوح در مقیاس مولکولی می تواند به کار رود. در سال های اخیر، بررسی ترشوندگی نانو ساختارها مانند گرافن، نانوذرات و نیز سطوح فلزی مورد توجه بسیاری از پژوهشگران بوده است زیرا کنترل ترشوندگی بر سطوح، کاربردهای زیادی در علوم متفاوت به ویژه در ساخت سطوح هوشمند دارد. شبیه سازی دینامیک مولکولی می تواند برای تکمیل و یا تایید داده های تجربی مربوط به برهمکنش سیال و سطح بستر مورد استفاده قرار گیرد. در بررسی ترشوندگی با رویکرد شبیه سازی دینامیک مولکولی، به طور معمول کمیت های زاویه تماس، کشش سطحی، پروفایل چگالی سیال بر سطح، تعداد پیوند هیدروژنی، جهت گیری مولکولی، پارامتر نظم، انرژی برهمکنش سیال و سطح و ضریب نفوذ محاسبه می شوند که در کار حاضر شرح داده شده است. از بین کمیت های بالا، دو کمیت زاویه تماس و کشش سطحی از طریق تجربی نیز قابل اندازه گیری هستند و می توانند اطلاعات ارزشمندی راجع به پدیده ترشوندگی ارائه دهند. با توجه به مقدار نیروی پیوستگی بین مولکول های آب و نیروی چسبندگی بین مولکول های آب و سطح، مقدار زاویه تماس و در نتیجه ترشوندگی سطح تحت تاثیر قرار می گیرد. در حالتی که سطح دارای زبری است، دو مدل اصلی ونزل و کسی باکستر برای توضیح رفتار قطره بر سطح آورده شده است. در مدل ونزل مایع فضای بین زبری ها و فرورفتگی های سطح با استفاده سیال پر می شود. از سوی دیگر، رفتار سیال در مجاورت سطح تا حد زیادی تحت تاثیر ماهیت سطح قرار گرفته و تعیین کشش سطحی نقش مهمی در درک رفتار بالا بازی می کند.

واژه های کلیدی: ونزل، وکسی باکستر، چگالی سیال، زاویه تماس، جهت گیری مولکولی، تعداد پیوند هیدروژنی.

ایمیل نویسنده مسئول: foroutan@khayam.ut.ac.ir

۱- مقدمه

شبیه سازی دینامیک مولکولی یک روش محاسباتی رایج است که به درک و شناخت ویژگی مجموعه ای از مولکول ها براساس ساختار و برهمکنش های آنها می انجامد. شبیه سازی دینامیک مولکولی را می توان روشی در نظر گرفت که می تواند یک فرایند شیمیایی مانند ترشوندگی را در مقیاس مولکولی انجام می شود را بازسازی کند. در کار حاضر، به کمیت های اشاره می شود که برای بررسی پدیده ترشوندگی از طریق شبیه سازی دینامیک مولکولی محاسبه می شوند و می توانند اطلاعات ارزشمندی در مورد ساختار و دینامیک یک نانوقطره ای که بر سطحی قرار دهد، ارائه کند.

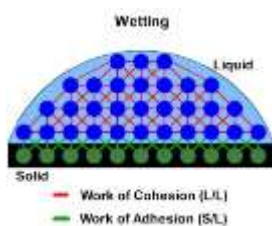
۲- زاویه تماس

زاویه تماس زاویه ای است که خط مماس بر سطح قطره در نقطه مشترک بین سه فاز جامد، مایع و گاز (وقتی قطره بر سطح جامد قرار می گیرد، سه

فاز جامد (سطح بستر)، فاز مایع (قطره) و فاز گاز (بخار) با سطح بستر می سازد. وقتی مایع و جامد باهم برهمکنش می دهد، زاویه تماس، مقدار ترشوندگی یک مایع را بر سطح جامد نشان می دهد. زاویه تماس کوچک بیشتر از ۹۰ درجه منجر به ترشوندگی بالا می شود، درحالی که زاویه تماس بزرگ کمتر از ۹۰ درجه منجر به ترشوندگی کم می شود؛ مثلاً ترشوندگی کامل وقتی رخ می دهد که زاویه تماس صفر شود. در این حالت، قطره مثل یک فیلم نازک بر سطح پخش می شود و برای سطوح فوق آبگریز زاویه تماس بزرگتر از ۱۵۰ درجه است. در این حالت به تقریب هیچ تماسی بین قطره و سطح وجود ندارد [۱]. زاویه تماس تعادلی (زاویه تماس مربوط به زمانی که قطره، به حالت پایداری پس از اینکه قطره بر سطح قرار می گیرد، برسد) را می توان به طور مستقیم از منحنی چگالی ذرات به دست آمده از شبیه سازی، پس از اینکه سیستم به

سطح آبگریز را به يك سطح فوق آبگریز تبدیل کرد. در بسیاری از کاربردها و در جایی که قطرات مایع بر سطح پخش می‌شوند، دانستن این که قطرات چگونه بر سطح پخش می‌شوند، بسیار مهم است.

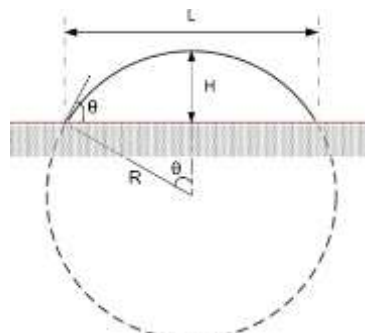
اندازه قطرات آب از طریق اندازه‌گیری زاویه‌ی تماس با خاصیت آبگریزی ارتباط مستقیم دارد. برای سطوح آبگریز با زاویه‌ی تماس بالا قطرات آب با اندازه کوچک تشکیل می‌شوند، ولی با پیوند ضعیفی بر سطح باقی می‌مانند، ولی سطوح آبدوست با زاویه تماس پایین قطرات بزرگتری را بر سطح ایجاد می‌کنند که با قدرت چسبندگی بالاتری بر سطح پخش می‌شوند. بین مولکول‌های آب نزدیک فصل مشترک سه فاز، دو نوع نیرو وجود دارد که اولی از طرف دیگر مولکول‌های آب و به سمت داخل است و منجر به جمع شدن قطره و کروی شدن آن می‌شود و دیگری، نیرو بین مولکول‌های آب و سطح است که تمایل دارد قطره را بر سطح پخش کند. بنابراین، تقابل بین این دو نیرو وجود دارد، با کاهش دادن این نیرو با استفاده از سازوکارهای متفاوت می‌توان نیروی بین مولکول‌های آب و سطح را کاهش داد که این عمل منجر به افزایش زاویه تماس می‌شود، این دو نیرو در شکل ۳ مشخص شده‌اند [۴].



شکل ۳. نیروهای موجود بین مولکول‌های مایع-مایع و جامد-مایع [۴]

در جدول ۱ مشخص شده است که این دو نیرو چگونه بر زاویه تماس تأثیر دارند. هر چه نسبت بین نیروی مایع با مایع نسبت به مایع و بستر جامد بیشتر باشد، زاویه تماس بیشتر خواهد بود و هرچه نیروی بین مایع و سطح جامد نسبت به نیروی مایع و مایع بیشتر باشد، زاویه تماس کمتر خواهد بود.

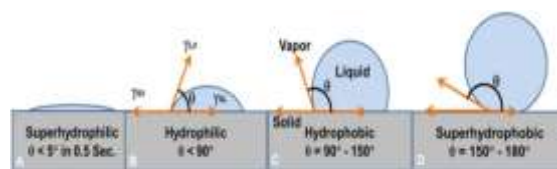
تعادل می‌رسد، تعیین کرد. یکی دیگر از مهمترین پارامترهای بررسی سطح و قطره به‌دست آوردن زاویه تماس بین قطره و سطح است، با استفاده از این پارامتر مقدار آبدوست و آبگریز بودن سطح مشخص می‌شود. به کمک رابطه زیر می‌توان زاویه تماس سطح و قطره را به‌دست آورد.



شکل ۱. مدل سازی قطره آب به صورت یک سطح کروی [۱]

$$\theta = \text{Arc tan} \left(\frac{4HL}{L^2 - 4H^2} \right) \quad (۱)$$

در فرمول (۱) ارتفاع قطره از سطح، L طول قطره بر سطح و R شعاع قطره کروی است. اگر زاویه تماس بین قطره و سطح کمتر از ۳۰ درجه باشد، سطح فوق آبدوست است. اگر زاویه تماس بین ۳۰ تا ۹۰ درجه باشد سطح آبدوست است، بین ۹۰ تا ۱۵۰ درجه آبگریز و اگر زاویه بین ۱۵۰ تا ۱۸۰ درجه باشد، سطح فوق آبگریز نامیده می‌شود [۲]. در شکل ۲، سطح آبدوست و سطح آبگریز به طور مقایسه‌ای آورده شده است.



شکل ۲. قطره آب بر سطح (A) سطح فوق آبدوست (B) سطح آبدوست (C) سطح فوق آبگریز (D) سطح فوق آبگریز [۳]

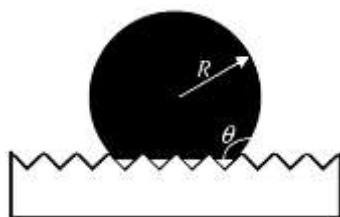
وقتی يك قطره آب بر يك سطح فوق آبگریز قرار داده می‌شود، تمایل دارد که به همان صورت بایستد و پخش نشود. از طرف دیگر، باید به این نکته توجه داشت که زبر کردن سطح می‌تواند باعث افزایش زاویه تماس شود. بنابراین، از این مطلب نتیجه می‌شود که به وسیله زبر کردن می‌توان يك

در این مدل فرض می‌شود که قطره آب به طور کامل درون ناهمواری‌ها فرو نرود به‌گونه‌ای که مقداری هوا بین قطره و سطح محبوس شود. در این مدل رابطه بین زاویه تماس سطح ناصاف و زاویه تماس سطح صاف به صورت زیر توصیف می‌شود:

$$\cos(\theta_{rough}) = \phi_s \cos(\theta_{flat}) + \phi_v \cos(\theta_{lv}) \quad (3)$$

در رابطه بالا ϕ_s نسبت سطح در تماس بین جامد و مایع به سطح صاف و ϕ_v نسبت سطح در تماس بین هوا و مایع به سطح صاف است. بنابراین، $\phi_v + \phi_s = 1$ ، چون زاویه تماس بخار (هوا) با آب 180° درجه است. پس، می‌توان نوشت:

$$\cos(\theta_{rough}) = \phi_s \cos(\theta_{flat}) - (1 - \phi_s) \quad (4)$$



شکل ۵. مدل کسی باکستر [۵]

در مورد مدل کسی باکستر می‌توان گفت که با کاهش ϕ_s ، سطح تماس بین قطره آب و سطح جامد کم می‌شود. بنابراین، زاویه تماس افزایش می‌یابد.

۲-۳- کشش سطحی

رفتار مایع در مجاورت سطح تا حد زیادی تحت تأثیر ماهیت سطح قرار می‌گیرد و کشش سطحی نقش مهمی در ساختار دینامیک سیال بازی می‌کند. در نظر گرفتن اثرات سطح و تنش سطحی و تنش خطی برای بررسی ویژگی ترشوندگی شبیه‌سازی مولکولی می‌تواند به درک اساسی از سازوکارها از نظر مولکولی منجر شود و می‌تواند برای کشف ویژگی سطحی برای مقاصد عملی مورد استفاده قرار گیرد. پس از محاسبه پارامتر زاویه تماس می‌توان مقدار کشش سطحی را براساس فرمول ۵ بدست آورد [۶]. کشش سطحی نیز کمک می‌کند تا بتوان مقدار برهم‌کنش بین دو سطح از فازهای متفاوت مواد یعنی بستر و قطره آب بدست بیاید.

$$\gamma_{sv} - \gamma_{sl} = \gamma_{lv} \cos \theta \quad (5)$$

البته از مولفه‌های فشار در راستای متفاوت نیز به کمک فرمول زیر می‌توان به این امر دست

جدول ۱ نحوه تأثیر نیروهای مایع و جامد بر زاویه

تماس [۴]

Wettability

Contact Angle	Wetting	S/L	L/L
0°	Complete	Strong	Weak
60°	High	Strong	Weak
90°	Moderate	Weak	Weak
120°	Low	Weak	Strong
180°	None	Weak	Strong

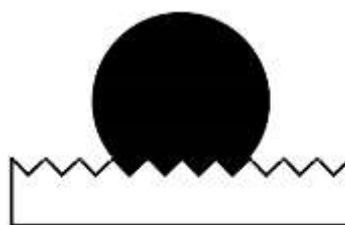
۲-۲- بررسی حالت‌های ونزل^۱ و کسی باکستر^۲

۲-۲-۱- مدل ونزل

زبری و ناهمواری‌های سطح می‌تواند بر زاویه تماس تأثیر بگذارد. ونزل در سال ۱۹۳۶ مدل خود را براساس ناهمواری‌های سطح مطرح کرد. در این مدل، فرض می‌شود که قطره آب به طور کامل درون ناهمواری‌ها فرو رود، به‌طوری که هیچ هوایی بین قطره آب و ناهمواری‌ها محبوس نشود. رابطه بین زاویه تماس سطح ناصاف و زاویه تماس سطح صاف توسط ونزل به صورت زیر ارائه شد.

$$\cos(\theta_{rough}) = r \cos(\theta) \quad (2)$$

که در آن r و θ به ترتیب فاکتور ناهمواری سطح (نسبت سطح واقعی تماس به سطح صاف) و زاویه تماس در مدل یانگ است. باتوجه به تعریف فاکتور ناهمواری‌های سطح و طبق مدل ونزل، r همواره از یک بزرگتر است. در نتیجه، اگر سطح آبدوست باشد با افزایش r سطح آب دوست‌تر می‌شود و اگر سطح آب‌گریز باشد، با افزایش r سطح آب‌گریزتر می‌شود.



شکل ۵: مدل ونزل [۵]

۲-۲-۲- مدل کسی باکستر

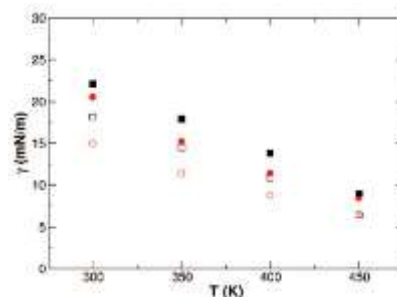
¹ Wenzel

² Cassie-Baxter

یافت [۷]. که LZ طول جعبه شبیه سازی در راستای z است.

$$\gamma = \frac{1}{2}(P_{zz} - \frac{1}{2}(P_{xx} + P_{yy})) \quad (6)$$

در شکل ۷، مقدار کشش سطحی در حضور دماهای متفاوت بر سطح PDMS و نانوقطره آب نمایش داده شده است.

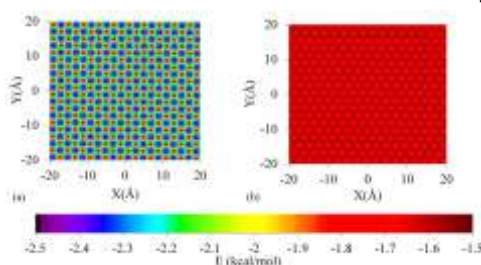


شکل ۶. کشش سطحی سطح مشترک آب و PDMS در حضور دماهای متفاوت [۸].

همانطور که مشاهده می‌شود، با افزایش دما کشش سطحی کمتر شده است که این کم شدن کشش سطحی در زنجیره‌های متفاوت از بسیار PDMS یکسان است. برای مثال، اشکال توپر کشش سطحی کل سیستم و اشکال توخالی کشش سطحی PDMS و بخار آن است و دایره مربوط به زنجیره‌های ۲۰ تکپار و مربع برای زنجیره‌های ۱۰۰ تکپار است.

۲-۴. انرژی جذب یا برهمکنش بر بستر

پارامتر بعدی که مورد بررسی قرار می‌گیرد، مقدار انرژی نانو قطره بر سطح بستر است هر چه این میزان انرژی کمتر باشد. برای مثال، هر چه این انرژی برهمکنش سطح و قطره کمتر باشد، مقدار نیروی کمتری نیاز است تا بر موانع انرژی غلبه شود و قطره راحت‌تر بر سطح لغزش کند [۹].



شکل ۷. تصویر کانتور مپ^۳ انرژی برهمکنش قطره آب بر (a) طلا و (b) گرافن [۹]

قسمت a مربوط به کانتور مپ انرژی قطره آب بر بستری از طلا است و قسمت b همانند نمودار بر بستری از جنس گرافن. برای گرفتن این نقشه در راستای x و y و در ارتفاعی از راستای z که لایه اول قطره آب را از نمودار چگالی به‌دست آورده بودیم، شروع به اسکن کرده و انرژی برهمکنش را با فرمول زیر محاسبه می‌کنیم [۹].

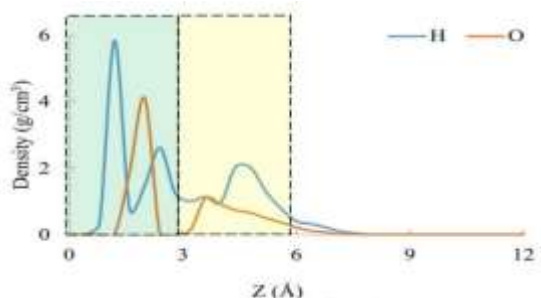
در اینجا $E[m/M]$ انرژی کل سیستم جذب و n تعداد مولکولهای قطره آب، $E[M]$ و $E[m]$ به ترتیب انرژی بستر به صورت منفرد و انرژی یک مولکول آب است.

۲-۵. نمودار چگالی

پنجمین موردی که مورد بررسی قرار خواهد در رفتار ترشوندگی پروفایل چگالی^۴ است. چگالی آب در اطراف سطح که به‌طور معمول به نواحی متفاوتی در راستای محور عمود بر سطح است می‌تواند به ما در مورد نحوه وجود مولکول‌های آب در قسمت‌های متفاوت بالای سطح اطلاعات خوبی دهد. برای مثال، در مقاله درویشی و همکارانش

$$E_{ads} = (E_{[m/M]} - E_{[M]} - nE_{[m]})/n \quad (7)$$

[۱۰] در مورد بستری از نوع TiO_2 و قرارگیری تعدادی مولکول آب بر این بستر بحث شده بود که نخستین قسمتی که مورد بررسی قرار گفت، همین نمودار چگالی مولکول‌های آب بر بستر بوده است که در شکل ۹ مشاهده می‌کنید.

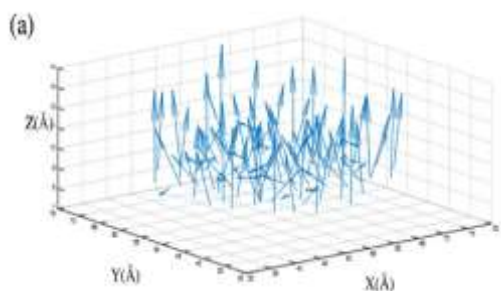


شکل ۸. نمودار چگالی از مولکول آب در راستای z و بر سطح TiO_2 [۱۰].

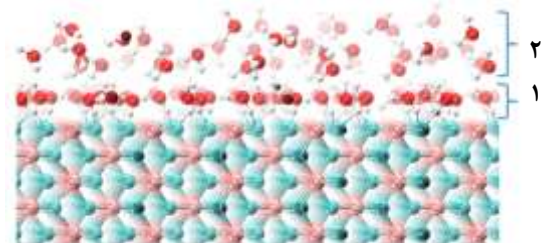
در این شکل مشاهده شد که در بالای سطح بستر بیشترین چگالی تجمع مولکول‌های آب به‌صورت لایه به لایه است. همانطور که در شکل ۹ مشخص شده است، مولکول‌های آب در دو لایه اول و دوم

^۴ Density profile

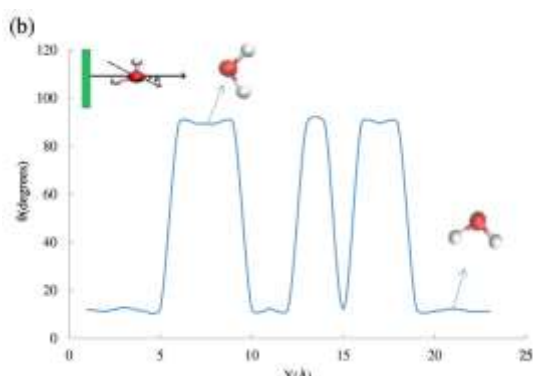
^۳ Contour map



مشاهده شده‌اند که لایه اول دای چگالی بیشتر و لایه دوم چگالی کمتری دارد.



شکل ۹. مشاهده ویژوال دو لایه‌ای بودن مولکول‌های آب و تایید نمودار شکل ۹ [۱۰]



شکل ۱۰. در مورد نحوه قرارگیری مولکول‌های آب بر سطح TiO_2 (a) نحوه چرخش 100° مولکول آب در یک نمودار ۳ بعدی (b) زاویه بین خطی که در راستای محور x کشیده شده و ممان دو قطبی مولکول آب [۱۱]

برای محاسبه زاویه این مولکولها ابتدا باید فاصله r بین دو اتم هیدروژن آب به دست آید و میانگیری شود. سپس، مختصات Z اتم اکسیژن از میانگین Z دو اتم هیدروژن آن کسر شود و تقسیم بر فاصله بین دو اتم هیدروژن شود و در نهایت از رابطه ۱۲ قسمت دوم زاویه بدست آید.

$$t = [((oz - ((h1z + h2z) / 2)) / r)]$$

$$\theta = (\cos(t)) \quad (12)$$

۷-۲- محاسبه پارامتر نظم

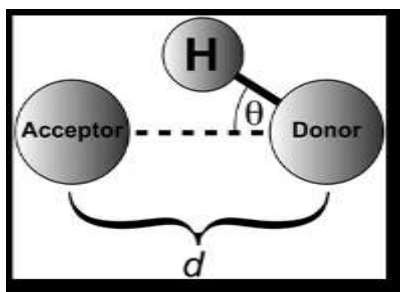
این مورد نیز یکی دیگر از پارامترهایی است که مورد بررسی قرار می‌گیرد. زمانی که موضوع پژوهش در مورد سطح و قطره باشد به این معنی که می‌توانیم به کمک این گزینه مقدار منظم بودن را نیز افزون بر جهت‌گیری مولکولها در بسترها مورد بررسی قرار دهیم بابازاده و همکارانش [۱۱] با

۲-۶- جهت‌گیری مولکول‌های آب بر سطح یکی دیگر از مواردی که میتوان در ترشوندگی بسپارها مورد بررسی قرار داد، جهت‌گیری مولکول‌های آب در سطح و در لایه‌های متفاوت وجود آب است. اهمیت این موضوع بدان جهت است که نوع جهت‌گیری‌ها باعث ایجاد رفتارهای متفاوت مولکول‌های آب بر بستر شود. برای مثال، در مقاله بابازاده و همکارانش، جهت‌گیری‌های مولکول‌های آب در لایه اول بر سطح گرافن باعث می‌شود در این لایه مولکول‌های قطره آب بیشتر با مولکول‌های همین لایه برهم‌کنش داشته باشند تا مولکول‌های لایه‌های بالاتر که این موضوع باعث می‌شود، چگالی بالاتری نسبت به سایر قسمت‌های قطره داشته باشند و یا اینکه می‌توانیم از نظر مقدار اصطحاک این لایه و لایه‌های بالاتر نیز براساس همین موضوع جهت‌گیری مولکولها بحث کرد [۱۱].

۰/۵- و یا مقدار ۱ دور است و به صورت نامنظم قرار گرفته‌اند.

۲-۸. شمارش تعداد پیوند هیدروژنی

یکی دیگر از پارامترهای بررسی ترشوندگی شمارش پیوند هیدروژنی است. تعداد این پیوندها سبب فهمیدن مقدار برهم‌کنش مولکولهای آب با سطح می‌شود. برای مثال، اگر مولکولهای آب با اتمهای بر سطح پیوند هیدروژنی برقرار کنند به جای اینکه با اتمهای خود مولکول آب پیوند برقرار کنند، متوجه این موضوع می‌شویم که برهم‌کنش‌های بین مولکول آب و آب کمتر از آب و سطح است. بابازاده و همکارانش [۱۱] با بررسی پیوند هیدروژنی به این نتیجه رسیدند که تمایل تشکیل پیوند هیدروژنی مولکولهای آب در سطح TiO_2 بیشتر از تمایل برقراری پیوند هیدروژنی با مولکولهای آب خود قطره است. فاصله بین گیرنده و دهنده $3/2$ آنگستروم و فاصله بین هیدروژن و اکسیژن برقرار کننده پیوند $22,5/5$ آنگستروم و در نهایت، اگر زاویه مورد نظر کمتر از 30 درجه باشد، پیوند هیدروژنی محسوب می‌شود.

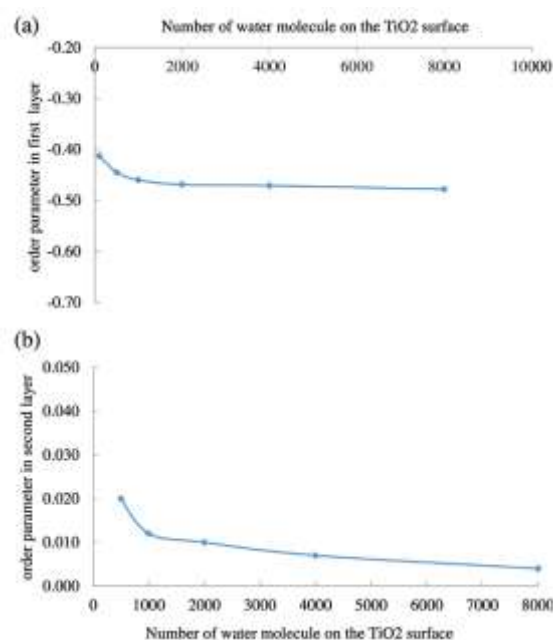


شکل ۱۲. تصویر نحوه محاسبه پیوند هیدروژنی.

بررسی پارامتر نظم^۵ مولکولهای آب بر سطح TiO_2 به این نتیجه رسیدند که مولکولهای قطره به دو گروه تقسیم می‌شوند. گروه اول با پارامتر نظم بین ۰/۵- و ۱ که به صورت نامنظم و تصادفی قرار گرفتند و گروه دوم که ویژگی مانند ویژگی یک نانوقطره را داشتند و نتیجه بعدی که گرفته شد این بود که فقط مولکولهایی که تا ۷ آنگسترومی سطح بودند تحت تاثیر سطح قرار گرفتند و سایر مولکولها تاثیری از سطح نداشتند و به‌عنوان یک قطره بالک و ویژگی یک قطره بالک را داشتند. مقدار این پارامتر با کمک فرمول زیر محاسبه شد.

$$S_0 = \frac{1}{2} 3 \cos^2 \theta - 1 \quad (13)$$

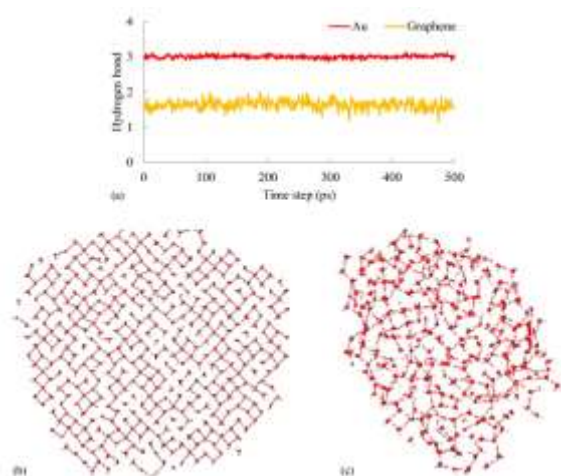
در این فرمول، زاویه θ زاویه‌ای است که در جهت‌گیری مولکولهای آب در بخش ۲-۶ بدست آمده بود.



شکل ۱۱. در مورد پارامتر نظم لایه‌های یک و لایه دوم در نانوقطره

قسمت a مربوط به لایه اول و نزدیک به سطح و قسمت b مربوط به لایه دوم است. همانطور که مشاهده می‌شود، در لایه اول مولکولها به صورت منظمی قرار گرفته‌اند، نسبت به سطح چون به مقدار ۰/۵- نزدیک است ولی در لایه دوم از مقدار

⁵ Order Parameter



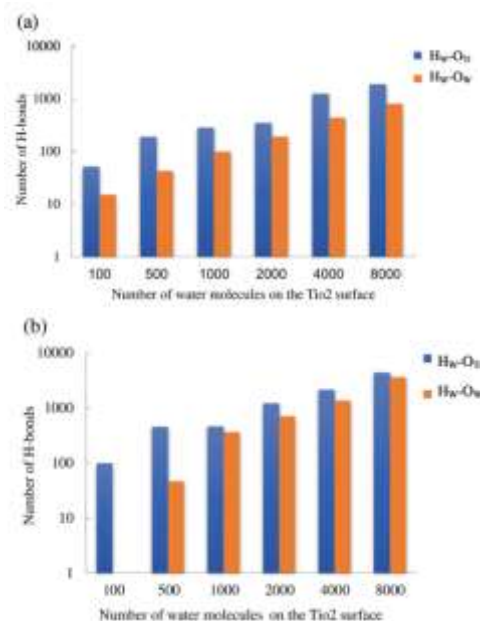
شکل ۱۵. تعداد پیوندهای هیدروژنی بین مولکولهای آب (a) و سطح طلا (b) و گرافن (c)

تعداد بیشتری از پیوندهای هیدروژنی در ناحیه اینترفیس^۶ آب و طلا نسبت به آب و گرافن نشان می‌دهد که تمایل بالاتری برای مولکولهای آب ساکن در منطقه اینترفیس گرافن و آب برای ایجاد پیوند هیدروژنی با لایه‌های بالایی وجود دارد. قسمت a مربوط به تعداد پیوندهای هیدروژنی بر سطح طلا و گرافن در طول زمان و قسمت b مربوط به مولکولهای آب روی سطح طلا و قسمت c مربوط به مولکولهای آب بر سطح گرافن است.

۹-۲- زمان طول عمر پیوند هیدروژنی

پارامتر بعدی که محاسبه آن در بررسی سطح و نانوقطره مهم است (HBACF)^۷ است که مدت زمان ماندگاری این پیوندهای هیدروژنی با همان اتم‌های تشکیل شده را در طول زمان مشخص می‌کند. لوزار^۸ و همکارانش [۱۲] از فرمول زیر برای بدست آوردن زمان ماند استفاده کردند. تعداد پیوندهای هیدروژنی در هر گام زمانی شمرده می‌شود و با تعداد پیوند هیدروژنی گام قبلی ضرب و در نهایت با تقسیم بر توان دو تعداد پیوند هیدروژنی در گام پیشین مقدار زمان ماند پیوند به-دست می‌آید.

$$(14)$$



شکل ۱۴. تعداد پیوندهای هیدروژنی بین مولکولهای آب و سطح TiO_2 (a) تعداد پیوندهای هیدروژنی در لایه اول (b) تعداد پیوندهای هیدروژنی در لایه اول و دوم [۱۱]

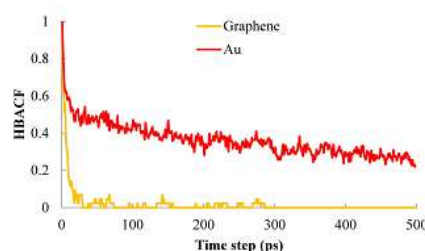
قسمت a تعداد پیوندهای هیدروژنی بین مولکولهای آب و سطح و مولکولهای آب و آب را نشان می‌دهد. در قسمت b تعداد پیوندهای هیدروژنی مولکولهای آب و آب در لایه ۱ و ۲ را نشان می‌دهد. در مقاله درویشی و همکارانش [۹] نیز به این نتیجه رسیدند که تمایل برقراری پیوند هیدروژنی مولکولهای آب بر سطح طلا نسبت به گرافن بیشتر است و این یعنی در سطح گرافن پیوندهای هیدروژنی بین مولکولهای خود آب بیشتر از پیوندهای هیدروژنی آب با هیدروژنهای سطح گرافن است و همین موضوع باعث کاهش زوایه تماس قطره آب بر سطح طلا می‌شود.

⁶ Interface

⁷ Hydrogen bonding autocorrelation function

⁸ luzar

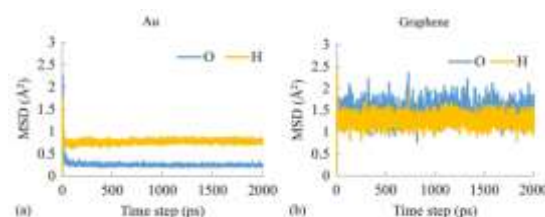
در مقاله درویشی و همکارانش [۹] عنوان شده که پیوندهای هیدروژنی بین مولکولهای آب در سطح طلا تمایل بیشتری دارند که پیوندشان را در طول مدت شبیه‌سازی حفظ کنند ولی بر سطح گرافن این تمایل کمتر است و پیوندها سریعتر شکسته می‌شوند. در هر صورت تعداد پیوندهای هیدروژنی در میان مولکولهای آب و ثبات آنها می‌تواند برای مشخص کردن مقاومت متقابل آنها با بستر استفاده شود.



شکل ۱۴. زمان ماند پیوندهای هیدروژنی بین مولکولهای آب و سطح گرافن و طلا در طول زمان [۹]

۲-۱۰. ضریب نفوذ قطره و بستر

پارامتر بعدی که می‌توان در این مورد بررسی کرد مقدار ضریب نفوذ قطره در بستر است که این مورد برای زمان‌هایی که سطح ما دارای حفراتی باشد و یا به صورت مذاب وجود داشته باشد، مورد بررسی قرار می‌گیرد. به کمک تابع MSD^۹ اندازه‌گیری می‌شود که حرکت مولکولهای آب را بر بستر نشان می‌دهد. به کمک این حرکت می‌توان ضریب نفوذ را در داخل بستر نمایش داد و یا حتی حرکت مولکولها و لغزش آنها بر سطح بستر صلب را بدون نیاز به بررسی ضریب بررسی کرد.



شکل ۱۵. ضریب نفوذ قطره و بستر (a) سطح طلا و (b) سطح گرافن [۹]

۳- نتیجه‌گیری

از آنجایی که شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌تواند برای تکمیل و یا تایید داده‌های تجربی مربوط به برهم‌کنش سیال و سطح بستر مورد استفاده قرار گیرد پس از شبیه‌سازی باید مواردی مورد بررسی قرار گیرند تا ما را در رد و یا تایید نتایج تجربی راهنمون کنند. مهمترین مواردی که می‌توانند به ما در این مورد کمک کنند در ده بخش آورده شد. از میان آنها زاویه تماس یکی از مهمترین کمیت‌هایی است که می‌توان از آن در بررسی سطح و قطره مورد بررسی قرار گیرد که این بخش در دو قسمت سطوح صاف و برجسته بحث شد.

منابع

- [1] J. Lü, Applied Surface Science, 256(14), 4720-4723, (2010).
- [2] K.Y., Law, J. Phys. Chem. Lett., 5, 4, 686-688, (2014).
- [3] R. Asmatulu, Polymer Composites, 36(9), 1565-1573, (2015).
- [4] G.M. Ralph Nussbaum, J. Hertz, Angew. Chem, Int, Ed, 55, 408-412, (2016).
- [5] A. Marmur, Langmuir, 19(20), 8343-8348, (2003).
- [6] S.W. Hung, The Journal of Physical Chemistry C, 119(15), 8103-8111, (2015).
- [7] B. Shi, Chem. Lett. 33, 1072-1077, (2006).
- [8] A.E. Ismail, Macromolecules, 42(8), 3186-3194, (2009).
- [9] M. Foroutan, M. Darvishi, S.M. Fatemi, Physical Review E, 2017. 96(3): p. 033312.
- [10] M. Foroutan, Journal of Molecular Liquids, 250, 344-352, (2018).
- [11] K.H. Babazadeh, M. Foroutan, Journal of Molecular Liquids, 244, 291-300, (2017).
- [12] A. Luzar, The Journal of Chemical Physics, 113(23), 10663-10675, (2000).

^۹ Mean squared displacement