

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

دانشگاه بیرجند
دانشکده علوم
گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک حالت جامد

عنوان:

ارائه مدلی سینماتیکی برای پیش روی ناشی از اثر موینگی در نانولوله‌ها

استاد راهنما:

دکتر فاطمه ابراهیمی

نگارش:

حمیده ابطحی نیا

تابستان ۸۸

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

شماره ۱۰

با تاییدات خداوند متعال جلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی کارشناسی ارشد خانم حمیده ابطحی نیا به شماره دانشجویی: ۸۵۱۳۱۰۴۰۴۸ رشته: فیزیک گرایش: دانشکده: علوم

تحت عنوان: ارائه مدلی سینماتیکی برای پیش روی ناشی از اثر مویببگی در نانولوله ها

به ارزش: ۶ واحد در ساعت: ۱۰ صبح روز: شنبه مورخ: ۸۸/۶/۲۱

با حضور اعضای محترم جلسه دفاع و نماینده تحصیلات تکمیلی به شرح ذیل تشکیل گردید:

| سمت | نام و نام خانوادگی | رتبه علمی | امضاء |
|------------------------|-------------------------------|-----------|---|
| استاد راهنمای اول | خانم دکتر فاطمه ابراهیمی | استادیار |  |
| استاد راهنمای دوم | — | — | — |
| استاد مشاور اول | — | — | — |
| استاد مشاور دوم | — | — | — |
| داور اول | آقای دکتر احمد امیرآبادی زاده | استادیار |  |
| داور دوم | آقای دکتر بهزاد حقیقی | دانشیار |  |
| نماینده تحصیلات تکمیلی | دکتر رضا پژوهش | استادیار | — |

نتیجه ارزیابی دفاع که منوط به ارائه اصلاحات پیشنهادی توسط هیئت داوران حداکثر ظرف مدت یکماه پس از تاریخ دفاع می باشد، به شرح زیر مورد تایید قرار گرفت:

قبول (با درجه: عالی و امتیاز: ۱۹/۵) دفاع مجدد غیرقابل قبول

۱- عالی (۱۹-۲۰) ۲- بسیار خوب (۱۸/۹۹ - ۱۸) ۳- خوب (۱۷/۹۹ - ۱۶) ۴- قابل قبول (۱۵/۹۹ - ۱۴)

(بدیهی است عواقب آموزشی ناشی از عدم ارائه به موقع اصلاحات مزبور به عهده دانشجو می باشد)

کلیه مزایا اعم از چاپ، تکثیر، نسخه برداری، ترجمه، اقتباس و ...
از پایان نامه کارشناسی ارشد، برای دانشگاه بیرجند محفوظ می-
باشد.

نقل مطالب با ذکر منبع بلامانع است.

تقدیم به

کرامت دستان پدرم

قلب رتوف مادرم

احساس پاک خواهرانم

محبت واقعی دوستانم

و

لطافت حضور سارای عزیزم

سپاسگذاری

یزدان بلندمرتبه را به جهت یاری‌دادن و همراهی در مراحل تحصیل، سپاس می‌گوییم، که همانا رمز موفقیت‌هایم تکیه بر الطاف همیشه همراه اوست.

پس از حمد و سپاس خداوند متعال، بر خود لازم می‌دانم از تمامی عزیزانی که به نحوی در به ثمر رسیدن این کار تحقیقی مرا مرهون مساعدت و همکاری خود نمودند، صمیمانه تشکر و قدردانی نمایم. هرچند ذکر نام همه این عزیزان در این مقام میسر نیست اما نام‌بردن از بزرگوارانی که سهم بیشتری در انجام پژوهش داشتند و به‌طور مستقیم از راهنمایی و مساعدت آن‌ها بهره‌جسته‌ام، کم‌ترین ادای دینی است که می‌توانم به آن‌ها داشته‌باشم. سراسر وجود اگر به تقدیر از مهربان پدر و نازنین مادر و مهربان خواهرانم، واژه تشکر شوند، تنها برگ سبزی خواهندبود، به تلافی هزاران دشت سبزی و صفا.

تقدیر و تشکر از استاد فرزانه، سرکار خانم دکتر فاطمه ابراهیمی که راهنمایی این تحقیق را برعهده داشتند و از محضر ایشان علاوه بر اندوختن توشه علمی، درس انسانیت آموختم.

تقدیر و تشکر از اساتید گرامی جناب آقای دکتر احمد امیرآبادی‌زاده و جناب آقای دکتر بهزاد حقیقی که با حسن‌نیت و داوری مناسب نقاط ضعف و قوت این تحقیق را با نکته‌سنجی‌های ظریف و دقیق ارائه نمودند تا تحقیق مطلوب‌تری ارائه گردد.

تقدیر و تشکر از جناب آقای دکتر رضا پژوهش که به‌عنوان نماینده تحصیلات تکمیلی قبول زحمت فرمودند. تقدیر و تشکر از زحمات مدیریت محترم گروه فیزیک جناب آقای دکتر نفیسی و تمامی اساتید خود در گروه فیزیک دانشگاه بیرجند که به مدت هفت سال در حضورشان طلب علم نموده‌ام و هم‌چنین خانم نخی منشی گروه فیزیک.

تقدیر و تشکر از جناب آقای دکتر میری و دانشجویان تحصیلات تکمیلی گروه فیزیک و گروه آمار به‌ویژه خانم‌ها زهره احمدی، مریم السادات جعفریان و فاطمه ثقفی بابت مباحثات علمی خوبی که با من داشته و مرا در تکمیل پروژه یاری نمودند.

در پایان از کلیه دوستان عزیزی که توانستم ذره‌ای از دریای علم و معرفت آن‌ها استفاده‌کنم، تشکر و قدردانی نموده و سلامتی، موفقیت، پیروزی و کامیابی همه آن‌ها را از درگاه خداوند متعال خواستار هستم.

حمیده ابطحی‌نیا

تابستان ۱۳۸۸

چکیده

هنگامی که یک لوله موئین در داخل ظرف مایع فرومی‌رود، مایع به‌سرعت به درون آن جریان می‌یابد. این پدیده در مقیاس ماکروسکوپیکی به‌خوبی شناخته شده است، اما جزییات بالارفتن ناشی از موئینگی در مقیاس نانو هنوز به درستی مشخص نیست. یکی از نتایج جالب شبیه‌سازی‌های دقیق کامپیوتری که تا کنون انجام شده، کندشدن فرایند آبگیری در نانوحفره‌های بسیار باریک است. علی‌رغم این‌که فرایند آبگیری یک فرایند تراپردی و غیرتعادلی است، اما شواهد تجربی برخی از شبیه‌سازی‌ها حاکی از آن است که این ویژگی غیرمعمول شارش در نانوحفره‌ها را می‌توان به رفتار شاره در حالت تعادل مربوط کرد و کندشدن فرایند آبگیری را با استفاده از منظم شدن و ساختار یافته شدن شاره محدود شده و با در-نظرگرفتن اثر پتانسیل دیواره‌ها در حالت تعادلی و برای یک شاره ساکن و فاقد حرکت انتقالی رو به جلو بررسی نمود.

بر این اساس بر آن شدیم که با استفاده از روش شبیه‌سازی مونت‌کارلو بندادی (کانونیک)، به بررسی ویژگی پیکربندی‌های تعادلی شاره محدودشده در یک حفره بسیار طویل با مقطع مربعی بپردازیم و میزان نظم یافتگی سیستم را که به گمان ما عامل کندشدن فرایند آبگیری در نانوحفره‌های بسیار باریک است، بررسی کنیم. بدین منظور با محاسبه پارامتر نظم سیستم، تاثیر عوامل مختلفی از جمله ابعاد نانوحفره، قدرت اندرکنش شاره-دیواره، دما و پارامتر نسبی اندازه را بر حالت‌های تعادلی فضای فاز سیستم بررسی نمودیم. تعیین درجه اهمیت تغییر هر یک از عوامل ذکرشده بر نظم سیستم و نیز یافتن شرایطی که تحت این شرایط هر یک از این عوامل بیشترین تاثیر را بر نظم می‌گذارند، نیز از جمله اهداف این تحقیق به شمار می‌رود. تغییرات پارامتر نظم سیستم در چنین نانوحفره‌هایی نشان می‌دهد که شاره در نانوحفره‌هایی با پهنای تنها چند قطر ملکولی و تحت تاثیر اندرکنش جاذب قوی دیواره و به ویژه در دماهای پایین ساختار منظمی پیدا می‌کند و دارای ویژگی‌های شبیه جامدات است و همین امر موجب سختی حرکت لایه‌های ملکولی شاره بر روی یکدیگر شده و در نتیجه آبگیری با کندی بسیار انجام می‌گیرد.

نتایج ما حاکی از آن است که در بین عوامل موثر بر نظم یافتگی سیستم، نقش سطح مقطع نانوحفره بسیار قابل توجه است و تاثیر هر یک از دیگر پارامترها از جمله دما، قدرت اندرکنش شاره-دیواره و حتی پارامتر نسبی اندازه پتانسیل اندرکنشی شاره-دیواره تنها در نانوحفره‌های بسیار باریک و دارای پهنای در حدود چند قطر ملکولی قابل مشاهده خواهد بود.

فهرست مطالب

| صفحه | عنوان |
|------|--|
| ۱ | فصل اول: نظریه ماکروسکوپیکی مویینگی..... |
| ۲ | ۱-۱ مویینگی..... |
| ۵ | ۲-۱ قانون بالاآمدن ناشی از مویینگی..... |
| ۷ | ۳-۱ معادله لوکاس - واشبورن..... |
| ۱۰ | ۴-۱ طول لغزش..... |
| ۱۳ | فصل دوم: مویینگی در مقیاس نانو..... |
| ۱۴ | ۱-۲ مقدمه..... |
| ۱۵ | ۲-۲ اعتبار معادله لوکاس - واشبورن در مقیاس نانو..... |
| ۱۶ | ۱-۲-۲ نتایج مطالعات تجربی..... |
| ۱۷ | ۲-۲-۲ نتایج مطالعات نظری..... |
| ۲۲ | ۳-۲ ظهور طول لغزش در معادله لوکاس - واشبورن..... |
| ۲۶ | ۴-۲ کندشدن آهنگ آگیری در مویین های بسیار باریک..... |
| ۲۸ | ۵-۲ محاسبه ارتفاع بالاآمدن ناشی از مویینگی در مویین های بسیار باریک..... |
| ۲۹ | ۶-۲ شماره های محدود شده..... |
| ۳۰ | ۷-۲ نیروهای سطحی و بین ملکولی..... |
| ۳۰ | ۱-۷-۲ نیروهای سطحی..... |
| ۳۱ | ۲-۷-۲ نظریه DLVO..... |
| ۳۱ | ۳-۷-۲ نیروهای حلال پوشی..... |
| ۳۳ | ۴-۷-۲ ابزار نیروی سطحی..... |
| ۳۵ | ۱-۴-۷-۲ اساس اندازه گیری نیرو در SFA..... |
| ۳۶ | ۵-۷-۲ نیروی نوسانی در فیلم های مایع..... |
| ۳۷ | ۸-۲ مایعات مورد استفاده در مطالعه فیلم های مایع..... |
| ۳۸ | ۹-۲ آبکشی فیلم های نازک مایع..... |

| | |
|----|---|
| ۴۴ | ۱۰-۲ لایه شدگی |
| ۴۷ | ۱۱-۲ معیارهای جامدشدگی فیلم‌های مایع نازک |
| ۴۸ | ۱-۱۱-۲ تابع همبستگی زوج |

فصل سوم: شبیه‌سازی مونت کارلو ۵۲

| | |
|----|--|
| ۵۳ | ۱-۳ اهمیت شبیه‌سازی |
| ۵۴ | ۲-۳ شبیه‌سازی مونت کارلو |
| ۵۵ | ۳-۳ روش مونت کارلو |
| ۵۶ | ۴-۳ روش متروپلیس |
| ۵۹ | ۵-۳ یک الگوریتم پایه ای مونت کارلو |
| ۵۹ | ۱-۵-۳ الگوریتم |
| ۶۰ | ۶-۳ جزئیات تکنیکی |
| ۶۰ | ۱-۶-۳ شرایط مرزی |
| ۶۱ | ۲-۶-۳ جابه‌جایی تک‌جزء |
| ۶۱ | ۳-۶-۳ حذف اندرکنش‌ها (قطع پتانسیل) |
| ۶۳ | ۴-۶-۳ شرایط اولیه |
| ۶۳ | ۷-۳ رسیدن به تعادل |
| ۶۴ | ۸-۳ واحدهای کاهش یافته |
| ۶۵ | ۹-۳ توابع پتانسیل بین ملکولی |
| ۶۵ | ۱-۹-۳ پتانسیل لنارد- جونز |
| ۶۶ | ۲-۹-۳ پتانسیل استیل |

فصل چهارم: نتایج ۷۰

| | |
|-----|---|
| ۷۱ | ۱-۴ مقدمه |
| ۷۱ | ۲-۴ روش شبیه‌سازی |
| ۷۴ | ۳-۴ پارامتر نظم |
| ۷۵ | ۴-۴ مدل |
| ۷۶ | ۵-۴ توابع پتانسیل بین ملکولی |
| ۸۰ | ۶-۴ واحدهای کاهش یافته |
| ۸۱ | ۷-۴ نتایج |
| ۸۱ | ۱-۷-۴ بررسی تاثیر تغییرات پهنای شکاف بر نظم سیستم |
| ۹۶ | ۲-۷-۴ بررسی تاثیر قدرت پتانسیل دیواره بر نظم سیستم |
| ۱۰۳ | ۳-۷-۴ بررسی تاثیر دما بر نظم سیستم |
| ۱۱۱ | ۴-۷-۴ بررسی تاثیر پارامتر اندازه لنارد- جونز بر نظم سیستم |

| | |
|-----|---|
| ۱۱۶ | جمع بندی |
| ۱۱۸ | پیشنهادات |
| ۱۱۹ | مراجع |
| ۱۲۳ | پیوست الف : معادله لوکاس - واشبورن برای جرم بالارونده |
| ۱۲۴ | پیوست ب : پتانسیل ۱۰-۴-۳ استیل |
| ۱۳۲ | پیوست ج : نانوشکاف |

فهرست جدول‌ها

| صفحه | عنوان |
|------|--|
| ۳۰ | جدول (۱-۲): انواع نیروهای سطحی و برد آنها |
| ۳۸ | جدول (۲-۲): ساختار و خواص مایعات مورد استفاده |
| ۳۹ | جدول (۳-۲): جدول تعیین ضخامت لایه چسبنده |
| | جدول (۱-۴): مربوط به یکاهای کاهیده و یکاهای واقعی پارامترهای اندرکنش شماره - شماره و شماره - |
| ۸۰ | دیواره، آرگون و دیواره‌های گرافیتی |
| | جدول (۲-۴): جدول کمیات و پارامترهای موثر بر آهنگ آبگیری و نحوه تاثیر آنها بر پارامتر نظم |
| ۱۱۷ | سیستم و آهنگ آبگیری |
| ۱۳۱ | جدول (الف-۱): عبارات مربوط به سری‌های فوریه انرژی‌های گاز-جامد شبکه‌های خاص |

فهرست شکل‌ها

| عنوان | صفحه |
|--|------|
| شکل (۱-۱): نیروهای وارد بر ملکول واقع در سطح مایع در مقایسه با ملکولی که درون مایع کپه‌ای قرار دارد..... | ۴ |
| شکل (۲-۱): بالارفتن مایع از موئین‌های با قطر متفاوت..... | ۵ |
| شکل (۳-۱): کشش‌های سطحی بین سه فاز مایع، جامد و بخار..... | ۵ |
| شکل (۴-۱): مایعی که تا ارتفاع $H(t)$ در یک موئین بالا رفته است..... | ۹ |
| شکل (۵-۱): شاره درون نانوحفره را در دو حالت شرایط مرزی هیدرودینامیکی لغزشی و غیرلغزشی... ۱۰ | ۱۰ |
| شکل (۶-۱): طول لغزش δ بر حسب قدرت اندرکنش شاره-دیواره ε_{fw}^* | ۱۱ |
| شکل (۷-۱): تاثیر اندازه نسبی ملکول‌های جامد و شاره‌ها و ε_{fw}^* بر زاویه تماس و طول لغزش..... | ۱۲ |
| شکل (۱-۲): جرم بالارونده آب، ان-هگزادکان و 8OCB بر حسب t و $t^{\frac{1}{2}}$ | ۱۶ |
| شکل (۲-۲): نانولوله‌ی استوانه‌ای با شعاع $R = 10$ که در شبیه‌سازی‌های بیندرا از آن استفاده شده است..... | ۱۷ |
| شکل (۳-۲): نمودار مربوط به چگالی میانگین شاره $\rho(z)$ در موئین در زمان‌های مختلف و به ازای $\varepsilon_{wl} = 1,4$ | ۱۸ |
| شکل (۴-۲): نمودار سرعت انحناء متحرک برای $\varepsilon_{wl} = 1,4$ | ۱۸ |
| شکل (۵-۲): نمودار چگالی شاره لنارد جونز را در محدوده انحناء..... | ۱۸ |
| شکل (۶-۲): مربوط به تکامل تدریجی $H(t)$ مربوط به یک شاره ساده نیوتنی LJ با زمان به ازای مقادیر مختلف ε_{wl} | ۱۹ |
| شکل (۷-۲): مقطع نانولوله‌ی استوانه‌ای با شعاع $R = 10$ درحین آبدگیری اجباری در اثر فشار خارجی P_{ext} | ۱۹ |
| شکل (۸-۲): آهنگ آبدگیری $v = dH^2(t)/dt$ بر حسب فشار خارجی P_{ext} را به ازای دو مقدار ε_{wl} | ۲۰ |
| شکل (۹-۲): نمودار فشار لاپلاس P_L بر حسب قدرت اندرکنش دیواره-مایع ε_{wl} | ۲۱ |
| شکل (۱۰-۲): ضریب اصطکاک $\eta/2\kappa$ بر حسب ε_{wl} | ۲۱ |
| شکل (۱۱-۲): تکامل تدریجی $H(t)$ مربوط به یک پلیمر کوتاه انعطاف‌پذیر (کش‌دار) با زمان، برای مقادیر مختلف ε_{wl} | ۲۲ |

- شکل (۲-۱۲): نمودار فرعی تغییر سرعت شعاعی در یک رژیم شارش پایا برای دو نیروی خارجی مختلف..... ۲۳
- شکل (۲-۱۳): جریان لغزشی در یک لوله با شعاع R و طول لغزش δ در مقایسه با جریان غیرلغزشی در یک لوله با شعاع موثر $R + \delta$ ۲۳
- شکل (۲-۱۴): نانولوله‌ی با دیواره‌های پوشیده شده از برس پلیمری که بایندر و همکارانش در شبیه‌سازی خود به کار بردند..... ۲۴
- شکل (۲-۱۵): سینتیک شاره بالارونده در یک موئین..... ۲۵
- شکل (۲-۱۶): مجذور ارتفاع انحنا بر حسب زمان برای یک نانولوله پوشیده شده از پلیمرترشونده..... ۲۵
- شکل (۲-۱۷): تعداد اتم‌های زنون $n(t)$ در نانوسیلندر بر حسب زمان..... ۲۷
- شکل (۲-۱۸): لایه تماسی و ناحیه مغزی در حضور یک محدودیت استوانه‌ای..... ۲۹
- شکل (۲-۱۹): طرح‌واره ساختار یک مایع ساده محدودشده بین دو دیواره موازی و نیروی حلال‌پوشی بر حسب فاصله..... ۳۳
- شکل (۲-۲۰): SFA، ابزار اندازه‌گیری نیروی سطحی ساخته‌شده توسط ایتراپیچوبلی و همکاران..... ۳۴
- شکل (۲-۲۱): SFA، ابزار نیروی سطحی سه محوری ساخته‌شده توسط جرج و همکاران..... ۳۵
- شکل (۲-۲۲): طرح‌واره دستگاه اندازه‌گیری نیروی SFA..... ۳۶
- شکل (۲-۲۳): نیروی سطحی تعادلی بین دو ورقه نازک میکا در OMCT..... ۳۷
- شکل (۲-۲۴): عکس ملکول OMCT..... ۳۷
- شکل (۲-۲۵): لایه مرزی D_s چسبیده به هر یک از سطوح محدودکننده شاره..... ۳۹
- شکل (۲-۲۶): نتایج آزمایشات انجام شده توسط چان و هورن بر روی آبکشی فیلم‌های نازک OMCT..... ۴۰
- شکل (۲-۲۷): نتایج آزمایشات انجام شده توسط چان و هورن بر روی آبکشی فیلم‌های نازک تترادکان و هگزادکان..... ۴۱
- شکل (۲-۲۸): میانگین شدت نور عبوری از سطح تماس به صورت تابعی از زمان، درحین خروج مایع از بین صفحات..... ۴۳
- شکل (۲-۲۹): طرح‌واره فرایند خروج لایه‌ای از $n = 3$ به $n = 2$ ۴۴
- شکل (۲-۳۰): طرح شماتیک چگالی موضعی مایعی با ذرات کروی بر حسب فاصله بین صفحات جامد..... ۴۴
- شکل (۲-۳۱): نمودار تغییرات چگالی شاره به صورت تابعی از فاصله دیواره به ازای مقادیر مختلف σ_{fw}^* ۴۵
- شکل (۲-۳۲): پدیده لایه‌شدگی در حضور دو دیواره ناصاف متحرک..... ۴۵
- شکل (۲-۳۳): طرح‌واره گذار بین یک فیلم لایه شده اما شاره به ضخامت $n_c + 1$ لایه ملکولی به یک فیلم لایه شده اما منجمد شده به ضخامت n_c ۴۶
- شکل (۲-۳۴): ساختار مایع ساده..... ۴۹
- شکل (۲-۳۵): تابع توزیع شعاعی برای یک مایع ساده..... ۴۹

- شکل (۲-۳۶): آرایه ی بلوری دوبعدی ذرات کروی..... ۵۰
- شکل (۲-۳۷): تابع توزیع شعاعی برای یک جامد بسیار منظم..... ۵۰
- شکل (۲-۳۸): توابع توزیع شعاعی برای آرگون مایع و جامد در نقطه سه گانه..... ۵۱
- شکل (۳-۱): نیکلاس متروپلیس (۱۹۱۵-۱۹۹۹)..... ۵۴
- شکل (۲-۲): نحوه بدست آوردن یک پیکربندی جدید از پیکربندی قبلی را در یک شبیه سازی مونت-کارلو نشان می دهد..... ۶۰
- شکل (۳-۳): نمودار تغییرات فشار، انرژی پتانسیل، انرژی جنبشی سیستم و انرژی کل ذره با زمان در آنسامبل کانونی..... ۶۴
- شکل (۳-۴): وابستگی به فاصله در پتانسیل لنارد- جونز..... ۶۶
- شکل (۳-۵): ساختار لایه ای گرافیت در یک حفره شکافی..... ۶۷
- شکل (۴-۱): پارامتر نظم سیستمی با پهنای $4\sigma_{ff}$ بر حسب مضارب مختلف σ_{ff} ۷۵
- شکل (۴-۲): نانوحفره مکعبی طویل با مقطع مربع..... ۷۶
- شکل (۴-۳): نمودار چاه پتانسیل در نانوحفره..... ۷۷
- شکل (۴-۴): نانوحفره مکعبی با دیواره های گرافیتی..... ۷۷
- شکل (۴-۵): طرح شماتیکی پهنای فیزیکی و پهنای قابل دسترس حفره و بخش های جاذب و دافع پتانسیل ۱۰-۴-۳ استیل..... ۷۹
- شکل (۴-۶): تصاویر گرفته شده از مقاطع مختلف پیکربندی فضای فاز سیستم در $T^*=1$ و $\epsilon_{wf}^*=0$ ، برای نانوحفره ای با پهنای σ_{ff} ۸۲
- شکل (۴-۷): نمودار انرژی پتانسیل کاهش یافته با قدرت اندرکنش $\epsilon_{wf}^*=0/2$ به صورت تابعی از فاصله از دیواره، برای پهنای مختلف منطبق بر $2\sigma_{ff}$ ، $3\sigma_{ff}$ ، $4\sigma_{ff}$ ، $5\sigma_{ff}$ و $9\sigma_{ff}$ ۸۳
- شکل (۴-۸): تصاویر گرفته شده از مقاطع مختلف پیکربندی فضای فاز سیستم در $T^*=1$ و $\epsilon_{wf}^*=1/2$ برای نانوحفره ای با پهنای $10\sigma_{ff}$ ۸۵
- شکل (۴-۹): تصاویر گرفته شده از مقاطع مختلف پیکربندی فضای فاز سیستم در $T^*=1$ و $\epsilon_{wf}^*=1/2$ برای نانوحفره ای با پهنای $8\sigma_{ff}$ ۸۶
- شکل (۴-۱۰): تصاویر گرفته شده از مقاطع مختلف پیکربندی فضای فاز سیستم در $T^*=1$ و $\epsilon_{wf}^*=1/2$ برای نانوحفره ای با پهنای $6\sigma_{ff}$ ۸۷
- شکل (۴-۱۱): تصاویر گرفته شده از مقاطع مختلف پیکربندی فضای فاز سیستم در $T^*=1$ و $\epsilon_{wf}^*=1/2$ برای نانوحفره ای با پهنای $4\sigma_{ff}$ ۸۸
- شکل (۴-۱۲): تصاویر گرفته شده از مقاطع مختلف پیکربندی فضای فاز سیستم در دمای $T^*=1$ و $\epsilon_{wf}^*=1/2$ ، برای نانوحفره ای با پهنای $3\sigma_{ff}$ ۸۹
- شکل (۴-۱۳): نمودارهای چگالی شاره در راستای X را برای نانوحفره هایی با پهنای $4\sigma_{ff}$ و $5\sigma_{ff}$ در دو حالت $\epsilon_{wf}^*=0$ و $\epsilon_{wf}^*=1/2$ ۹۱

شکل(۴-۱۴): نمودار تغییرات پارامتر نظم انتقالی سیستم با تغییر پهنای نانوحفره و در حضور $\varepsilon_{wf}^* = 1/2$ ، در دمای $T^*=1$ ۹۳

شکل(۴-۱۵): نمودارهای چگالی آرگون را برای نانوحفره‌هایی با پهنای $3\sigma_{ff}$ ، $3/5\sigma_{ff}$ و $4\sigma_{ff}$ ، در $\varepsilon_{wf}^* = 1/2$ و در دمای $T^*=1$ ۹۴

شکل(۴-۱۶): تصاویر گرفته شده از مقطع XZ پیکربندی فضای فاز سیستم در دمای $T^*=1$ و $\varepsilon_{wf}^* = 1/2$ ، برای نانوحفره‌هایی با پهنای $3\sigma_{ff}$ و $3/5\sigma_{ff}$ ۹۵

شکل(۴-۱۷): پتانسیل کاهش یافته شاره- دیواره نانوحفره برحسب فاصله از مرکز نانوحفره برای دو پهنای متفاوت و به ازای مقادیر مختلف ε_{fw}^* ۹۶

شکل(۴-۱۸): تصاویر گرفته شده از پیکربندی فضای فاز مربوط به نانوحفره‌ای با پهنای $4\sigma_{ff}$ در دمای $T^*=1$ به ازای مقادیر مختلف ε_{fw}^* ۹۷

شکل(۴-۱۹): نمودارهای چگالی آرگون برای نانوحفره‌ایی با پهنای $4\sigma_{ff}$ در دمای $T^*=1$ و به ازای مقادیر مختلف ε_{fw}^* ۹۸

شکل(۴-۲۰): نمودار تغییرات پارامتر نظم انتقالی سیستم با تغییر پارامتر قدرت پتانسیل برای نانوحفره‌ای با پهنای $4\sigma_{ff}$ ۹۹

شکل(۴-۲۱): نمودارهای چگالی آرگون برای نانوحفره‌ای با پهنای $10\sigma_{ff}$ در دمای $T^*=1$ و به ازای مقادیر مختلف ε_{fw}^* ۱۰۰

شکل(۴-۲۲): نمودار تغییرات پارامتر نظم انتقالی سیستم با تغییر پارامتر قدرت پتانسیل در دو نانوحفره با مساحت سطح مقطع متفاوت ۱۰۲

شکل(۴-۲۳): نمودارهای چگالی آرگون را برای نانوحفره‌ای با پهنای $4\sigma_{ff}$ در حالت $\varepsilon_{wf}^* = 0$ و به ازای دماهای مختلف ۱۰۳

شکل(۴-۲۴): تصاویر گرفته شده از پیکربندی فضای فاز سیستمی با پهنای $4\sigma_{ff}$ برای $\varepsilon_{wf}^* = 1/2$ در دو دمای مختلف ۱۰۵

شکل(۴-۲۵): نمودارهای چگالی آرگون برای نانوحفره‌ای با پهنای $4\sigma_{ff}$ به ازای دماهای مختلف و در حضور دیواره با قدرت اندرکنش $\varepsilon_{wf}^* = 1/2$ ۱۰۶

شکل(۴-۲۶): نمودار تغییرات پارامتر نظم انتقالی سیستم با تغییر دما برای نانوحفره‌ای با پهنای $4\sigma_{ff}$ و در حضور دیواره‌های با پارامتر قدرت پتانسیل $\varepsilon_{wf}^* = 1/2$ ۱۰۷

شکل(۴-۲۷): نمودار تغییرات پارامتر نظم انتقالی سیستم با دما را برای نانوحفره‌ای با پهنای $4\sigma_{ff}$ و به ازای سه مقادیر مختلف پارامتر قدرت پتانسیل ۱۰۹

شکل(۴-۲۸): نمودار تغییرات پارامتر نظم انتقالی سیستم با تغییر دما، برای نانوحفره‌ای با پهنای $10\sigma_{ff}$ و در حضور دیواره‌های با پارامتر قدرت پتانسیل $\varepsilon_{wf}^* = 1/2$ ۱۱۰

شکل(۴-۲۹): تصاویر گرفته شده مربوط به مقطع XZ پیکربندی‌های فضای فاز، به ازای مقادیر مختلف ε_{fw}^* و σ_{wf}^* ۱۱۲

- شکل (۴-۳۰): نمودارهای چگالی آرگون برای نانوحفره‌ای با پهنا σ_{ff} و در حضور دیواره با قدرت اندرکنش $\varepsilon_{wf}^* = 0.2$ و $\varepsilon_{wf}^* = 1/2$ ، به ازای مقادیر مختلف σ_{wf}^* ۱۱۳
- شکل (۴-۳۱): نمودار تغییرات پارامتر نظم انتقالی در راستای X سیستم را بر حسب σ_{wf} به ازای دو مقدار پارامتر قدرت پتانسیل $\varepsilon_{wf}^* = 1/6$ و $\varepsilon_{wf}^* = 0.2$ ۱۱۴
- شکل (ب-۱): سلول‌های شبکه واحد سطحی را برای کریستال‌های در نظر گرفته شده ۱۲۹
- شکل (ج-۱): حفره شکافی (نانوشکاف) متشکل از صفحات گرافیتی نامحدود ۱۳۲

فصل اول

نظریہ ماکروسکوپیکی مویپنگی

۱- نظریه ماکروسکوپیکی موینگی

۱-۱ موینگی

موینگی در واقع توانایی یک ماده در کشیدن یک مایع دیگر به داخل خود است. مثال استاندارد آن لوله-ای است که به صورت قائم در تماس با یک مایع ترکننده قرار می‌گیرد و مقداری از مایع در لوله بالا می‌رود، البته این پدیده را می‌توان در مورد یک کاغذ نیز مشاهده کرد. بسیاری از فرایندهای طبیعی و فعالیت‌های بشر با کمک پدیده موینگی اتفاق می‌افتد. برای مثال آب موجود در لایه‌های بالایی خاک به داخل گیاهان کشیده می‌شود و در آن‌ها حرکت می‌کند و یا توانایی نفوذ مایعات به داخل حفره‌های باریک و صخره‌هایی که دارای دیواره ترکننده هستند ناشی از اثر موینگی است. شناخت پدیده موینگی و قوانین حاکم بر آن در استحصال روغن از دانه‌های روغنی، چاپگرهای جوهری، رنگرزی محصولات نساجی و زمینه‌های دیگر دارای اهمیت است. در مقیاس نانو نیز پرشدن نانولوله‌های کربنی توخالی، امکان تولید نانوساختارهای یک‌بعدی را فراهم می‌کند [۱]. به همین دلیل موینگی از مباحث مورد علاقه در صنعت و علوم پایه به‌شمار می‌رود.

لئوناردو داوینچی^۱ اولین کسی است که پدیده موینگی را مشاهده نموده و آن را در نوشته‌هایش به ثبت رسانده است. او در مورد این پدیده چنین نتیجه‌گیری کرد که ورود یک‌باره حجمی از مایع به داخل لوله، به دلیل وجود شبکه‌ای از مویین‌های نرم که قادر به جذب (بالا بردن آب) هستند اتفاق می‌افتد. روهاالت^۲ (۱۶۲۰-۱۶۷۵) عقیده داشت که آب توانایی لازم برای انتشار در یک لوله باریک را ندارد به همین دلیل برای بالارفتن مایع در لوله باید خلأ ایجاد شود. مونتاناری^۳ (۱۶۳۳-۱۶۸۷) که یک منجم بود، بالارفتن مایع در یک لوله را با بالا رفتن شیره در یک گیاه مقایسه نمود. بُرلی^۴ (۱۶۰۸-۱۶۷۹) که به دلیل مشاهداتش از ماه‌های سیاره مشتری و تحقیقاتش در مورد تحرک حیواناتی که قادر به فرار نبودند به خوبی شناخته شده و معروف است، در سال ۱۶۷۰ تشریح کرد که ارتفاع مایعی که در لوله بالا می‌رود با شعاع لوله نسبت عکس دارد.

^۱. Leonardo Davinci

^۲. J.Rohault

^۳. G.Montanari

^۴. G.Borelli

اما ستاره واقعی در این داستان مردی است که امروزه به ناحق به فراموشی سپرده شده است. هوکس بی^۵ (۱۷۱۳) کسی است که این پدیده را برای اولین بار به یک روش سیستماتیک مورد مطالعه قرارداد. او با انجام یک سری از آزمایشات که اغلب با الکل و لوله شیشه‌ای انجام می‌شد به نتایج زیر دست یافت:

- ۱- بالارفتن مایع در هوا هم به خوبی خلأ انجام می‌شود. بدین ترتیب نظریه روهالت را که در آن موینگی بدون وجود خلأ معتبر نیست، نقض کرد.
- ۲- این اثر مخصوص ظروف استوانه‌ای نیست. در بین دو صفحه موازی نزدیک به هم نیز مایع به خوبی بالا می‌رود اما ارتفاع مایع نصف ارتفاع آن در یک لوله با شعاعی مساوی فاصله بین صفحات است.
- ۳- بررسی این اثر با استفاده از دیگر مایعات مانند الکل، اسانس سقز، روغن معمولی و دیگر جامداتی مانند سنگ مرمر و آلیاژ برنج نیز انجام شده است.
- ۴- ارتفاع مایع به ضخامت دیواره‌های لوله بستگی ندارد. هوکس بی با به‌کاربردن دو لوله که دارای شعاع-های داخلی یکسان اما شعاع‌های خارجی متفاوت بودند، مشاهده کرد که مایع در هر دو لوله به یک ارتفاع بالا می‌رود.

هوکس بی یکی از هم‌قطاران ایساک نیوتن بود. نیوتن این آزمایشات مختلف را در رساله مشهور خود به نام «Optics» تشریح کرده است اما متأسفانه نامی از هوکس بی نبرده است. در ۱۷۱۲ ریاضی دانی به نام تیلر^۶ - پدر بسط‌های تیلور در ریاضی - آزمایشی را روی اثرات موینگی بین دو صفحه شیشه‌ای موازی بسیار نزدیک به هم، به شکل یک گوه با زاویه بسیار کوچک انجام داد. او در حین این آزمایش مشاهده کرد که اولاً کاهش فاصله بین دو صفحه موجب افزایش ارتفاع بالارفتن مایع می‌شود و ثانیاً مرز مایع، هذلولی شکل به نظر می‌رسد. البته این مشاهدات توسط آزمایشات دقیق هوکس بی تصدیق شده بود. هیچ‌یک از افرادی که در بررسی قانون بالا آمدن ناشی از موینگی مشارکت داشتند نتوانستند به این بررسی‌ها خاتمه دهند و به نتیجه مطلوب دست یابند. در این میان فیزیولوژیست انگلیسی گورین^۷ (۱۶۸۴-۱۷۵۰) در سال ۱۷۱۸ نشان داد ارتفاعی که مایع بالا می‌رود با شعاع لوله نسبت معکوس دارد و همین امر موجب شهرت یافتن او شد [۲]. فهم موفقیت‌آمیز چگونگی بالارفتن ناشی از موینگی، یکی از موفقیت‌های علم فیزیک است که در قرن نوزدهم (۱۸۰۶)، توسط یانگ و لاپلاس مطرح شد. اولین مقاله در مورد موینگی را آلبرت انیشتن تحت عنوان «نتایج پدیده‌ی موینگی» در ۱۹۰۱ در *Annalen der Physik* چاپ کرد و در ۱۹۰۵ نیز چهار مقاله بنیادی دیگر درباره این پدیده در همین ژورنال به چاپ رسانید. قوانین اساسی حاکم بر موینگی در یک قرن پیش و تقریباً از ۱۹۱۸ به بعد مورد بررسی قرار گرفته است [۳].

^۵ F.Hauksbee

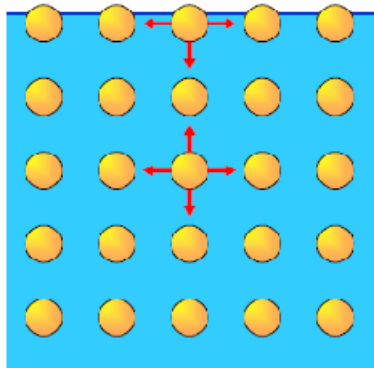
^۶ B.Tylor

^۷ J.Gurin

بسیاری از پدیده‌ها مثل کشش سطحی^۸، موینگی و چسبندگی شاره‌ها را می‌توان با استفاده از نیروهای جاذبه بین مولکول‌ها توجیه کرد. اگر مولکول‌ها خیلی به هم نزدیک باشند نیروهای میان آن‌ها دافعه و در غیر این صورت جاذبه است.

پدیده بالا رفتن یا پایین آمدن مایع در موئین‌ها ناشی از کشش سطحی و مقدار نسبی نیروهای پیوستگی^۹ (نیروی جاذبه بین ملکول‌های مایع به یکدیگر) و چسبندگی^{۱۰} (نیروی جاذبه بین ملکول‌های جامد و مایع) است. هنگامی که نیروهای چسبندگی بین ملکول‌های مایع و ماده دیگر قوی‌تر از نیروهای پیوستگی بین ملکول‌های داخل مایع باشد، موینگی اتفاق می‌افتد و مایع جامد را تر می‌کند و در محل تماس مایع با یک سطح عمودی انحناء تشکیل می‌شود.

کشش سطحی، γ ، انرژی آزاد مورد نیاز برای ایجاد واحد مساحت سطح است. نیروی کششی که بر واحد طول خط تماس در سطح وارد می‌شود، فصل مشترک تلاش می‌کند تا در غیاب میدان خارجی، مساحت سطح را کمینه کند و بنابراین انرژی آزاد سطح کمینه می‌شود. γ در سطح ملکولی از آن جا ناشی می‌شود که یک ملکول به‌طور میانگین، در فصل مشترک در سمت فاز چگال‌تر (مثل مایع) جاذبه قوی‌تری را تجربه می‌کند (شکل (۱-۱)). مفهوم کشش سطحی بر فصل مشترک جداکننده دو فاز کپه‌ای دلالت می‌کند [۵،۶].



شکل (۱-۱): هر یک از ملکول‌ها توسط دیگر ملکول‌های درون شاره کپه‌ای به‌صورت متقارن جذب می‌شوند. اما یک ملکول سطح به‌صورت نامتقارن توسط دیگر ملکول‌ها جذب می‌شود. ملکول مایع در سطح جاذبه کم‌تری را احساس می‌کند، پس انرژی بیشتری دارد.

برای مثال هنگامی که یک لوله شیشه‌ای را در داخل مایعی مانند آب فرو می‌بریم، کشش سطحی، ستون مایع را بالا می‌کشد. بالا کشیدن مایع تا زمانی ادامه پیدا می‌کند که جرم ستون مایع به اندازه ای برسد که نیروی گرانش حاصل از آن بتواند بر نیروهای بین‌ملکولی غلبه کند. وزن ستون مایع با مربع قطر لوله و طول تماس (اطراف انحناء تشکیل شده) تنها با قطر لوله متناسب است و بنابراین ستون مایع در یک لوله باریک نسبت به یک لوله عریض بالا تر خواهد رفت (شکل (۱-۲)). در مورد برخی مواد مانند جیوه و

⁸ . Surface tension

⁹ . Cohesion

¹⁰ . Adhesion