

گذار فاز اول در ذرات قرصی شکل محصور بین دو دیواره: همسانگردی به نماتیک و 2H-1P به 4H-1P

روح الله علی آبادی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه صنعتی سیرجان، سیرجان

پست الکترونیکی: r.aliabadi@sirjantech.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۳ / ۰۶ / ۰۴؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۳ / ۰۸ / ۰۶)

چکیده:

در این مقاله، سامانه‌ای متشکل از ذرات قرصی شکل با سطح مقطع مربع ($D \times D$) و ضخامت L محدود شده بین دو دیواره سخت با فاصله H را با استفاده از نظریه اونساگر و تقریب زوانزیگ بررسی کردیم. مشخص شد گذارفاز همسانگردی به نماتیک این ذرات با کوچک تر شدن فاصله صفحات به مرور ضعیف تر و نهایتاً تمام خواهد شد. این نتایج به طور کیفی تطبیق خوبی با نتایج مراجع قبلی داشت. به علاوه نشان داده شد که ذراتی با ابعاد تقریبی $L/D = 0.2$ از خود گذار فاز نوع اولی از 2H-1P به فاز 4H-1P برای فاصله صفحات خاصی نشان می دهند که این گذارفاز در دو نقطه بحرانی به پایان می رسد و در ناحیه ای که وجود دارد با افزایش فاصله صفحات در چگالی های کمتری رخ می دهد. این گذار فاز خاص با دور شدن از $L/D = 0.2$ تقلیل یافته و ناپدید می شود.

واژه های کلیدی: گذارفاز، اونساگر، همسانگرد، نماتیک، لیوتروپیک

۱. مقدمه

با وجود فراوانی ذرات قرصی شکل در طبیعت، درک رفتار مکانیک آماری سیالات حاوی این ذرات، در مقایسه با ذرات کروی، پیشرفت کمتری داشته است [۴]. دلیل اصلی این موضوع، پیچیدگی برهم کنش های بین این ذرات است. در اواخر دهه ۱۹۴۰، اونساگر [۵] اولین کسی بود که به صورت نظری امکان وقوع یک گذارفاز مرتبه اول از حالت همسانگردی^۱ به حالت نماتیک^۲ را اثبات کرد. اگرچه نظریه او در اصل برای ذرات میله ای شکل در محلول توسعه یافته بود، اما بر اساس ایده اصلی آن، پیش بینی های کیفی برای ذرات صفحه ای نیز قابل اعمال است. این ایده بر این اصل استوار است که برهم کنش های دافعه قوی و وابسته به شکل هندسی و جهت گیری ذرات، به تنهایی مسئول برقراری نظم نماتیکی

مزوژن ها اجزاء کلیدی بسیاری از مواد طبیعی و مصنوعی از جمله خاک رس و سامانه های ماکرومولکولی هستند. این ذرات تمایل ذاتی به تشکیل فاز ویژه ای از بلور مایع به نام فاز نماتیک دارند. آرایش منظم مزوژن ها در این فاز منجر به بروز خواص فیزیکی منحصر به فردی در این مواد با کاربردهای بالقوه در زمینه های مختلف مانند ساخت نمایشگرها، حسگرها و مواد نانو اپتیک می شود [۱-۳]. در این مقاله، به بررسی رفتار ذرات قرصی کلونیدی با سطح مقطع مربعی محدود بین دو دیواره، پرداخته می شود.

۱. Isotropic
۲. Nematic

این حال، همانطور که اونساگر در مقاله اصلی خود اشاره کرده است، چالش ذاتی در مورد ذرات قرصی این است که برخلاف ذرات میله‌ای نازک، دیگر نمی‌توان از اثر همبستگی‌های مرتبه بالاتر (سه‌ذره‌ای و بیشتر) صرف‌نظر کرد. در نتیجه، انتظار می‌رود که رویکرد اولیه مبتنی بر صرف‌نظر کردن از جملات مرتبه بالاتر در بسط ویرال (نظریه اونساگر) [۵] در بهترین حالت، نتایج کیفی ارائه دهد. اینگا و فرنکل [۱۵] در یک مطالعه پیشگامانه با استفاده از شبیه‌سازی رایانه‌ای، شواهد عددی برای وقوع گذار فاز همسانگرد-نماتیک در سامانه‌های متشکل از قرص‌های دایره‌ای با ضخامت بسیار کم ارائه کردند. آنها دریافتند که چگالی لازم برای وقوع گذار بسیار کمتر از پیش‌بینی نظریه اونساگر است و ماهیت مرتبه اول بودن این گذار نیز از آنچه پیش‌بینی شده بود ضعیف‌تر است. این مغایرت را می‌توان به طور کامل به دلیل نادیده گرفتن جملات مرتبه‌های بالاتر در نظریه اونساگر، ناشی از سادگی مدل مورد استفاده او دانست.

۲. مدل نظری

در این مقاله، نظم نماتیک قرص‌های سخت با سطح مقطع مربع شکل $(D \times D)$ با ارتفاع L در فضای محدود بین دو دیواره موازی سخت بدون ساختار و عمود بر محور z با فاصله H از یکدیگر، مورد بررسی قرار می‌گیرد. هدف از این مطالعه، پیش‌بینی و بررسی گذار فاز بین ساختارهای مختلف نماتیک در سامانه‌ای متشکل از ذرات قرصی شکل با استفاده از نظریه اونساگر و استفاده از تقریب زوانزیگ است. در این تقریب، جهت‌گیری ممکن ذرات به سه جهت x ، y و z محدود می‌شود. معادله اصلی مورد استفاده، معادله انرژی آزاد اونساگر است که در رابطه (۱) نشان داده شده است:

هستند. توصیف نظری او توسط مشاهدات تجربی گذار فاز همسانگرد-نماتیک در سامانه‌های وانادیم پنتاکسید نواری شکل [۶] و ذرات میله‌ای شکل ویروس موزاییک تنباکو (TMV)^۱ تأیید شده است [۷]. بعدها چنین گذاری در تعلیق‌های دیگری با اشکال مختلف ذرات، مانند ذرات صفحه مانند گوتیت [۸] نیز کشف شد.

لازم به ذکر است در چگالی‌های بالا، فاز نماتیک ذرات قرص مانند نسبت به نظم ستونی^۲ که با آرایش صفحه‌ای (دوبعدی) شش ضلعی ستون‌ها مشخص می‌گردد، ناپایدار می‌شود. مشابه با تشکیل فاز نماتیکی، پایداری فاز ستونی را هم می‌توان تنها بر اساس ملاحظات آنتروپی توضیح داد. البته سامانه به دلیل تبلور جزئی ناشی از نظم ستونی، بخشی از آنتروپی پیکربندی خود را از دست می‌دهد، اما این کاهش با افزایش همزمان آنتروپی انتقالی جبران می‌شود. به عبارت دیگر میانگین فضای در دسترس برای هر ذره افزایش خواهد یافت. در این مقاله، به بررسی فاز ستونی پرداخته نمی‌شود.

به دلیل وجود رفتار فازی بسیار غنی‌تر در بلورهای مایع محصور، اثرات سطحی در کاربردهای عملی بسیار جالب هستند. به عنوان مثال، دیواره‌ها می‌توانند منجر به پدیده‌های لنگراندازی مختلف و رفتارهای فازی مختلف مانند جابه‌جایی در گذار فاز نسبت به سامانه کپه‌ای شوند [۹-۱۱]. به طور کلی، هنگامی که یک مایع در تماس با فاز دیگری مانند سطح جامد قرار می‌گیرد، دیواره تغییرات قابل توجهی در ساختار و رفتار فازی مایع ایجاد می‌کند [۱۲] که به دلیل رقابت شدید بین برهمکنش‌های ذره-ذره (برهم‌کنش‌های ذاتی) و برهم‌کنش‌های ذره-دیواره (برهم‌کنش‌های خارجی) است [۱۳].

در این مقاله، به بررسی گذار فاز همسانگرد به نماتیک و همچنین بین دو فاز نماتیک با ساختارهای متفاوت با استفاده از نظریه اونساگر و به کار بردن تقریب زوانزیگ [۱۴] پرداخته می‌شود. با

$$\beta\Omega / A = \sum_{i=x,y,z} \int dz (\rho_i(z) \ln \rho_i(z) - \rho_i(z)) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=x,y,z} \int dz_i \rho_i(z_i) \int dz_j \rho_j(z_j) A_{exc}^{ij}(z_i, z_j) + \sum_{i=x,y,z} \int dz_i \rho_i(z_i) [\beta V_{ext}^i(z_i) - \beta\mu], \quad (1)$$

۱. Mosaic Tobacco Virus

۲. Columnar phase

مختلف معادله (۳) در صفحه $\beta\Omega/A - \beta\mu$ تعیین می‌شود. برای تشخیص درجه نظم سامانه در فاز نماتیک از پارامتر نظم زیر استفاده شده است:

$$S(z) = \frac{1}{\rho(z)} \int_0^H d\theta \rho(z, \theta) P_r(\cos \theta) = \frac{\rho_z(z) - \rho_x(z)/2 - \rho_y(z)/2}{\rho(z)} \quad (5)$$

که $P_r(\cos \theta) = \frac{1}{4} (3 \cos^2 \theta - 1)$ دومین جمله از چند جمله‌ای لژاندر است و پارامتر نظم میانگین نیز با رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$S_{av} = \frac{1}{H} \int_0^H S(z) dz \quad (6)$$

در شکل‌هایی که در این مقاله ترسیم شده‌اند از پارامترهای بدون بعد زیر استفاده شده است: z/D , L/D , H/D و $\rho_{av}^* = \frac{1}{H} \int_0^H \rho^*(z) dz = \frac{1}{H} \int_0^H \rho(z) D^* dz$ و محاسبات $D=1$ در نظر گرفته شده و برای بی‌بعد کردن کمیت‌ها به کار رفته است.

۳. نتایج

شکل ۱ طرحواره‌ای از سامانه مورد بررسی را نشان می‌دهد که در آن ذرات قرصی شکل بین دو صفحه قرار گرفته‌اند و مجاز به جهت‌گیری تنها در سه جهت x , y و z هستند. در صورتی که ذرات شبیه ذره بنفش رنگ قرار بگیرند فاز مربوط به آن را هومئوتروپیک (H) می‌نامیم و اگر ذرات شبیه قرص‌های آبی و سبز رنگ قرار بگیرند به فاز مربوطه پلنار (P) می‌گوییم. لازم به ذکر است هر دو فاز H و P از جمله فازهای نماتیک هستند. به منظور بررسی کیفی نظریه استفاده شده و مقایسه پاسخ آن با مقالات دیگر، در ابتدا گذارفاز همسانگردی (I) به نماتیک (N) ذره $L/D = 0.2$ با تغییر فاصله صفحات در شکل ۲ ترسیم شده است. همانگونه که از شکل ۲ پیداست این گذارفاز از نوع اول بوده که در فاصله صفحات بزرگ قوی است اما به مرور با کوچک‌تر شدن فاصله صفحات ضعیف‌تر شده و نهایتاً در فاصله

در این معادله، $\beta = 1/k_B T$ ، μ پتانسیل شیمیایی و $\rho_i(z)$ چگالی ذرات است. جمله آخر در رابطه (۱) مربوط به برهم‌کنش ذرات بوده و $A_{exc}^{ij}(z_1 - z_2)$ سطح ممنوعه بین دو ذره است که به فاصله مرکز جرم ذرات از یکدیگر یعنی $(r_1 - r_2)$ و زاویه قرارگیری آنها یعنی i و j وابسته است. سطوح ممنوعه بین دو ذره در مقاله چاپ شده در سال ۲۰۱۵ و ۲۰۱۸ توسط علی آبادی و همکاران [۱۶ و ۱۷] محاسبه شده‌اند و در اینجا از تکرار آنها پرهیز می‌کنیم. در رابطه (۱)، $V_{ext}^i(z)$ پتانسیل خارجی اعمال شده از سوی دیواره‌ها بر روی ذرات با جهت i است که به شکل زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$\begin{aligned} \beta V_{ext}^x(z) &= \beta V_{ext}^y(z) = \begin{cases} \infty, & z < D/2 \text{ and } z > H - D/2 \\ 0, & D/2 < z < H - D/2 \end{cases} \\ \beta V_{ext}^z(z) &= \begin{cases} \infty, & z < L/2 \text{ and } z > H - L/2 \\ 0, & L/2 < z < H - L/2 \end{cases} \end{aligned} \quad (2)$$

که H فاصله بین دیواره‌هاست.

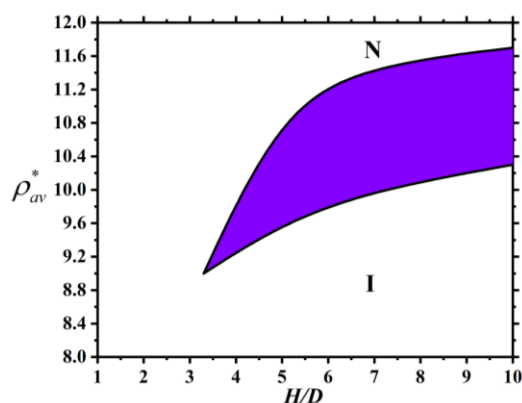
به‌منظور محاسبه چگالی در حالت تعادل، باید پتانسیل بزرگ مقیاس نسبت به تمام مؤلفه‌های چگالی کمینه شود یعنی $\delta(\beta\Omega)/\delta\rho_k(z) = 0$ که این مشتق‌گیری تابعی منجر به روابط زیر خواهد شد:

$$\begin{aligned} \rho_i(z) &= \exp \left\{ - \sum_{j=x,y,z} \int dz_j \rho_j(z_j) A_{exc}^{ij}(z - z_j) \right\} \\ &\exp \{ -\beta V_{ext}^i(z) \} \exp \{ \beta \mu \}, \quad (i = x, y, z), \end{aligned} \quad (3)$$

این سه معادله خودسازگار جفت شده برای ρ_x , ρ_y و ρ_z بوده و به صورت عددی با روش تکرار استاندارد در پتانسیل شیمیایی مشخصی حل می‌شوند. لازم به ذکر است در این مطالعه از روش دوزنقه‌ای برای حل انتگرال‌ها استفاده شده است. چگالی موضعی کلی با رابطه زیر داده می‌شود:

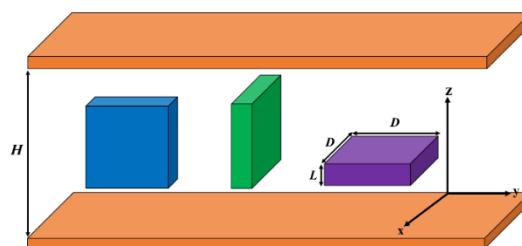
$$\rho(z) = \rho_x(z) + \rho_y(z) + \rho_z(z). \quad (4)$$

چگالی‌های حاصل از معادله (۳) داخل معادله (۱) قرار داده می‌شوند تا مقدار تعادلی پتانسیل بزرگ مقیاس سامانه به دست آید و نهایتاً انتقال فاز مرتبه اول که بین فازهای مورد بررسی صورت می‌گیرد، با جستجوی نقطه تقاطع بین دو دسته جواب



شکل ۲. نمودار گذارفاز همسانگردی به نماتیک ذراتی با $L/D = 0.2$ که در صفحه $H/D - \rho_{av}^*$ ترسیم شده است.

در شکل ۵. الف نمودار چگالی‌ها در سه جهت مجاز جهت‌گیری مربوط به نقطه‌ای با مشخصات $H/D = 2$ ، $L/D = 0.2$ و $\rho_{av}^* = 6$ نمایش داده شده‌اند که همان نقطه مربع شکل روی شکل ۶ است. همانگونه که مشخص است یک لایه نازک هومئوتروپیک در نزدیکی هر یک از دیواره‌ها شکل گرفته که در وسط فضای بین دو صفحه یک لایه ضخیم پلنار وجود دارد. بیشتر ذرات لایه پلنار میانی در جهت x بوده و تعداد خیلی خیلی کمی در راستای y هستند بنابراین $\rho_y \approx 0$. علت شکل‌گیری لایه‌های هومئوتروپیک در کنار دیواره‌ها جذب^۱ بالای صفحات روی ذرات و فاز ترجیحی هومئوتروپیک نزدیک دیواره‌هاست. در این مقاله، به اختصار نام این ساختار را 2H-1P نامیده‌ایم (شکل ۴). با افزایش چگالی انتظار می‌رود فاز سامانه تغییر کند. شکل ۵. ب نمودار چگالی‌ها را در $H/D = 2$ ، $L/D = 0.2$ و $\rho_{av}^* = 9$ نشان می‌دهد (نقطه ستاره شکل روی شکل ۶). همانگونه که در این شکل پیداست با افزایش چگالی، تعداد لایه‌های هومئوتروپیک نزدیک هر دیواره به دو عدد افزایش یافته و لایه میانی نیز بسیار تیزتر شده است که در این مقاله این فاز را با 4H-1P نمایش می‌دهیم (شکل ۴). شکل ۶ نمودار گذارفاز بین دو فاز ذکر شده را نشان می‌دهد. محور افقی شکل ۶ فاصله بین صفحات و محور عمودی چگالی متوسط را نشان می‌دهد.



شکل ۱. طرحواره‌ای از امکان و نحوه قرارگیری ذرات قرصی شکل بین دو صفحه. در صورتی که ذرات شبیه ذره بنفش رنگ قرار بگیرند فاز مربوط به آن را هومئوتروپیک (H) می‌نامیم و اگر ذرات شبیه قرص‌های آبی و سبز رنگ قرار بگیرند به فاز مربوطه پلنار (P) می‌گوییم.

صفحات بحرانی $H/D \approx 3/2$ به اتمام می‌رسد. این نتیجه با نتایج ذکر شده در مرجع [۹] به طور کیفی تطبیق دارد. مرجع فوق به مطالعه گذارفاز I به N برای قرص‌های استوانه‌ای شکل بین دو دیواره سخت با جهت‌گیری آزاد ذرات پرداخته است. چگالی‌های گذاری که در این مقاله به دست آمده‌اند حدوداً ۳ برابر از چگالی‌های گزارش شده در مرجع [۹] بزرگ‌ترند. دلیل این امر اختلاف شکل هندسی ذرات مورد مطالعه و استفاده از تقریب زوانزیگ در این مقاله است؛ چراکه حجم ممنوعه بین قرص‌های استوانه‌ای شکل بزرگ‌تر از قرص‌هایی با شکل هندسی مکعب مستطیل است و این امر خود منجر به شکل‌گیری زودتر فاز نماتیک در استوانه‌ها می‌شود. به علاوه در مقالات نشان داده شده است تقریب زوانزیگ چگالی‌های بالاتری برای گذارفاز پیش‌بینی می‌کند [۱۸]. همچنین در شکل ۳ تغییرات میانگین پارامتر نظم (معادله ۶) برای ذراتی با $L/D = 0.2$ در پتانسیل شیمیایی‌های همزیستی و برای فازهای همسانگردی و نماتیک ترسیم شده که این نتیجه نیز همخوانی کیفی مناسبی با نتایج مرجع [۹] دارد.

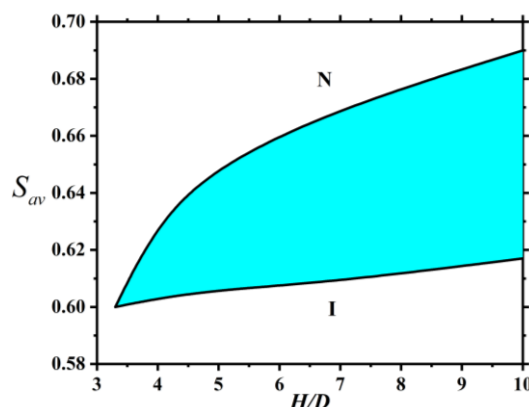
در این مقاله، همچنین گذارفازهای جدیدی ارائه شده است که به صورت طرحواره در شکل ۴ نمایش داده شده‌اند. ذرات بررسی شده در این بخش $L/D = 0.18, 0.20, 0.22$ هستند که برای فاصله صفحات $D < H < 3D$ مطالعه صورت گرفت. علت انتخاب این بازه اجتناب از رخداد فازهای بسیار پیچیده و به علاوه بررسی گذارفازهای سامانه‌های شبه‌دوبعدی است که از اهمیت زیادی در علم و صنعت برخوردارند.

گرفت که برای این ذرات نیز این نوع گذارفاز دیده شد (شکل ۷). آنچه از شکل ۷ مشخص است این است که با دور شدن از $L/D = 0/2$ این نوع گذارفاز در حال ضعیف شدن است و به مرور نیز محو می‌شود. به عنوان مثال چنین فازها و گذارفازهایی برای ذرات $L/D = 0/1$ و $L/D = 0/3$ دیده نشدند.

۴. بحث و نتیجه‌گیری

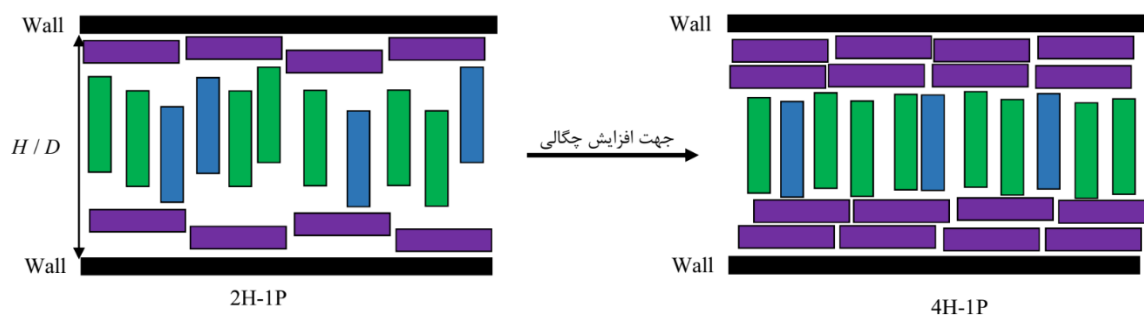
در این مقاله، در ابتدا به بررسی گذار فاز همسانگرد به نماتیک ذرات قرصی شکل با سطح مقطع مربعی با نظریه اونساگر و تقریب زوانزیک پرداختیم تا بتوانیم نتایج حاصل را با نتایج موجود مقایسه کرده و پیش‌بینی این نظریه رخداد این نوع گذارفاز در فاصله صفحات $H/D \geq 3/2$ است که نتایج حاصل گواه پیش‌بینی‌های کیفی مناسبی برای این گذارفاز بود. همچنین نوع خاصی از گذارفاز برای این ذرات که تنها در سامانه‌های محدود شده قابلیت شکل‌گیری دارند مورد مطالعه قرار گرفت. تمرکز ما بر مطالعه ساختار سامانه‌هایی است که حداکثر چند لایه محدود از ذرات قابل شکل‌گیری باشند که چنین امری با ساختارهای ناهمگن قوی در مجاورت دیوارها مشخص می‌شود. به علاوه، ساختارها حتی در مرکز سامانه به ساختار کپه‌ای خود تقلیل نمی‌یابند و بنابراین تداخل قوی بین دیواره‌های مقابل مسئول فازهای مشاهده شده است. بررسی نظری ذرات در منافذ بسیار باریک می‌تواند شواهدی برای ساختارهای مجاز در سامانه‌های شبه‌دوبعدی ارائه دهد که در آنها ساختارهایی حاصل از ویژگی‌های موئینگی شکل می‌گیرد [۱۹]. مشخص شد ذره $L/D = 0/2$ برای برخی از فاصله صفحات، گذار فازی بین دو فاز 2H-1P و فاز 4H-1P با افزایش چگالی نشان می‌دهد که این گذار فاز در دو نقطه بحرانی به اتمام می‌رسد. چنین گذار فازی برای ذرات نازک‌تر و ضخیم‌تر نیز دیده شد که البته این گذار فاز با دور شدن از $L/D = 0/2$ به مرور تضعیف و ناپدید می‌شود.

نمودارهای چگالی به وضوح نشان می‌دهند که فاز ترجیحی کنار دیواره‌ها هم‌مئوتروپیک بوده و دیواره‌ها جذب قوی روی این نوع فاز دارند چراکه قله این چگالی در کنار دیواره‌ها بسیار بزرگ است.

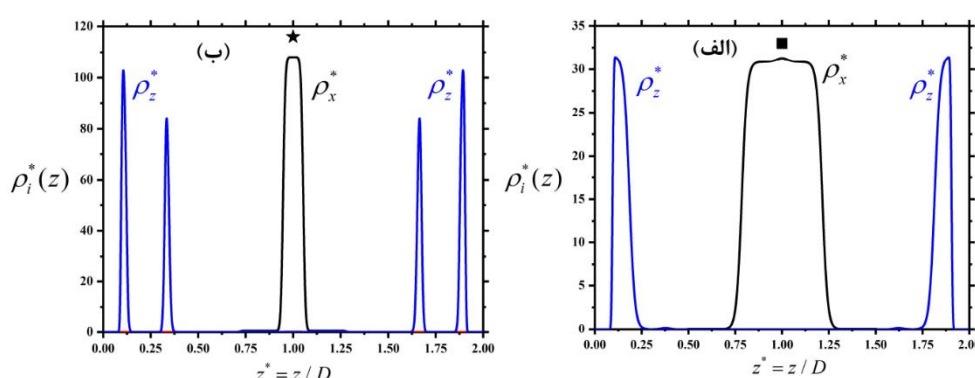


شکل ۳. تغییرات میانگین پارامتر نظم (معادله (۶)) برای ذراتی با $L/D = 0/2$ در پتانسیل شیمیایی‌های همزیستی برای فازهای همسانگردی و نماتیک که در صفحه $H/D - S_{av}$ ترسیم شده است.

مشخص است یک گذارفاز نوع اول در بازه $H/D = 1/9$ تا $H/D = 2/8$ رخ می‌دهد که سامانه از فاز 2H-1P به فاز 4H-1P تغییر ساختار اتفاق می‌افتد. این گذار فاز در دو نقطه بحرانی با مشخصات تقریبی $H/D = 1/9$ و $\rho_{av}^* = 5/5$ و $H/D = 2/8$ و $\rho_{av}^* = 4/38$ به پایان می‌رسد. علت به پایان رسیدن این گذار فاز در $H/D = 1/9$ این است که امکان شکل‌گیری فاز 4H-1P در $H/D < 1/9$ عملاً بسیار سخت و یا غیرممکن است؛ چرا که $2L + D + 2L = 1/8$ و بنابراین فاصله صفحات برای شکل‌گیری این فاز در $H/D < 1/9$ بسیار کوچک است. همچنین دلیل به پایان رسیدن این گذارفاز در $H/D = 2/8$ این است که امکان شکل‌گیری فازهای پیچیده‌تر اما پایدارتر در فاصله صفحات بزرگ‌تر فراهم می‌شود. همانگونه که از شکل ۶ پیداست این گذارفاز با بزرگ‌تر شدن فاصله بین صفحات در چگالی‌های کمتری رخ می‌دهد که دلیل آن امکان شکل‌گیری ساده‌تر فاز 4H-1P در فاصله صفحات بزرگ‌تر است. نکته‌ای که از مقایسه شکل‌های ۲ و ۶ مشخص است و باید به آن دقت کرد این است که ناحیه رخداد گذار فاز 2H-1P به 4H-1P، $H/D < 3$ است حال آن که منطقه رخداد گذار فاز I-N، $H/D \geq 3/2$ است. بنابراین ناحیه رخداد این دو نوع گذار فاز تداخلی با یکدیگر ندارند. وجود این گذار فاز برای ذرات مقداری باریک‌تر و ضخیم‌تر از ذره فوق الذکر یعنی ذرات $L/D = 0/18$ و $L/D = 0/22$ نیز مورد بررسی قرار



شکل ۴. طرحواره‌ای از فازهای مورد بررسی. (سمت چپ): در این فاز، کنار هر دیواره یک لایه هوموتروپیک و یک لایه پلنار شکل گرفته است که به آن به اختصار 2H-1P می‌گوییم. (سمت راست): در این فاز که با افزایش چگالی شکل می‌گیرد کنار هر دیواره دو لایه هوموتروپیک و در وسط یک لایه پلنار شکل گرفته است که به آن به اختصار 4H-1P می‌گوییم.



شکل ۵. (الف) نمودار رخ‌نمای چگالی مربوط به نقطه $H/D = 2$ ، $L/D = 0.2$ و $\rho_{av}^* = 9$ که نمایشگر فاز 4H-1P است. (ب) نمودار رخ‌نمای چگالی مربوط به نقطه $H/D = 2$ ، $L/D = 0.2$ و $\rho_{av}^* = 6$ که نمایشگر فاز 2H-1P است و (ب) نمودار

همچنین نظریه اونساگر و نظریه‌های برگرفته از آن مثل پارسونز-لی قابلیت پیش‌بینی فازهای جامد را ندارند پس در چگالی‌های بالا این احتمال وجود دارد که سامانه ابتدا وارد فاز جامد شود و بعد تعداد لایه‌های آن با افزایش چگالی تغییر کند. قله‌های بسیار تیز نمایش داده شده در نمودارهای چگالی شکل ۵ می‌تواند گواه رخداد فاز بلوری ناشی از موئینگی باشد که در سامانه‌های به شدت محصور شده امری طبیعی است. هرچند در آزمایش‌ها و در واقعیت به دلیل حضور ذرات با اندازه‌های مختلف رخداد فاز بلوری به تعویق می‌افتد [۲۴ و ۲۵].

به طور کلی لایه لایه شدن سیال حاصل حضور دیواره‌ها یا یک فاز دیگر است اما نوع لایه‌های آن وابسته به نوع برهم‌کنش‌های بین مولکولی و برهم‌کنش‌های مولکول‌ها و دیواره‌ها است که این موضوع در مقالات شون [۲۶ و ۲۷] با در نظر گرفتن برهم‌کنش لنارد-جونز بین مولکول‌ها و برهم‌کنش‌های مختلف

شکل‌گیری این جهت‌گیری کنار دیواره‌ها منجر به ایجاد فضای در اختیار بیشتر برای ذرات بین صفحات می‌شود که در تطبیق با مقالات دیگر است [۲۰].

نکاتی که باید در مورد نتایج حاصل به آن دقت کرد این است که استفاده از نظریه اونساگر به دلیل حذف ضرایب ویرال بالاتر از دو، و در نظر نگرفتن برهم‌کنش‌های سه‌تایی به بالا و همچنین استفاده از تقریب زوانزیگ که جهت ذرات را محدود در نظر می‌گیرد، ممکن است باعث نمایش فازهای مصنوعی شوند. به منظور اطمینان از واقعی بودن این فازها باید سامانه مشابهی با روش‌های شبیه‌سازی مورد مطالعه قرار گیرد و یا این که در بررسی‌های نظری از نظریه FMT^۱ با جهت‌گیری کامل ذرات استفاده شود [۲۱ و ۲۲]؛ چراکه ثابت شده است این نظریه برای قرص‌های بسیار نازک دقیق است [۲۳].

۱. Fundamental measure theory

بین ذرات و دیواره‌ها به خوبی ثابت شده است. همچنین حضور پتانسیل‌های جاذبه نیز نقش بسیار مهمی در شکل‌گیری فازها دارند. به عنوان مثال در یک مطالعه نظری گذار فاز مایع به بخار ذرات قرص شکل لیونیت^۱ با اضافه کردن یک پتانسیل جاذبه ساده به پتانسیل ناشی از برهم‌کنش دافعه پوسسته سخت دیده شد [۲۸ و ۲۹]. البته باید توجه داشت که در سامانه‌هایی با چگالی‌های بالا، برهم‌کنش دافعه ناشی از شکل هندسی ذرات بیشترین نقش را در شکل‌گیری فاز ذرات دارد [۵ و ۳۰]. به علاوه همانطور که در مقدمه نیز اشاره شد براساس شبیه‌سازی‌ها

این احتمال وجود دارد که در واقعیت گذار فاز نوع اول بسیار ضعیف‌تر از پیش‌بینی‌های این مقاله باشد. ما معتقدیم که مدل ارائه شده در این مقاله به طور کلی برای مولکول‌های به شدت محدود شده با شکل هندسی قرصی قابل استفاده است و نتایج حاصله به طور کیفی قابل استناد هستند. یافته‌های این مقاله می‌تواند برای طراحی دستگاه‌های دوحالته^۲ یا حسگرهای فشاری که در آنها از بلورهای مایع لیوتروپیک^۳ استفاده می‌کنند، مفید باشد [۳۱].

۵. مراجع

1. L Bellier-Castella, D Caprion, J P Ryckaert, *J. Chem. Phys.* **121** (2004) 4874.
2. J A C Veerman, D Frenkel, *Phys. Rev. A.* **45** (1992) 5632.
3. R Aliabadi, M Moradi, and S Varga, *J. Chem. Phys.* **144** (2016) 074902.
4. S Mizani, et al., *Phys. Rev. E.* **100** (2019) 032704.
5. L Onsager, *Ann. N. Y. Acad. Sci.* **51** (1949) 627.
6. H Zocher, *Und Allg. Chemie.* **147** (1925) 91.
7. F C Bawden, et al., *Nature.* **138** (1936) 1051.
8. K Coper and H Freundlich, *Trans. Faraday Soc.* **33** (1937) 348.
9. H Reich and M Schmidt, *J. Phys. Condens. Matter.* **19** (2007) 0326103.
10. A Maličevský and S Varga, *J. Phys. Condens. Matter.* **22** (2010) 175002.
11. H Salehi, et al., *Phys. Rev. E.* **98** (2018) 032703.
12. M Moradi, R J Wheatley, and A Avazpour, *J. Phys. Condens. Matter.* **17** (2005) 5625.
13. D de Las Heras, E Velasco, and L Mederos, *J. Chem. Phys.* **120** (2004) 4949.
14. R. Zwanzig, *J. Chem. Phys.* **39** (1963) 1714.
15. D Frenkel and R Eppenga, *Phys. Rev. Lett.* **49** (1982) 1089.
16. R Aliabadi, M Moradi, and S Varga, *Phys. Rev. E* **92** (2015) 032503.
17. R Aliabadi, et al., *Phys. Rev. E.* **97** (2018) 012703.
18. K Shundyak and R van Roij, *Phys. Rev. E* **69** (2004) 041703.
19. P Gurin, G Odriozola, and S Varga, *New J. Phys.* **23** (2021) 063053.
20. R Aliabadi, S Nasirimoghadam, and H H Wensink, *Phys. Rev. E.* **107** (2023) 054117.
21. H Hansen-Goos and K Mecke, *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 18302.
22. H Hansen-Goos and K Mecke, *J. Phys. Condens. Matter.* **22** (2010) 364107.
23. H Reich, et al., *J. Phys. Chem. B.* **111** (2007) 7825.
24. J C P Gabriel and P Davidson, *Colloid Chem.* **I** (2003) 119.
25. J P F Lagerwall, et al., *NPG Asia Mater.* **6** (2014) e80.
26. M Schoen and M Schoen, *J. Chem. Phys.* **7** (1996) 2910.
27. M Schoen, et al., *J. Chem. Phys.* **88** (1988) 1394.
28. B Ruzicka, et al., *Nat. Mater.* **10** (2011) 56.
29. E Meneses-Juarez, et al., *Soft Matter* **9** (2013) 5277.
30. L Mederos, E Velasco, and Y Martínez-Ratón, *J. Phys. Condens. Matter* **26** (2014) 463101.
31. J K Kim, et al., *Appl. Phys. Lett.* **95** (2009) 63505.

^۱. Laponite

^۲. Bistable devices

^۳. Lyotropic