

## گذار فاز مرتبه اول ترشوندگی وابسته به دما روی یک سطح گرافیتی

فرشاد بهاروند<sup>۱</sup>، فاطمه ابراهیمی<sup>۱</sup>، احسان ندایی اسکویی<sup>۲</sup> و حامد مالکی<sup>۳</sup>

۱. گروه فیزیک، دانشگاه بیرجند، بیرجند

۲. گروه فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه، زنجان

۳. گروه فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

پست الکترونیکی: f\_ebrahimi@birjand.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۳/۱۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۰/۳/۳۰)

### چکیده

در این مقاله با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی وابستگی ترشوندگی یک سطح گرافیتی متشکل از دو لایه گرافن به دما، برای سه تا از مدل‌های متداول آب مطالعه شده است. برای هر دمای مفروض، شدت ترشوندگی سطح گرافیتی با تخمین زاویه تماس قطره ماکروسکوپی از روش برون‌یابی نمودار زاویه تماس بر حسب وارون شعاع برای نانو قطره‌های آب تعیین شده است. اگر چه مدل‌های مورد استفاده در اینجا ترشوندگی ناچیزی در دمای اتاق نشان می‌دهند، نتیجه شبیه‌سازی‌های ما حکایت از رویداد گذار فاز ترشوندگی برای هر سه مدل مورد مطالعه در دماهایی کوچک‌تر از دمای بحرانی آنها دارد. روند مشاهده شده برای وابستگی زاویه تماس به دما و اندازه تقریبی دمای گذار، قابل مقایسه با نتایج تجربی است که اخیراً برای گرافیت گزارش شده است. برازش منحنی‌ها به یک مدل پیشنهادی نشان می‌دهند که رخداد گذار فاز برای هر سه مدل از مرتبه اول است.

واژه‌های کلیدی: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، گرافن، گرافیت، گذار فاز، ترشوندگی

### ۱. مقدمه

شوندگی گرافن اثر تعیین کننده‌ای در پدیده‌هایی دارد که در آن سطح مشترک آب با گرافن نقش مهمی را ایفا می‌کند [۱]. از جمله این موارد می‌توان به عملکرد غشاهای گرافنی و برای تصفیه آب [۲-۵]، در پوشش سطوح بدون اثرگذاری بر خاصیت ترشوندگی آنها [۶-۸] و همچنین در پدیده‌های مرتبط با انتقال و انباشت آب در غشاهای نانولوله‌های کربنی اشاره کرد [۹-۱۴].

سطوح گرافیتی متشکل از لایه‌های تکی، دوتایی، سه‌تایی و ... گرافن خواص مکانیکی و الکتریکی استثنایی دارند که به دلیل آنها در مرکز توجه بسیاری از پژوهش‌ها در حوزه‌های مختلف فناوری‌های نوین شده‌اند. یکی از خواص مهم هر سطحی از جمله گرافن، میزان ترشوندگی آن با مایعات مختلف و آب است که به فراوانی در همه جا حضور دارد. شدت میزان تر

جامد مختلف: گرافیت، کوارتز و یاقوت مشاهده شد [۱۷]. با به کارگیری دو روش اندازه‌گیری اپتیکی زاویه تماس و همچنین محو شدن چگالش قطره‌گون مشاهده شد که آب خالص در دمای گذار ترکندگی  $271^{\circ}\text{C}$  سطح گرافن را کاملاً تر می‌کند. نتایج شبیه‌سازی‌های مولکولی بر روی سرعت جذب آب در نانولوله‌های کربنی نیز بر وقوع گذار فاز ترکندگی آب بر روی سطح گرافن در دمایی پایین‌تر از دمای بحرانی آن دلالت دارد [۱۸]. نمودار گذار فاز به دست آمده نشانگر یک گذار فاز مرتبه اول است که قابل برازش به یک تابع تک- پارامتری از دماست که برای وقوع گذار فاز ترکندگی روی سطوح جامد پیشنهاد شده است [۱۹].

در تحقیق پیش رو، ما با استفاده از یک روش دقیق و به صورت سیستماتیک، یعنی با شبیه‌سازی مستقیم نانوقطره‌های آب با اندازه‌های مختلف بر روی گرافن دو لایه (سطح یک لایه متشکل از دو ورق گرافن)، وابستگی زاویه تماس نانومتری و ماکروسکوپی را به دما بررسی خواهیم کرد. مشابه این روش توسط داتا و همکاران [۲۰] برای بررسی ترکندگی وابسته به دمای آب روی سطح گرافیت انجام شده بود که در مقایسه با سیستم مورد مطالعه ما از تعداد بسیار بیشتری از صفحات گرافن (بسته به انتخاب شعاع قطع برهم‌کنش آب- کربن) تشکیل شده است. اگر چه آنها وقوع گذار فاز ترکندگی را پیش‌بینی کرده بودند، اما مقدار دمای گذار و وابستگی بین زاویه تماس و دمایی که آنها به دست آورده‌اند با نتایج تجربی سازگار نیست.

در مقایسه با گرافیت، سیستم مورد مطالعه ما را می‌توان دو بعدی فرض کرد؛ اما باید توجه داشت که میزان ترشوندگی گرافن توسط آب در دمای اتاق تحت تأثیر عواملی چون روش ساخت، عامل دار شدن، وجود نقایص و غیره تغییر می‌کند، به طوری که هنوز توافقی روی مقدار دقیق آن وجود ندارد [۲۰] و [۲۱]. در این پژوهش ما پارامترهای برهم‌کنش آب با کربن را چنان اختیار کرده‌ایم که میزان ترکندگی مدل‌های بررسی شده در این تحقیق تقریباً به مقدار گزارش شده توسط فریدمن و همکاران [۱۷] نزدیک باشند. به این ترتیب می‌توان به سادگی

میزان ترکندگی یک مایع روی سطح جامد را تفاوت بین برهم‌کنش‌های پیوستگی بین مولکول‌های مایع و برهم‌کنش چسبندگی بین جامد و مایع مشخص می‌کند. عوامل متعددی در طول فرایند ساخت و تهیه نمونه بر روی خاصیت ترکندگی سطوح گرافیتی و لایه‌های گرافنی اثر می‌گذارند که برخی از آنها قابل کنترل و برخی دیگر ناخواسته هستند [۱]. به همین دلیل میزان ترکندگی این سطوح از آزمایشی به آزمایش دیگر می‌تواند کاملاً متفاوت باشد؛ اما یکی از متغیرهای بسیار مهم و قابل کنترل که اثرات بارزی بر ترکندگی تمام سطوح دارد دمای سیستم است. در سال ۱۹۷۷، کان [۱۵] با یک استدلال ساده نشان داد که حتی اگر مایعی در دمای خاص نتواند به طور کامل یک سطح را تر کند، با افزایش دما و قبل از رسیدن به دمای بحرانی  $T_C$ ، گذار فازی اتفاق می‌افتد که در آن یکی از دو فاز مایع یا گاز به طور کامل سطح جامد را تر کنند. دمای مشخصه‌ای که برای اولین بار این ترکندگی مشاهده می‌شود، دمای گذار ترکندگی  $T_W$ ، نامیده می‌شود. استدلال کان چنین بود: در تعادل ترمودینامیکی، زاویه تماس یک قطره ماکروسکوپی روی یک سطح کاملاً هموار ( $\theta_M$ ) از معادله یانگ تعیین [۱۶]

$$\cos \theta_M = \frac{\gamma_{SG} - \gamma_{SL}}{\gamma_{LG}}, \quad (1)$$

که در آن  $\gamma_{SG}$ ،  $\gamma_{SL}$  و  $\gamma_{LG}$  به ترتیب کشش سطحی جامد- بخار، جامد- مایع و مایع- بخار هستند. با افزایش دمای سیستم،  $\gamma_{LG}$  کاهش می‌یابد به طوری که در  $T = T_C$ ، یعنی نقطه بحرانی، به مقدار صفر می‌رسد. اما اندازه  $\cos \theta_M$  نمی‌تواند بزرگ‌تر از یک باشد. بنابراین قبل از رسیدن به حالت بحرانی، در دمایی کمتر ( $T_W < T_C$ ) اندازه  $\cos \theta_M$  به مقدار واحد می‌رسد. در چنین حالتی بسته به علامت  $\cos \theta_M$ ، یکی از دو فاز بخار یا مایع سطح جامد را تر می‌کنند.

آب خالص در دمای اتاق بسیاری از سطوح را تر نمی‌کند؛ بنابراین بر مبنای تحلیل کان انتظار می‌رود که با افزایش دمای آن بتوان به حالت ترکندگی کامل رسید. این امر به صورت تجربی برای اولین بار توسط فریدمن، خلیل و تابورک برای سه

می‌شود. شبیه‌سازی‌ها با استفاده از بسته نرم‌افزاری لمپس انجام شده است [۲۲]. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی هنگرد NVT انجام شده است. دمای سامانه با استفاده از دمایی نوز- هوفر کنترل شده است. اتم‌های کربن در طی شبیه‌سازی‌ها ثابت نگه داشته می‌شوند. گرافیت مورد مطالعه در شبیه‌سازی از دو صفحه گرافن، شامل اتم‌های کربن به فاصله  $l = 1/24 \text{ \AA}$  تشکیل شده است. فاصله این دو صفحه از هم  $3/4$  آنگستروم است که صفحه بالایی به وسیله بردار  $(l/2, (\sqrt{3}l)/2)$  نسبت به صفحه پایین جابه‌جا شده است. محاسبه زاویه تماس توسط الگوریتمی چند مرحله‌ای انجام می‌شود. در مرحله اول فایل‌های مکان‌های مولکول‌های آب پردازش می‌شوند. در مرحله دوم به دلیل حرکت نانوقطره آب بر روی صفحه گرافیت در طول زمان، ابتدا مرکز جرم قطره بر روی صفحه  $x$  و  $y$  را در هر گام زمانی به دست آورده و با استفاده از یک بردار مناسب برای هر گام زمانی، مختصات مولکول‌های آب را به مرکز محورهای مختصات در  $(0, 0)$  منتقل می‌کنیم. در دماهای بالا تعیین مرکز جرم نانوقطره آب دشوار است زیرا تعداد زیادی از مولکول‌ها در فاز بخار هستند پس مولکول‌های بخار ناخواسته را با استفاده از روش فاصله ماهالانویس حذف می‌کنیم [۲۳]. اگر  $R_c$  ماتریسی  $n \times 3$  مرکز ستونی متشکل از  $(x - \bar{x}, y - \bar{y}, z - \bar{z})$  (متوسط نقاط  $x$  است) داده از  $n$  نقطه باشد، ماتریس  $C_x$  به صورت  $C_x = \frac{1}{n-1} (R_c)^T (R_c)$  تعریف می‌شود. آنگاه فاصله ماهالانویس به صورت  $D_i = \sqrt{R_i C_x^{-1} R_i^T}$  محاسبه می‌شود ( $R_i$  میانگین داده مرکزی از نقطه داده  $i$  ام) (شکل ۱).

در مرحله بعدی نمایه‌های مولکول‌های آب را با استفاده از معرفی قوطی‌های استوانه‌ای به دست می‌آوریم. از مرکز توده قطره به عنوان مرکز صفر  $(0, 0)$  و لایه گرافیت به عنوان مرجع صفر در جهت  $z$  استفاده می‌شود. ارتفاع قوطی‌ها  $0.5$  آنگستروم است و حجمی برابر دارند. مرزهای دیفرانسیل شعاعی در  $r_i = \sqrt{\frac{i \delta A}{\pi}}$  برای  $i = 1, \dots, N$  و سطح پایه در هر قوطی  $\delta A = 95 \text{ \AA}^2$  است. پس از آن، برای تعیین زاویه تماس آب ابتدا مکان نقاط هم مولار در تقسیم سطح به قوطی‌ها در هر لایه

اعتبار نتایج به دست آمده را با مقایسه آنها با تابع تک پارامتری پیشنهادی در مرجع [۱۹] بررسی کرد. طرح اجمالی مقاله به صورت زیر است:

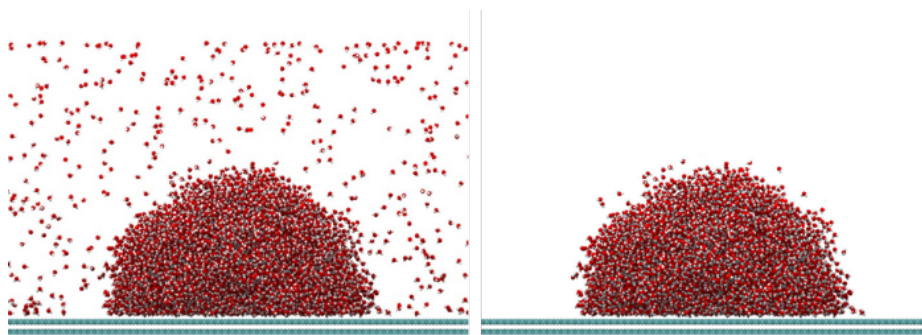
در بخش‌های بعدی که پس از بخش مقدمه می‌آیند، ابتدا جزئیات روش شبیه‌سازی نانو قطره و محاسبه ویژگی‌های هندسی آن تشریح خواهد شد. سپس در بخش نتایج، وابستگی زاویه تماس نانو قطره‌های مدل‌های آب در دماهای مختلف محاسبه و از روی آنها زاویه تماس ماکروسکوپی به روش برون‌یابی تخمین زده می‌شود. نتایج به دست آمده با روش تجربی مقایسه و مدل ریاضی پیشنهاد شده در مرجع [۲۱] برازش داده خواهد شد. مقاله با جمع‌بندی نتایج به پایان می‌رسد.

## ۲. روش‌شناسی و مدل شبیه‌سازی

برهم‌کنش بین اتم‌ها توسط پارامترهای لنارد- جونز و بار الکتریکی اختصاص داده شده به هر اتم مشخص می‌شود. برای برهم‌کنش لنارد- جونز داریم:

$$U_{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad i \neq j, \quad (2)$$

که در آن  $r_{ij}$  فاصله بین اتم‌های  $i$  و  $j$  است،  $\sigma$  فاصله‌ای است که پتانسیل بین ذرات صفر است،  $\epsilon$  عمق انرژی برهم‌کنش بین اتم‌های کربن و اکسیژن و  $q_i$  و  $q_j$  بارهای متمرکز بر این اتم‌ها هستند. علاوه بر برهم‌کنش لنارد- جونز، برهم‌کنش کولنی بین اتم‌های اکسیژن و هیدروژن در یک مولکول آب با اتم‌های اکسیژن و هیدروژن در مولکول‌های دیگر آب در قطره به صورت  $\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$  در نظر گرفته شده است. برهم‌کنش‌های کولنی در فاصله  $12$  آنگستروم در فضای واقعی و دورتر از این مقدار با روش ppm با دقت  $0.001$  تنظیم شده است. زاویه پیوند و فاصله پیوند در تمام شبیه‌سازی با الگوریتم SHAKE ثابت نگه داشته شده‌اند. ابعاد جعبه شبیه‌سازی با شرایط مرزی  $300 \times 300 \times 300$  آنگستروم است. پیکربندی اولیه با قرار دادن مولکول‌های آب بر روی یک شبکه مکعبی ساده تولید



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) یک نمونه از پیکربندی سامانه از قرار گرفتن قطره آب روی صفحه گرافیت در دمای ۴۰۰ کلون بعد از ۲۰۰ گام زمانی در حالت تعادل، (سمت چپ) قبل از حذف مولکول‌های بخار آب و (راست) پس از حذف مولکول‌های بخار آب.

جدول ۱. مقایسه پارامترهای بین اتم‌های کربن و اکسیژن مورد استفاده در شبیه‌سازی.

مدل آب	$\sigma_{CO}(\text{\AA})$	$\epsilon_{CO} \left( \frac{kJ}{mole} \right)$
SPC/E	۳/۱۹	۰/۳۹۲۰
TIP4P/2005	۳/۱۸	۰/۴۲۷۹
TIP3P	۳/۲۰	۰/۳۱۷۶

آمده است. از گسترش خطوط برازش شده متناسب با قطرات بی نهایت بزرگ ( $\frac{1}{r} \rightarrow \infty$ ) می‌توان زاویه تماس ماکروسکوپی  $\theta_M$  را محاسبه کرد. مقدار زاویه تماس در دمای ۲۷ درجه سلسیوس برای مدل‌های TIP4P/2005، SPC/E و TIP3P به ترتیب برابر با  $۸۹/۰ \pm ۳$ ،  $۸۴/۳ \pm ۳$  و  $۷۵/۵ \pm ۳$  است. در کل مقاله، خطای ذکر شده همان خطای قدر مطلق است. همین روش در دماهای بالاتر تکرار شد و مشاهده شد که با افزایش دما، چگالی جرم مایع کاهش می‌یابد و در عین حال، بیشتر و بیشتر مولکول‌های آب مانند شکل ۱ تبخیر می‌شوند؛ بنابراین کسری از مولکول‌های آب در فاز مایع با دما کاهش می‌یابد.

زاویه تماس مدل‌های مختلف آب از قانون  $TIP4P/2005 > TIP3P > SPC/E$  تبعیت می‌کند. نه ساختار سطحی<sup>۱</sup> آب بر روی گرافیت و نه انرژی واسطه مربوطه<sup>۲</sup> نمی‌توانند وابستگی  $\theta$  به مدل آب نشان داده شده در شکل ۲ را توضیح دهند. دلیل

افقی نانو قطره تعیین می‌شود. نمایه قطره باید حالت کروی تشکیل دهد به طوری که نمایه باید یک دایره باشد در تقارن شعاعی در نزدیکی گرافیت با واکنش‌های آب-کربن در چندین لایه افت‌وخیز ایجاد می‌شود. در نهایت یک دایره بر روی متوسط چندین گام زمانی از این نقاط برازش می‌شود. برای جلوگیری از تأثیر افت‌وخیز چگالی در نزدیکی سطح، تنها نقاط هم مولار بالاتر از ارتفاع ۸ آنگستروم از سطح گرافیت را در نظر می‌گیریم [۲۴]. با بررسی قطرات در اندازه‌های مختلف مشخص می‌شود که ارتفاع منطقه افت‌وخیزی مستقل از اندازه قطره آب است و یک پدیده موضعی است.

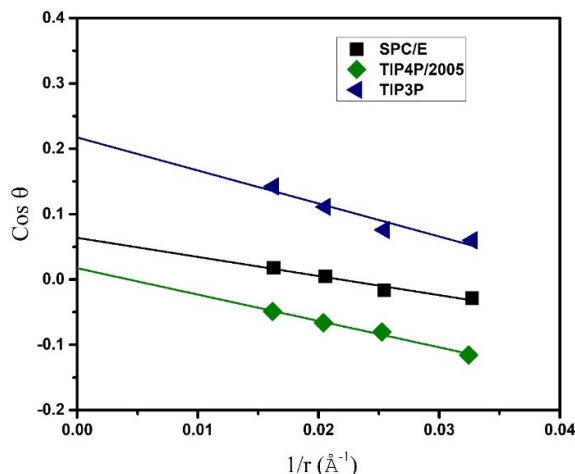
### ۳. نتایج شبیه‌سازی

در این پژوهش پارامترهای برهم‌کنش اکسیژن با کربن مطابق جدول ۱ در نظر گرفته شد.

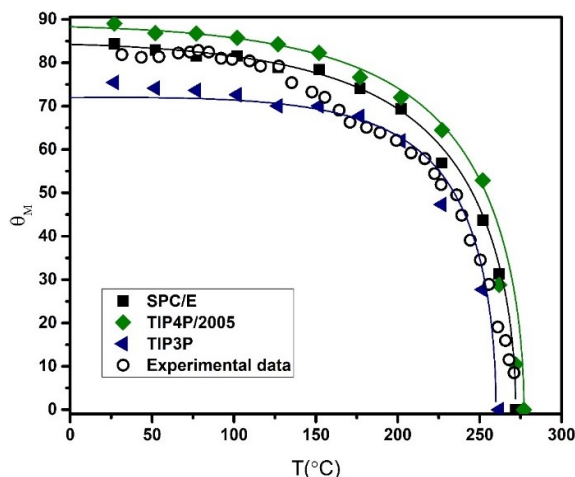
در شکل ۲، نمودار تغییر کسینوس زاویه تماس با عکس شعاع در دمای ۲۷ درجه سلسیوس همراه با برونیایی برای تعیین زاویه تماس ماکروسکوپی سیستم  $\theta_M$  برای سه مدل آب

۱. Interfacial structure

۲. Corresponding interfacial energy



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار تغییر کسینوس زاویه تماس با عکس شعاع در دمای ۲۷ درجه سلسیوس همراه با برونیابی برای تعیین زاویه تماس ماکروسکوپی سیستم  $\theta_M$  برای سه مدل آب.



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار تغییر زاویه تماس ماکروسکوپی  $\theta_M$  با دما برای سه مدل آب و مقایسه آن با داده‌های تجربی به همراه نمودار مدل‌سازی شده برای هر مدل با استفاده از معادله ۳ [۱۷].

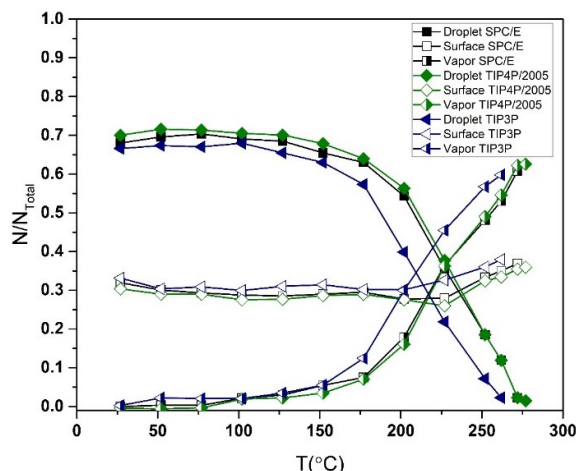
خطی) به عنوان تابعی از دما همراه با داده‌های تجربی [۱۷] در شکل ۳ آمده است.

نتایج نشان داده شده در شکل ۳ نشان می‌دهد که برای دمای کمتر از ۲۰۰ درجه سانتی‌گراد، میزان تر کنندگی همه این مدل‌ها به تدریج با درجه حرارت افزایش می‌یابد. پس از آن، کاهش زاویه تماس ماکروسکوپی سرعت می‌یابد به طوری که برای همه این موارد شاهد گذار تر کنندگی از نوع اول هستیم [۳۰]. این دما به طور قابل توجهی کمتر از دمای بحرانی برای SPC/E، TIP3P و مدل‌های آب است.

این رفتار در بررسی  $\gamma_{LV}$  مشخص می‌شود. وگا و همکاران [۲۵] نشان دادند که  $\gamma_{LV}$  برای آب از ترتیب  $TIP4P/2005 > TIP3P > SPC/E$  پیروی می‌کند [۲۶]. بایستی توجه داشت که اکثر مدل‌های آب به طور معمول مقدار تجربی  $\gamma_{LV}$  را تولید نمی‌کنند بلکه با آن در مواردی با بیش از ۱۰٪ تفاوت دارند [۲۷]. در مقیاس نانومتری، مقدار  $\gamma_{LV}$  به انحنا سطح مشترک بخار-مایع<sup>۱</sup> [۲۸] و ارتفاع قطره بستگی دارد [۲۹].

زاویه تماس ماکروسکوپی (با استفاده از روش برونیابی

۱. Curvature of the liquid-vapor interface



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نسبت مولکول‌ها بر حسب دما برای سه مدل مورد استفاده.

افزایش، کاهش و افزایش پیدا می‌کند به طوری که برای همه مدل‌ها گذار ترکندگی رخ می‌دهد [۳۱].  
معادله مورد استفاده برای برازش، معادله اصلاح شده یانگ-لاپلاس به صورت زیر است [۳۲]:

$$\cos \theta_M = \frac{\gamma_{SG} - \gamma_{SL}}{\gamma_{LG}} - \frac{\tau}{r\gamma_{LV}}, \quad (4)$$

با تعریف طول تنش خطی به صورت  $\xi = -\frac{\tau}{\gamma_{LV}}$ ، به مطالعه وابستگی آن به دما می‌پردازیم. از آنجا که برای قطرات لنارد-جونز همیشه مقادیر کشش خطی منفی است، علامت منفی اضافه می‌شود تا اطمینان حاصل شود که همیشه طول تنش خطی مثبت باشد. در شکل ۵ نمودار طول تنش خطی به دمای کاهش یافته برای مدل‌های آب مورد مطالعه آمده است.

انحراف از قانون یانگ بسیار ناچیز، مطابق با مقیاس طول تنش خطی و شبیه به مقیاس اندازه مولکولی است و با کاهش مقدار زاویه تماس کم می‌شود. همان طور که انتظار داریم، طول تنش خطی نزدیک به دمای گذار ترکندگی به صفر میل می‌کند [۳۲].

#### ۴. نتیجه‌گیری

با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بستگی ترشوندگی یک سطح گرافیتی به دما، برای سه مدل آب مطالعه شده است. در هر دما، شدت ترشوندگی سطح گرافیتی با تخمین زاویه تماس قطره ماکروسکوپی برای نانو قطره‌های آب تعیین شد.

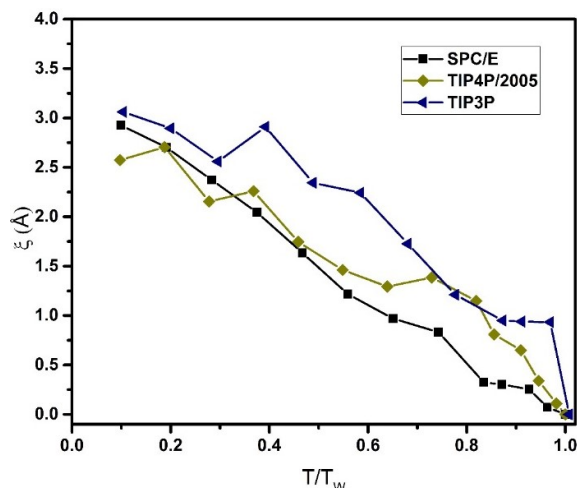
TIP4P/2005 به ترتیب برابر ۳۰۵، ۳۶۵ و ۳۶۷ درجه سانتی‌گراد است [۲۵]. شکل کلی منحنی‌ها و مقادیر تخمینی برای گذار ترکندگی مطابق با نتایج تجربی برای HOPG است [۱۷].

وابستگی کسینوس زاویه تماس به دما، برای همه مدل‌ها را می‌توان با معادله زیر مدل‌سازی کرد [۱۹]

$$\cos \theta_M = 1 + Constant \times \left(1 - \frac{T}{T_w}\right) / \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-1/26}, \quad (3)$$

عامل ثابت از طریق مقدار زاویه تماس در دمای ۲۷ درجه سانتی‌گراد به دست می‌آید. دمای گذار ترکندگی پیش‌بینی شده برای مدل‌های TIP3P، TIP4P/2005 و SPC/E به ترتیب برابر  $260 \pm 8$ ،  $272 \pm 11$  و  $277 \pm 9$  درجه سانتی‌گراد است. نمودارهای این معادله برای هر مدل در شکل ۳ آمده است.

در شکل ۴ نسبت مولکول‌های تبخیر شده، درون قطره و روی سطح برای سه مدل آب نشان داده شده است. با افزایش دما، تعداد مولکول‌های بخار در سیستم افزایش می‌یابد. بایستی توجه داشت که در زمان تبخیر، در حالی که برخی از مولکول‌های آب با افزایش دما از نانو قطره جدا می‌شوند، تعدادی از مولکول‌های تبخیر شده به نانو قطره باز می‌گردند. برای دمای کمتر از ۲۰۰ درجه سانتی‌گراد، نسبت مولکول‌ها کمی تغییر می‌کند ولی پس از آن، نسبت مولکول‌های تبخیر شده، نانو قطره و روی سطح با شدت بیشتری به ترتیب



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار طول تنش خطی به دمای کاهش یافته برای مدل‌های آب مورد مطالعه.

سانتی‌گراد، نسبت مولکول‌های تبخیر شده، نانو قطره و روی سطح با شدت کمتر و بالاتر از این دما با شدت بیشتری به ترتیب افزایش، کاهش و افزایش پیدا می‌کند. با مطالعه وابستگی طول تنش خطی به دما مشخص شد که انحراف از قانون یانگ بسیار ناچیز و در مقیاس اندازه مولکولی است و طول تنش خطی نزدیک به دمای گذار ترشوندگی به صفر میل می‌کند.

برای دمای کمتر از ۲۰۰ درجه سانتی‌گراد، زاویه تماس برای همه مدل‌ها به تدریج با افزایش دما بیشتر می‌شود ولی در دماهای بالاتر سرعت افزایش می‌یابد به طوری که گذار ترشوندگی از نوع اول رخ می‌دهد. شکل کلی منحنی‌ها و مقادیر تخمینی برای گذار ترشوندگی مطابق با نتایج تجربی است. با افزایش دما، تعداد مولکول‌های بخار در سیستم افزایش پیدا می‌کند. برای دمای کمتر از ۲۰۰ درجه

## مراجع

1. J Feng and Z Guo, *Nanoscale Horizons* **4** (2019) 339.
2. M A Shannon, P W Bohn, M Elimelech, J G Georgiadis, B J Marinas, and A M Mayes. *World Sci.* **10** (2010) 337.
3. M Elimelech and W A Phillip, *Science* **333** (2011) 712.
4. A Striolo, A Michaelides, and L Joly, *Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng.* **7** (2016) 553.
5. S Gravelle, H Yoshida, L Joly, C Ybert, and L Bocquet, *J. Chem. Phys.* **145** (2016) 124708.
6. J Rafiee, X Mi, H Gullapalli, A V Thomas, F Yavari, Y Shi, P M Ajayan, and N A Koratkar. *Nat. Mater.* **11** (2012) 217.
۷. ر آرام. مجله پژوهش فیزیک ایران **۱۶** (۱۳۹۵) ۱۹.
7. R Aram, *Iranian Journal of Physics Research* **16**, 1 (2016) 19.
۸. ح صالحی، م معدلی و پ امیری. مجله پژوهش فیزیک ایران **۱۵** (۱۳۹۴) ۳.
8. H Salehi, M Moaddeli, and P Amiri, *Iranian Journal of Physics Research*, **15**, 3 (2015) 19.
9. G Hummer, J C Rasaiah, and J P Noworyta, *Nat.* **414** (2001) 188.
1. F Ebrahimi and A Pischevar. *J. Phys. Chem. C.* **119** (2015) 28389.
2. F Ramazani and F Ebrahimi. *J. Phys. Chem. C.* **120** (2016) 12871.
3. F Ebrahimi F Ramazani and M Sahimi. *Sci. Rep.* **8** (2018) 7752.
4. M Sahimi and F Ebrahimi. *Phys. Rev. Lett.* **122** (2019) 214506.
5. M Ozmaian, A Fathizadeh, M Jalalvand, M R Ejtahadi and S M V Allaei. *Sci. Rep.* **6** (2016) 1.
6. J W Cahn. *J. Chem. Phys.* **66** (1977) 3667.
7. T Young, *Philos. T. R. Soc. A.* (1805) 65.
8. S R Friedman, M Khalil, and P Taborek. *Phys. Rev. Lett.* **111** (2013) 226101.
9. F Ebrahimi and M G Moghaddam. *Physica. A.* **453** (2016) 271.
10. M Napiórkowski and S Dietrich. *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015) 039601.

19. M Isaiev, S Burian, L Bulavin, M Gradeck, F Lemoine, and K Termentzidis, *Mol. Simul* **42** (2016) 910.
20. F Sedlmeier, J Janecek, C Sendner, L Bocquet, R R Netz and D Horinek. *Biointerphases* **3** (2008) FC23.
21. D Bonn, J Eggers, J Indekeu, J Meunier and E Rolley. *Rev. Mod. Phys* **81** (2009) 739.
22. H Zahedi and M Foroutan. *Appl. Surf. Sci.* **455** (2018) 789.
23. J H Weijjs, A Marchand, B Andreotti, D Lohse and J H Snoeijer. *Phys. Fluids* **23** (2011) 022001.
11. R C Dutta, S Khan and J K Singh. *Fluid Phase Equilib.* **302** (2011) 310.
12. C Melios, C E Giusca, V Panchal and O Kazakova. *2D Mater.* **5** (2018) 022001.
13. S Plimpton, *J Comput. Phys.* **117** (1995) 1.
14. R De Maesschalck, D Jouan-Rimbaud and D L Massart. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **50** (2000) 1.
15. M J De Ruijter, T Blake, and J De Coninck, *Lang.* **15** (1999) 7836.
16. C Vega and J L Abascal. *PCCP* **13** (2011) 19663.
17. F Leroy, S Liu, and J Zhang. *J. Phys. Chem.* **19** (2015) 28470.
- C Vega and E De Miguel, *J. Chem. Phys.* **126** (2007) 154707