# انتقال فازسیالات در نانوحفره‌ها

رفتار سیال در مواد دارای نانوحفره بطور قابل توجهی از سیال توده‌ای متفاوت است که به دلیل رقابت انرژی‌های سیال-سیال و سیال-دیواره می باشد. ساختار هندسی نانوحفره‌ها و نیروهای خارجی، در انتقال فاز و جابجایی ویژگی‌های ذوب و انجماد نقش ویژه‌ای دارند. مطالعه سیال درون نانوحفره‌ها به دلیل کاربردشان به عنوان مثال در نانوحسگرها اهمیت ویژه‌ای دارد. بنابراین آشنایی با تعادلات فازی، ساختار و ویژگی‌های انتقالی آن‌ها در تولید فناوری‌های نوین و اصلاح روش‌های موجود بسیار مورد توجه است.

مطالعه‌ی تجربی تغییر در ساختار نانوذرات و نانوسیم‌آهن درون نانولوله‌ی اکسیدآهن حین اکسیداسیون در محدوده دمایی ۸۷۳-۴۷۳ کلوین نشان می‌دهد که در مقایسه با خارج از نانولوله که انتقال فاز از مگنتیت به مگهمیت در دمای ۵۱۳ کلوین صورت می‌گیرد درون نانولوله در دماهای بیشتر از ۶۷۳ کلوین رخ می‌دهد [۱]. مطالعه‌ی تجربی نانوسیالات بسیار مشکل است به همین دلیل از شبیه سازی دینامیک مولکولی برای ایجاد برش مسطح روی زنجیر اصلی پلیمرهای بلوری مایع استفاده می‌شود که نشان می‌دهد انتقال فاز با تغییر ترتیب جهت‌گیری فاز بلوری مایع از حالت تصادفی به یکنواخت صورت می‌گیرد [۲].

پدیده‌ی انتقال فاز و هسته‌زایی خوشه‌های پتاسیم برمید درنانولوله‌های کربنی به فرم صندلی با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی نشان می‌دهد که حین سرد کردن تدریجی یا وارد کردن آب، نوع تازه‌ای از بلوری شدن خوشه‌های پتاسیم برمید مشاهده می‌شود [۳]. انتقال فاز درنانوذرات پتاسیم یدید درون نانولوله‌های کربنی صلب نیز به این روش نشان می‌دهد که ساختار نانوذرات پتاسیم یدید نسبت به طول نانوذرات و قطرلوله حساس است و شامل ساختارهای مکعبی مرکزوجوه‌پر و چندپوسته می‌شود [۴]. درون نانولوله‌ها دمای ذوب انتقالی آب در مقایسه با توده کاهش می‌یابد. شبیه سازی دینامیک مولکولی برای همزیستی یخ محصور شده و آب درون نانولوله نشان می‌دهد، یخ در نانولوله به شکل یخ هیبرید شامل مکعب‌های چسبیده بهم و لایه‌های هگزاگونال است و دمای ذوب آن به شعاع نانولوله وابسته است درحالیکه نسبت به تغییر جنس دیواره سطح نانولوله بی‌تفاوت است [۵]. انجماد کربن‌تتراکلرید لنارد-جونز درون نانولوله‌ی‌کربنی به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی نشان می‌دهد که شکل ماده جذب‌شده در لایه‌های مولکولی هم‌مرکز به بلورهای هگزاگونال شبه دوبعدی ناقص تبدیل می‌شود که بیانگر رفتار فازی جامد-سیال است [۶].

شبیه‌سازی مونت‌کارلوی کانونیکال روی حفره‌های استوانه‌ای نشان‌می‌دهد وقتیکه طول حفره محدود باشد به‌جای انتقال فاز مرتبه اول که در حفره‌های نامحدود اتفاق می‌افتد، انتقال مرتبه دوم پیوسته با تغییر شدید از یک حالت کم چگال به حالت چگال‌تر مشاهده می‌شود [۷]. انجماد یک سیال ساده درون نانوحفره‌ی‌کربنی بی‌نظم به‌روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بلوری‌شدن به صورت جزئی را نشان می‌دهد.


1. Nakamura, R.; Matsubayashi, G.; Tsuchiya, H.; Fujimoto, SH and Nakajima, H . *Japan ActaMaterialia* **2009**, 57 , 4261–4266
2. Yung, K. L.; He, L.; Xua, Y and Kong, *J. China Polymer* **2008**, 49 , 2770–2774
3. Yang, C.; Zhu, X.; Lu, X and Feng, X. *Journal of Molecular Structure:theochem* **2009**, 896 ,6–11
4. Wang, Y.; Shao, J and Zhu, X. *ChinaComputational and Theoretical Chemistry* **2012** , 983 , 38–44
5. Moore, E. B.; Allen, J. T and Molinero, V. *J Phys. Chem. C* **2012**, 116 , 7507−7514
6. Hung, F. R.; Coasne, B.;E. Santiso, E and E. Gubbins, K. *the Journal of Chemical Physics* **2005** , 122 , 144706
7. D.Wilms, W.; Virnau, P and Binder, K. *J. Chem. Phys* **2010** , 133 , 164702