



Molecular Dynamics Investigation of Coalescence-Induced Jumping of Ionic Nanodroplets under Pulsed and Oscillatory Electric Fields

Mojtaba Farrokhbin 

Department of Physics, Faculty of Nano and Bioscience and Technology, Persian Gulf University, Bushehr
7516913817, Iran

Received: 2026-06-02

Revised: 2026-07-10

Accepted: 2026-07-15

Abstract: Coalescence-induced droplet jumping plays a crucial role in heat transfer, dropwise condensation, and electrohydrodynamic systems. In this study, molecular dynamics simulations were performed to investigate the effects of pulsed and oscillatory electric fields on the coalescence and jumping behavior of saline nanodroplets. Two droplet configurations, namely symmetric saline-saline and asymmetric pure water-saline systems, were considered. The jumping height, droplet-substrate interaction energy, energy conversion efficiency, and dipole moment were analyzed to elucidate the underlying molecular mechanisms.

The results show that, for the symmetric saline-saline system with 4 nm radius nanodroplets, the pulsed electric field outperforms the oscillatory field, increasing the jumping height and the surface-to-kinetic energy conversion efficiency by 8.8482% and 8.4306%, respectively. In contrast, for the asymmetric pure water-saline system, the oscillatory electric field enhances the jumping height and energy conversion efficiency by 3.7885% and 10.8498%, respectively, compared with the pulsed field. Dipole moment analysis reveals that the pulsed electric field promotes stronger alignment of water molecular dipoles in both systems; however, the enhanced dipole alignment does not necessarily translate into improved jumping performance. These findings demonstrate that, in addition to the electric-field waveform, ionic distribution and system symmetry play decisive roles in governing post-coalescence energy transfer pathways. This study provides new molecular-level insights into the controlled manipulation of droplet dynamics in electrohydrodynamic systems.

Keywords: Wetting, Electric Field, Coalescence-Induced Nanodroplets Jumping, Molecular Dynamics

Corresponding Author. Email: m.farrokhbin@pgu.ac.ir

How to Cite This Article:

Farrokhbin M. Molecular Dynamics Investigation of Coalescence-Induced Jumping of Ionic Nanodroplets under Pulsed and Oscillatory Electric Fields. Nanomeghyas. 2026;():e738436 (In Persian). doi: 10.22034/ns.2026.2092370.1436



This is an open access article under the CC-BY license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

مطالعه دینامیک مولکولی جهش ناشی از هم‌جوشی نانوقطرات یونی تحت میدان‌های الکتریکی پالسی و متناوب

مجتبی فرخ بین  ID

گروه فیزیک، دانشکده علوم و فناوری نانو و زیستی، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر، ایران

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۵/۲۴

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۵/۰۴/۱۹

تاریخ دریافت: ۱۴۰۵/۰۳/۱۲

چکیده: هم‌جوشی و جهش خودبه‌خودی قطرات نقش مهمی در سامانه‌های انتقال حرارت، چگالش قطره‌ای و فرایندهای الکتروهیدرودینامیکی ایفا می‌کند. در این پژوهش، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، اثر میدان‌های الکتریکی پالسی و متناوب بر رفتار هم‌جوشی و جهش نانوقطرات حاوی نمک بررسی شد. دو آرایش مختلف شامل آب شور-آب شور و آب خالص-آب شور مورد مطالعه قرار گرفت و تغییرات ارتفاع جهش، انرژی برهم‌کنش قطره-زیرلایه، بازده تبدیل انرژی و گشتاور دوقطبی تحلیل شد.

نتایج نشان داد در سامانه متقارن شور-شور، برای نانوقطرات با شعاع ۴ نانومتر، میدان پالسی عملکرد جهش را نسبت به میدان متناوب بهبود می‌دهد؛ به طوری که ارتفاع جهش و بازده تبدیل انرژی سطحی به جنبشی به ترتیب ۸۴۸۲٪ و ۴۳۰۶٪ افزایش یافتند. در مقابل، در سامانه نامتقارن شور-آب خالص، میدان متناوب موجب افزایش ارتفاع جهش و بازده تبدیل انرژی به ترتیب ۲۷۸۸٪ و ۱۰۸۴۹٪ نسبت به میدان پالسی شد. تحلیل گشتاور دوقطبی نشان داد که میدان پالسی در هر دو سامانه باعث هم‌راستایی بیشتر ممان‌های دوقطبی مولکول‌های آب می‌شود، اما این افزایش هم‌راستایی لزوماً به بهبود عملکرد جهش منجر نمی‌شود. نتایج حاکی از آن است که علاوه بر شکل موج میدان الکتریکی، نحوه توزیع یون‌ها و تقارن یونی سامانه نیز نقش تعیین‌کننده‌ای در مسیرهای انتقال انرژی پس از هم‌جوشی دارند. این یافته‌ها دیدگاه مولکولی جدیدی برای کنترل دینامیک قطرات در سامانه‌های الکتروهیدرودینامیکی ارائه می‌کنند.

واژگان کلیدی: ترشوندگی، میدان الکتریکی، جهش ناشی از هم‌جوشی نانوقطرات، دینامیک مولکولی.

نویسنده مسئول: m.farokhbin@pgu.ac.ir

نحوه استناد به این مقاله: فرخ بین مجتبی. مطالعه دینامیک مولکولی جهش ناشی از هم‌جوشی نانوقطرات یونی تحت میدان‌های الکتریکی پالسی و متناوب. Nanomeghyas. 1405;():e738436. doi: 10.22034/ns.2026.2092370.1436

این مقاله تحت مجوز دسترسی آزاد CC-BY منتشر شده است (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)



۱- مقدمه

پویایی و رفتار قطرات آب در سال‌های اخیر به دلیل نقش کلیدی آن در بسیاری از فناوری‌های نوین، توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده است. پدیده‌های مرتبط با دینامیک قطرات در فناوری‌هایی نظیر سامانه‌های میکروسیالی [۱]، سامانه‌های الکتروستاتیکی آب‌زدایی [۲]، چگالش قطره‌ای [۳]، سطوح خودتمیزشونده [۴] و فناوری‌های ضدیخ‌زدگی [۵] به طور مستقیم بر کارایی این سیستم‌ها تأثیر گذارند. در میان ساز و کارهای مختلف مرتبط با رفتار قطرات، جهش ناشی از هم‌جوشی، به عنوان یکی از مکانیزم‌های کلیدی برای دفع خودبه‌خودی قطرات از سطح شناخته می‌شود. در این پدیده، کاهش انرژی سطحی آزادشده در هنگام ادغام دو قطره به انرژی جنبشی عمود بر سطح تبدیل می‌شود و در صورتی که این انرژی بر اتلافات ناشی از چسبندگی و ویسکوزیته غلبه کند، قطره می‌تواند از سطح جدا شود [۶]. این رفتار نخستین بار به صورت تجربی توسط Boreyko و همکاران گزارش شد [۶] و از آن زمان تاکنون به یکی از موضوعات مهم در علم سطوح و سیالات تبدیل شده است.

در مقیاس ماکروسکوپی، رفتار جهش قطرات عمدتاً با روابط اینرسی-موئینگی توصیف می‌شود، اما با کاهش اندازه قطرات تا مقیاس نانو، سازوکارهای اتلاف انرژی اهمیت بسیار بیشتری پیدا می‌کنند [۷-۸]. در این شرایط، اصطکاک خط تماس، اتلافات ویسکوز داخلی و برهم‌کنش قوی‌تر مایع با سطح می‌تواند بازده تبدیل انرژی سطحی به انرژی جنبشی را به طور محسوسی کاهش دهند [۷]. به همین دلیل، کنترل و تقویت جهش قطرات نانومتری به یکی از چالش‌های مهم در این حوزه تبدیل شده است. برای بهبود عملکرد جهش قطرات، روش‌هایی مانند مهندسی ساختار سطح [۹-۱۰]، کنترل سرعت اولیه قطرات [۱۱-۱۲] و تنظیم اندازه آن‌ها [۸] پیشنهاد شده است. با این حال، در مقیاس نانو، اتلافات داخلی و برهم‌کنش‌های مولکولی نقش تعیین‌کننده‌ای در بازده تبدیل انرژی دارند و کنترل فعال این فرآیند همچنان یک چالش مهم محسوب می‌شود.

در سال‌های اخیر، استفاده از میدان‌های خارجی، به ویژه میدان‌های الکتریکی، به عنوان روشی مؤثر برای کنترل رفتار قطرات مورد توجه قرار گرفته است [۱۳-۱۵]. میدان الکتریکی از طریق قطبی‌سازی مولکول‌های آب و ایجاد نیروهای الکتروستاتیکی بین قطرات، می‌تواند زمان لازم برای تشکیل پل مایع را کاهش داده و فرآیند هم‌جوشی را تسریع کند [۱۶]. علاوه بر این، تغییر شکل قطرات تحت میدان الکتریکی نیز نقش مهمی در دینامیک آن‌ها ایفا می‌کند؛ به طوری که قطرات نانومتری بسته به شدت میدان می‌توانند به اشکال بیضوی، اسفروئیدی یا ستونی تغییر شکل دهند [۱۷]. با این حال، مطالعات نشان داده‌اند که وقوع جهش تنها زمانی امکان‌پذیر است که شدت میدان از یک مقدار بحرانی فراتر رود [۱۸]. نزدیک این آستانه، تغییر شکل

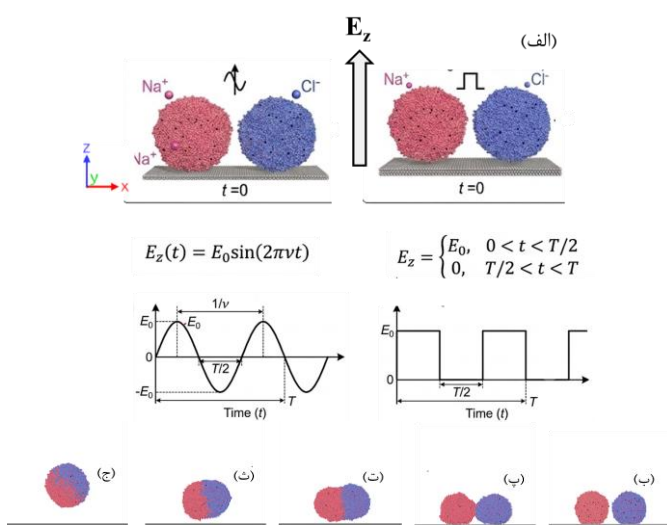
قطره و کاهش زاویه تماس موجب افزایش چسبندگی به سطح شده و می‌تواند مانع جهش شود [۱۸]. در سامانه‌های شور نیز حضور یون‌ها رفتار الکتروهیدرودینامیکی قطرات را پیچیده‌تر می‌کند. مهاجرت یونی، پوشش‌دهی الکترواستاتیکی و اثرات هیدراتاسیون می‌توانند قطبش مؤثر قطره را کاهش داده و بر دینامیک هم‌جوشی و جهش اثر بگذارند [۱۹-۲۱]. همچنین گزارش شده است که در میدان‌های نوسانی، افزایش فرکانس میدان می‌تواند زمان تماس قطرات را کاهش داده و آستانه بحرانی هم‌جوشی را تغییر دهد [۲۲]. از آنجا که در مقیاس نانو نسبت نیروهای مؤثر بر قطره به شدت تغییر می‌کند، توصیف دقیق برهم‌کنش میان نیروهای موئینگی، میدان الکتریکی و اتلافات داخلی با استفاده از مدل‌های پیوسته با محدودیت‌هایی همراه است [۲۳]. در چنین شرایطی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) به ابزاری قدرتمند برای مطالعه رفتار اتمی و مولکولی قطرات تبدیل شده است [۲۴-۲۶]. این روش امکان بررسی مستقیم اثر ترشوندگی سطح، غلظت یونی و میدان‌های خارجی را بدون فرضیات پیوستاری فراهم می‌کند. مطالعات دینامیک مولکولی نشان داده‌اند که موفقیت جهش قطرات نانومتری به میزان کار چسبندگی بین مولکول‌های آب و سطح وابسته است و این موضوع به شدت تحت تأثیر آب‌گریزی سطح و سازوکارهای اتلاف انرژی در مقیاس مولکولی قرار دارد [۲۷]. اگرچه مطالعات متعددی اثر میدان‌های الکتریکی ثابت و متناوب را بر هم‌جوشی و جهش قطرات بررسی کرده‌اند، اما مقایسه مستقیم میان میدان‌های پالسی و متناوب در سامانه‌های یونی هنوز محدود است. گزارش شده است که میدان‌های پالسی می‌توانند با قطع موقت اثر میدان الکتریکی در مراحل بحرانی رشد پل مایع، بازده تبدیل انرژی را نسبت به میدان‌های ثابت افزایش دهند [۲۸]. همچنین نشان داده شده است که انتخاب مناسب عرض پالس و زمان‌بندی اعمال میدان می‌تواند منجر به افزایش ارتفاع و فرکانس جهش قطرات شود [۱۸]. مطالعات اخیر نشان داده‌اند که میدان‌های الکتریکی پالسی و متناوب می‌توانند با تغییر شکل قطرات و کنترل فرآیند هم‌جوشی، رفتار جهش ناشی از ادغام قطرات آب خالص را بهبود دهند. با این حال، این مطالعات عمدتاً بر سامانه‌های بدون یون متمرکز بوده‌اند و اثرات ناشی از حضور گونه‌های یونی، شامل تغییر در میزان هم‌راستایی ممان‌های دو قطبی مولکولی قطره و رقابت میان نیروهای الکتروستاتیکی و اتلافات انرژی، همچنان به طور کامل شناخته نشده است. به ویژه، مشخص نیست که آیا پاسخ قطرات یونی به شکل موج میدان الکتریکی مشابه قطرات آب خالص است یا اینکه تقارن یونی و برهم‌کنش‌های ناشی از حضور نمک می‌توانند مسیر تبدیل انرژی سطحی به جنبشی و عملکرد جهش را تغییر دهند. بنابراین، هدف اصلی این پژوهش آن است که چگونه شکل موج میدان الکتریکی و تقارن یونی قطرات، مکانیسم انتقال انرژی و دینامیک جهش ناشی از هم‌جوشی نانوقطرات را تحت تأثیر قرار می‌دهند.

زمانی تعریف می‌شود که قطره به صورت پایدار از سطح فاصله گرفته، مرکز جرم آن در راستای عمودی شروع به افزایش کند و برهم کنش مستقیم میان قطره و زیرلایه به حداقل برسد. این معیارها امکان تعیین دقیق زمان آغاز هم‌جوشی و مرحله جهش قطره را فراهم می‌کنند. شعاع قطرات در شبیه‌سازی‌ها برابر با ۴۰ آنگستروم در نظر گرفته شده است. همچنین برای بررسی اثر یون‌ها بر پدیده جهش القا شده نانوقطرات، آرایش‌های مختلفی از قرارگیری قطرات طراحی شده است. به منظور بررسی اثر ترکیب قطرات، دو نوع آرایش مختلف مورد مطالعه قرار گرفت: (الف) دو قطره آب شور و (ب) یک قطره آب خالص و یک قطره آب شور. غلظت نمک NaCl برای قطرات شور، ۴۰ گرم بر لیتر تعیین شده است.

۲- روش محاسباتی

در این پژوهش، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار LAMMPS به منظور بررسی رفتار هم‌جوشی و جهش القا شده نانوقطرات بر روی سطح آبگریز تحت میدان‌های الکتریکی متفاوت نوسانی و پالسی انجام شد. در ساختار اولیه سامانه، دو نانوقطره کروی یکسان در فاصله مشخصی از یکدیگر و در بالای یک زیرلایه کربنی تخت قرار داده شدند، به گونه‌ای که فاصله مرکز تا مرکز قطرات برابر با ۹۰ آنگستروم است. قطرات شور با مولالیت NaCl برابر با ۰.۷ mol/kg آب آماده شدند. تعداد یون‌های Na^+ و Cl^- متناسب با مقدار آب موجود در هر قطره تعیین و به سامانه اضافه شد. هر قطره شور دارای ۸۷۲۵ مولکول آب، ۱۱۰ یون Na^+ و ۱۱۰ یون Cl^- است که متناظر با غلظت ۰.۷ mol/kg خواهد بود. جعبه شبیه‌سازی دارای ابعاد $300 \times 200 \times 800 \text{ \AA}^3$ در راستاهای x ، y و z است. زیرلایه گرافنی با ابعاد $300 \times 200 \text{ \AA}^2$ در پایین جعبه شبیه‌سازی قرار داده شده و راستای عمودی سطح آن در جهت z است. همچنین ارتفاع ۸۰ نانومتری جعبه، ناحیه خلأ کافی را در بالای زیرلایه فراهم می‌کند تا حرکت آزاد قطره پس از جهش بدون اثرگذاری مرز بالایی امکان‌پذیر باشد.

در شکل ۱ مراحل مختلف برای جهش القا شده نانوقطرات روی سطح نمایش داده شده است. برای این پدیده، پنج مرحله مختلف وجود دارد. در مرحله اول دو قطره مجاور شروع به نزدیک شدن به یکدیگر می‌کنند. در مرحله بعد، پل اتصالی بین دو قطره شکل می‌گیرد. سپس، دو قطره ادغام می‌شوند. در مرحله بعد، برهم کنش بین قطره ادغام شده و سطح زیرلایه کاهش می‌یابد و قطره شروع به جدا شدن از سطح می‌کند. در مرحله نهایی، قطره ادغام شده، از سطح جدا می‌شود. آغاز فرآیند هم‌جوشی قطرات بر اساس تشکیل یک پل مایع پیوسته بین دو قطره تعیین می‌شود. به طور مشخص، لحظه‌ای که اتصال پایدار مولکول‌های آب بین دو سطح آزاد قطرات ایجاد شده و یک ناحیه پیوسته مایع میان آن‌ها شکل می‌گیرد، به عنوان زمان شروع تشکیل پل مایع در نظر گرفته شده است. همچنین، جدایش قطره از زیرلایه



شکل ۱. (الف) شکل شماتیک نحوه قرارگیری اولیه قطرات و جهت میدان الکتریکی اعمالی. (ب) - (ج) تصاویر لحظه‌ای از مراحل مختلف جهش القا شده بر اثر هم‌جوشی دو نانوقطره روی سطح آب‌گریز: (ب) نزدیک شدن قطرات، (پ) تشکیل پل مایع، (ت) ادغام کامل قطرات، (ث) آغاز جدایش قطره ادغام شده از سطح و (ج) جهش کامل قطره از زیرلایه.

برای مدل بندی مولکول‌های آب، از مدل توسعه یافته SPC/E استفاده شده است. برهم کنش‌های کوتاه‌برد واندروالسی و کولنی بین مولکول‌های آب تا فاصله برش $12 \text{ \AA}$ در نظر گرفته شد. در حالی که برهم کنش‌های الکترواستاتیکی بین گونه‌های باردار به کمک روش PPPM^۱ محاسبه شدند [۲۹]. برهم کنش بین اتم‌های اکسیژن آب و یون‌ها با اتم‌های کربن زیرلایه از طریق پتانسیل ۶-۱۲ لارد-جونز رابطه زیر مدل سازی شد:

$$E_{LJ} = 4\epsilon_{ls} \left[\left(\frac{\sigma_{ls}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ls}}{r} \right)^6 \right], r < r_c \quad (1)$$

که در آن، ϵ_{LS} عمق چاه پتانسیل و σ_{LS} فاصله مشخصه‌ای است که در آن مقدار پتانسیل صفر می‌شود و 2σ فاصله بین ذرات را نشان می‌دهد. فاصله‌ی برش برای این پتانسیل برابر با $12 \text{ \AA}$ در نظر گرفته شد. مقادیر ضرایب پتانسیل لنارد-جونز برای اتم‌های مختلف در جدول ۱ آمده است. ترشوندگی سطح از طریق تنظیم شدت برهم‌کنش جامد-مایع کنترل شد؛ به‌طوری‌که با کاهش پارامتر انرژی لنارد-جونز برای کربن به میزان $1/80$ ، میزان آب‌گریزی سطح افزایش یافت. کاهش این پارامتر موجب تضعیف برهم‌کنش چسبندگی بین قطره و سطح شده و شرایط مناسب برای مطالعه جهش قطرات بر روی سطوح آب‌گریز را فراهم می‌کند. پارامترهای برهم‌کنش میان اتم‌های مختلف با استفاده از قوانین اختلاط Lorentz-Berthelot تعیین شدند. مقادیر کامل پارامترهای میدان نیرو برای مولکول‌های آب، یون‌ها و اتم‌های کربن در جدول ۱ ارائه شده است.

جدول ۱. پارامترهای مورد استفاده در پتانسیل لنارد-جونز [۳۰].

Atom	LJ Parameters		q (e)
	ϵ (eV)	σ (Å)	
H	0.0	0.0	0.4238
O	0.00673	3.166	-0.8476
Na ⁺	0.00563	2.35	+1.0
Cl ⁻¹	0.00433	4.45	-1.0
C	0.0006704	3.214	0.0

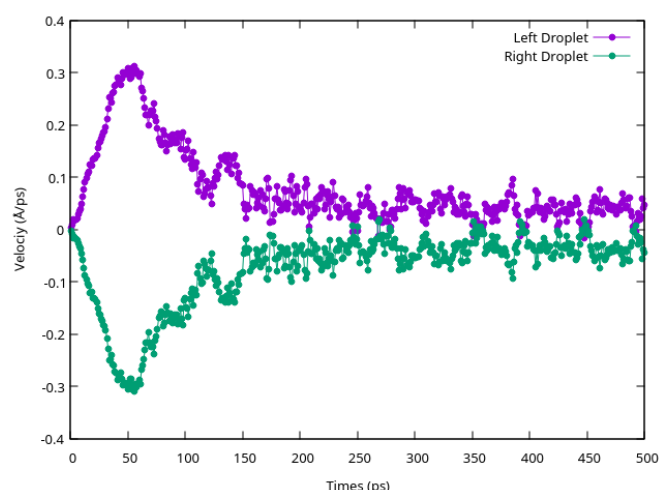
در مرحله تعادل‌سازی اولیه، دمای سیستم به صورت تدریجی از ۱ تا ۳۰۰ کلون طی مدت ۵۰۰ پیکوثانیه افزایش داده شد تا ساختار مولکولی قطرات و توزیع انرژی حرارتی به شرایط پایدار برسد. برای جلوگیری از هم‌جوشی ناخواسته در طول تعادل‌سازی اولیه، مؤلفه‌های مومنتوم انتقالی هر قطره در راستاهای جانبی حذف شد. پس از پایان مرحله تعادل‌سازی، قیود اعمال‌شده حذف شدند و قطرات اجازه یافتند تحت اثر نیروهای بین‌مولکولی و میدان الکتریکی اعمالی به‌صورت خودبه‌خودی هم‌جوشی کرده و فرایند جهش را آغاز کنند. در این مرحله، شبیه‌سازی‌ها در آنسامبل کانونی (NVT) و در دمای ثابت ۳۰۰ کلون انجام شدند. کنترل دما به‌وسیله ترموستات Nosé-Hoover اعمال شد [۲۹]. معادلات حرکت با استفاده از الگوریتم velocity-Verlet و با گام زمانی ۱ فمتوثانیه انتگرال‌گیری شدند. زمان

کل هر شبیه‌سازی برابر با ۵۰۰ پیکوثانیه بود. همچنین، شرایط مرزی تناوبی در هر سه راستای فضایی اعمال گردید. برای حفظ پایداری ساختار زیرلایه و حذف اثرات ناشی از تغییر شکل مکانیکی آن، تمامی اتم‌های کربن در طول شبیه‌سازی ثابت نگه داشته شدند. این تقریب موجب حذف انتقال فونون و اتلاف تکانه در داخل زیرلایه می‌شود؛ با این حال، از آنجا که هدف این مطالعه مقایسه نسبی اثر شکل موج میدان الکتریکی و آرایش یونی بر دینامیک هم‌جوشی و جهش قطرات است، استفاده از زیرلایه صلب برای تمامی شبیه‌سازی‌ها به‌صورت یکسان انجام شد. بنابراین انتظار می‌رود این تقریب تنها بر مقادیر مطلق کمیت‌ها اثر بگذارد و نتیجه‌گیری‌های مقایسه‌ای این پژوهش را تغییر ندهد. به منظور بررسی تکرارپذیری رفتار جهش، چند شبیه‌سازی مستقل با توزیع‌های اولیه سرعت متفاوت انجام شد و ارتفاع جهش قطره مورد تحلیل قرار گرفت. ضریب تغییرات ارتفاع مرکز جرم برابر با 3.52% محاسبه شد که نشان‌دهنده پراکندگی محدود نتایج و وابستگی کم آن‌ها به شرایط اولیه است. سایر کمیت‌های دینامیکی ارائه‌شده از مسیر زمانی شبیه‌سازی منفرد استخراج شده و با استفاده از میانگین‌گیری زمانی هر ۱۰۰ فمتوثانیه ثبت و میانگین آن‌ها در بازه‌های زمانی ۱۰۰۰ فمتوثانیه محاسبه شد.

برای ارزیابی تاثیر میدان الکتریکی خارجی، دو نوع میدان مختلف به صورت های پالسی و تناوبی بررسی شده است. میدان الکتریکی نوسانی خارجی به‌صورت $E(t) = E_0 \sin(2\pi\theta t)$ در راستای محور Z عمود بر زیرلایه و قطره اعمال شده است که در آن E_0 دامنه میدان برابر با ۰.۳ ولت بر آنگستروم و فرکانس میدان الکتریکی اعمالی برابر با ۱۰۰ گیگاهرتز است. اگرچه شدت و فرکانس میدان الکتریکی اعمال شده از مقادیر معمول در مقیاس ماکروسکوپی بزرگ‌تر است، استفاده از چنین میدان‌هایی در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی سامانه‌های نانومقیاس، به‌منظور ایجاد پاسخ قابل مشاهده در بازه زمانی محدود شبیه‌سازی، متداول است. بنابراین، نتایج این مطالعه در چارچوب مدل غیرواکتشی SPC/E و شرایط شبیه‌سازی حاضر تفسیر می‌شوند و نماینده مستقیم شرایط فرکانسی سامانه‌های ماکروسکوپی الکترویدرودینامیکی نیست. میدان الکتریکی پالسی در این مطالعه به‌صورت یک موج مربعی با دامنه مشابه اعمال شد. دوره تناوب میدان ۱۰ پیکوثانیه بود که در هر دوره، میدان به مدت ۵ پیکوثانیه فعال و به مدت ۵ پیکوثانیه غیرفعال است؛ بنابراین عرض پالس ۵ پیکوثانیه و چرخه وظیفه ۱ برابر ۵۰٪ است. برای مقایسه مستقیم اثر شکل موج میدان، دوره تناوب میدان پالسی با میدان متناوب یکسان انتخاب شد و تنها شکل موج میدان بین حالت‌های پالسی و سینوسی تغییر کرد. این مقایسه امکان بررسی اثر میدان بر فرایند هم‌جوشی، توزیع یونی، تغییر شکل قطرات و رفتار جهش پس از ادغام را فراهم می‌سازد. در مجموع، این چارچوب شبیه‌سازی امکان مطالعه نظام‌مند تأثیر ترکیب قطرات با آرایش مختلف یونی، اثر میدان الکتریکی خارجی مختلف بر دینامیک هم‌جوشی و جداسدن نانوقطرات را در مقیاس مولکولی فراهم می‌کند.

۳- نتایج و بحث

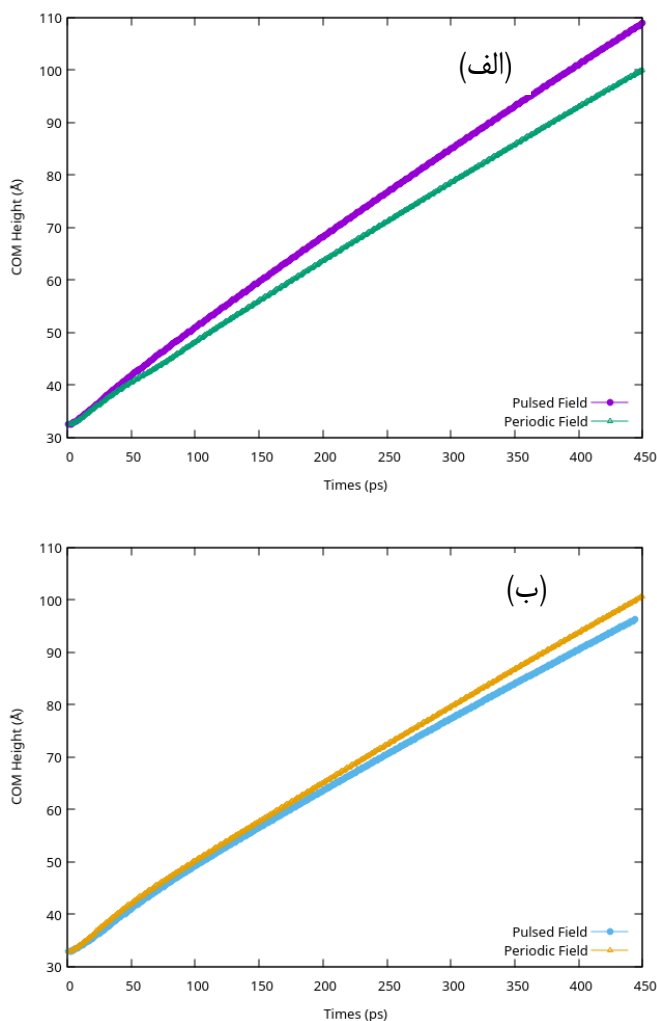
به منظور بررسی رفتار هم‌جوشی قطرات با آرایش یونی مختلف تحت میدان الکتریکی خارجی، ابتدا مؤلفه افقی سرعت قطرات v_x در طول فرایند هم‌جوشی مورد تحلیل قرار می‌دهیم. شکل ۲ تغییرات v_x را برای دو قطره شور با غلظت مولالیت ۰٫۷، تحت میدان الکتریکی پالسی نشان می‌دهد.



شکل ۲. مؤلفه افقی سرعت قطرات روی زیر لایه. مشاهده می‌شود که دو قطره با گذشت زمان در حال نزدیک شدن به یکدیگر و ادغام می‌باشند.

در مراحل ابتدایی شبیه‌سازی، قطرات تقریباً بدون حرکت باقی می‌مانند، اما با نزدیک شدن تدریجی به یکدیگر، سرعت افقی افزایش یافته و در حدود $t \approx 160 \text{ ps}$ آغاز تشکیل پل مایع میان دو قطره مشاهده می‌شود. این زمان را می‌توان به عنوان نقطه شروع هم‌جوشی در نظر گرفت. پس از تشکیل پل مایع، سرعت نسبی قطرات به سرعت کاهش یافته و سامانه وارد مرحله بازآرایی ساختار و آزادسازی انرژی سطحی می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که اگرچه فرایند هم‌جوشی در حدود ۱۶۰ پیکوثانیه آغاز می‌شود، اما نوسانات بعدی قطره ادغام‌شده، بازتوزیع یون‌ها، تغییرات انرژی بین‌سطحی و جهش نهایی تا چند صد پیکوثانیه ادامه پیدا می‌کند. از این رو انتخاب زمان شبیه‌سازی 500 ps برای بررسی مراحل مختلف شامل هم‌جوشی، جداسدن از سطح، نوسانات پس از جهش و تحول قطبش مولکولی مناسب خواهد بود. همچنین، بررسی مسیرهای شبیه‌سازی طولانی‌تر نشان داد که پس از جهش اولیه، رخداد جدیدی مانند هم‌جوشی مجدد قطره مشاهده نشده و رفتار کلی سامانه بدون تغییر کیفی باقی می‌ماند.

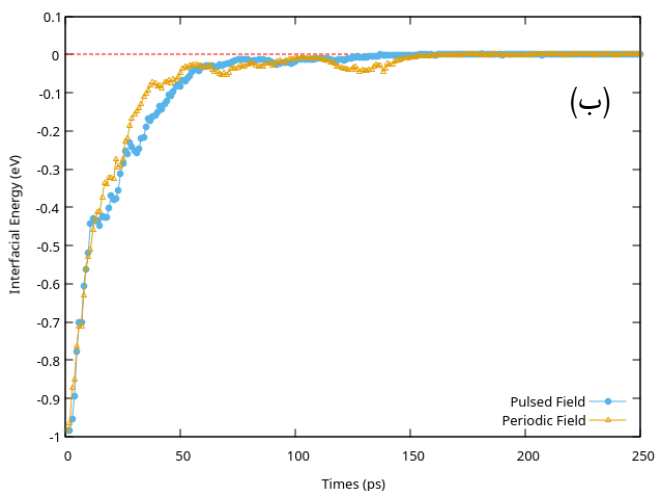
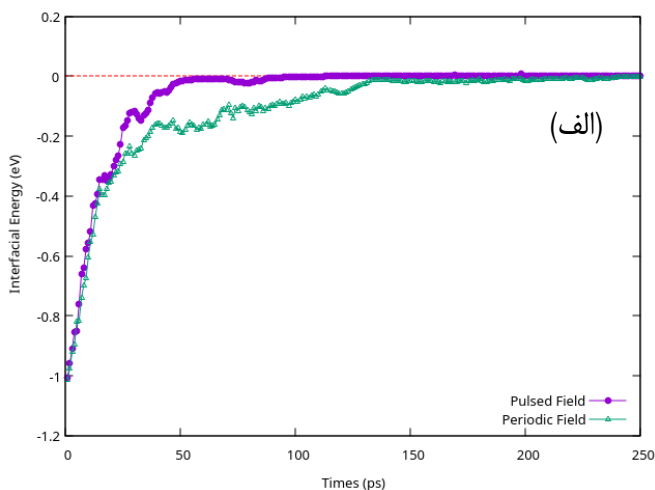
به منظور ارزیابی اثر شکل موج میدان الکتریکی بر دینامیک جهش، تغییرات ارتفاع مرکز جرم قطره ادغام‌شده در طول زمان تحت میدان‌های الکتریکی متناوب و پالسی در شکل ۳ مورد بررسی قرار گرفت.



شکل ۳. تغییرات ارتفاع مرکز جرم قطره ادغام شده تحت میدان‌های الکتریکی پالسی و متناوب: (الف) سامانه شور-شور، (ب) سامانه شور-آب خالص.

نتایج مربوط به سامانه شور-شور در شکل ۳ (الف) ارائه شده است. مشاهده می‌شود که در حضور میدان پالسی، مرکز جرم قطره پس از هم‌جوشی با سرعت بیشتری از سطح فاصله گرفته و ارتفاع بیشتری نسبت به حالت میدان متناوب به دست می‌آورد. در این شرایط با تغییر میدان از تناوبی به میدان پالسی، انتظار می‌رود ارتفاع جهش قطره ۸٫۸۴۸۲٪ افزایش یابد. از آنجا که افزایش ارتفاع مرکز جرم بیانگر موفقیت بیشتر قطره در غلبه بر نیروهای چسبندگی و تبدیل مؤثر انرژی آزاد شده در هنگام هم‌جوشی به حرکت عمودی است، این نتیجه نشان می‌دهد که میدان پالسی شرایط مناسب‌تری برای وقوع جهش فراهم می‌کند. در واقع، ادغام دو قطره موجب کاهش ناگهانی در انرژی سطحی قطرات می‌شود و در حضور میدان پالسی، بخش بزرگ‌تری از انرژی آزادشده در اثر هم‌جوشی به نظر می‌رسد در راستای حرکت عمودی قطره مورد استفاده قرار گیرد. در مقابل، برای سامانه شور-آب خالص رفتار متفاوتی مشاهده می‌شود (شکل ۳ (ب)). برخلاف سامانه شور-شور، در این حالت بیشترین ارتفاع مرکز جرم در حضور میدان متناوب حاصل می‌شود، در حالی که میدان

پالسی نشان می‌دهد که نیروهای موئینگی و انرژی آزادشده در اثر هم‌جوشی در مدت کوتاه‌تری بر نیروهای چسبندگی غلبه می‌کنند. این رفتار نشان می‌دهد که میدان پالسی علاوه بر افزایش هم‌راستایی ممان‌های دوقطبی مولکولی قطره، احتمالاً موجب تسریع آزادسازی انرژی موئینگی در پل مایع می‌شود. در نتیجه سهم بیشتری از انرژی موئینگی صرف غلبه بر کار چسبندگی شده و فرآیند جداسازی قطره از سطح با سرعت بیشتری انجام می‌گیرد. همچنین شکل ۴ (ب)، برای آرایش قرارگیری قطرات شور-آب خالص نشان می‌دهد که هر دو میدان تقریباً زمان مشابهی را برای رسیدن انرژی بین‌سطحی به صفر خواهند داشت. با این حال، در میدان متناوب نوساناتی پیرامون مقدار صفر مشاهده می‌شود. این نوسانات ممکن است با بازآرایی یون‌ها و پاسخ متفاوت دو قطره به میدان خارجی مرتبط باشد که منجر به نوسانات متناوب نیروهای بین‌سطحی می‌شود.



شکل ۴. انرژی برهم کنشی قطرات و زیرلایه در حضور میدان های الکتریکی پالسی و متناوب برای آرایش (الف) قطرات شور-آب و (ب) شور-آب خالص.

پالسی منجر به ارتفاع‌های کمتری می‌گردد. این تفاوت را می‌توان به ماهیت نامتقارن سامانه نسبت داد. در آرایش شور-آب خالص، تنها یکی از قطرات حاوی یون است و در نتیجه توزیع بار و پاسخ الکترواستاتیکی دو قطره پیش از هم‌جوشی یکسان نیست. در چنین شرایطی، اعمال میدان پالسی احتمالاً موجب ایجاد نواحی با قطبش موضعی قوی‌تر و ناهمگنی بیشتر در توزیع بار می‌شود. در نتیجه بخشی از انرژی آزاد شده در هنگام هم‌جوشی به جای مشارکت در حرکت انتقالی قطره، می‌تواند به بازآرایی متفاوت یون‌ها و افزایش نوسانات داخلی سامانه مرتبط باشد. در مقابل، میدان متناوب نیز ممکن است از ایجاد تجمع‌های پایدار بار جلوگیری کرده و توزیع یکنواخت‌تری از تنش‌های الکترواستاتیکی ایجاد کند. این امر امکان بهره‌برداری مؤثرتر از انرژی موئینگی آزادشده را فراهم کرده و در نهایت به افزایش ارتفاع جهش قطره منجر می‌شود. به منظور ارزیابی نقش واقعی میدان الکتریکی خارجی، در شرایط بدون اعمال میدان نیز شبیه‌سازی انجام شد. مقایسه نتایج نشان داد که پاسخ قطرات به اعمال میدان الکتریکی به نوع آرایش یونی سامانه وابسته است. در سامانه شور-شور، اعمال میدان‌های پالسی و متناوب موجب افزایش ارتفاع جهش نسبت به حالت بدون میدان شد، به‌طوری‌که بیشترین ارتفاع در حضور میدان پالسی مشاهده گردید. در مقابل، در سامانه شور-آب خالص، ارتفاع جهش در حالت بدون میدان بیشترین مقدار را نشان داد و اعمال میدان متناوب و پالسی به ترتیب موجب کاهش ارتفاع جهش شدند. این رفتار متفاوت نشان می‌دهد که اثر میدان الکتریکی خارجی تنها به افزایش هم‌راستایی ممان‌های دوقطبی مولکولی سامانه محدود نمی‌شود، بلکه احتمالاً ویژگی‌های ساختاری و میزان تقارن یونی سامانه بر مسیر انتقال انرژی اثرگذار هستند.

برای درک بهتر سازوکار جهش، تغییرات انرژی برهم‌کنش قطره-زیرلایه در طول فرایند بررسی شد. این کمیت بیانگر شدت برهم‌کنش بین قطره و سطح زیرلایه است و کاهش آن به سمت صفر نشان‌دهنده کاهش تماس مؤثر و در نهایت جدا شدن کامل قطره از زیرلایه می‌باشد. انرژی برهم‌کنش میان قطره و زیرلایه از طریق محاسبه مجموع برهم‌کنش‌های بین مولکولی میان اتم‌های تشکیل‌دهنده قطره و اتم‌های زیرلایه به دست آمده است. این انرژی شامل سهم برهم‌کنش‌های واندروالس و کولنی میان دو بخش سامانه بوده و برای بررسی تغییرات نیروی چسبندگی قطره به زیرلایه در طول فرایند جهش مورد استفاده قرار گرفت. مقادیر گزارش‌شده از میانگین‌گیری زمانی انرژی برهم‌کنش در مسیر شبیه‌سازی به دست آمدند. شکل ۴ (الف)، تغییرات انرژی برهم‌کنش بین قطره و سطح زیرلایه را برای آرایش قطرات شور-آب نشان می‌دهد. در حضور میدان پالسی، انرژی بین‌سطحی با شیب تندتری افزایش یافته و در حدود 50 ps به صفر می‌رسد. در مقابل، برای میدان متناوب تقریباً 130 ps زمان لازم است تا انرژی برهم‌کنشی به صفر نزدیک شود. این اختلاف زمانی بیانگر آن است که میدان پالسی فرایند جدا شدن قطره از سطح را به طور قابل توجهی تسریع می‌کند. در واقع، افزایش هم‌راستایی ممان‌های دوقطبی مولکولی قطره در میدان پالسی می‌تواند باعث تقویت نیروهای داخلی مرتبط با بازگشت شکل قطره و غلبه سریع‌تر بر نیروهای برهم‌کنشی سطح شود. رسیدن سریع‌تر انرژی برهم‌کنشی به صفر در میدان

خواهد بود. در این شکل با اعمال الکتریکی خارجی متناوب بر آرایش قطره شور-آب خالص، بازده تبدیل انرژی بالاتری در مقایسه با میدان الکتریکی پالسی مشاهده می‌شود. رفتار مشاهده شده برای سامانه شور-آب خالص با نتایج سرعت جهش نیز سازگار است. همان گونه که در شکل ۵ (ب)، مشاهده می‌شود، میدان متناوب بازده تبدیل انرژی بزرگ‌تری نسبت به میدان پالسی (تقریباً ۸۴۹۸٪) ایجاد می‌کند. این نتیجه نشان می‌دهد که افزایش هم‌راستایی ممان‌های دوقطبی مولکولی لزوماً به معنای افزایش بازده تبدیل انرژی نیست. در سامانه‌های نامتقارن، بخشی از انرژی مرتبط با هم‌راستایی ممان‌های دوقطبی مولکولی ممکن است در نوسانات داخلی قطره و تغییر شکل‌های موضعی مصرف شود. بنابراین اگرچه میدان پالسی هم‌راستایی ممان‌های دوقطبی مولکولی قوی‌تری ایجاد می‌کند، اما تمام این انرژی در جهت حرکت عمودی قطره مورد استفاده قرار نمی‌گیرد. در مقابل، میدان متناوب می‌تواند شرایط مناسب‌تری برای توزیع یکنواخت‌تر تنش‌های الکترواستاتیکی فراهم کند. بنابراین، نتایج بازده تبدیل انرژی با رفتار حرکت مرکز جرم و انرژی برهم‌کنشی سازگاری مناسبی دارند. در سامانه متقارن شور-شور، میدان پالسی با افزایش هم‌راستایی ممان‌های دوقطبی مولکولی و تسریع جداسدن قطره از سطح، بازده تبدیل انرژی بزرگ‌تری ایجاد می‌کند. در مقابل، در سامانه نامتقارن شور-آب خالص، میدان متناوب عملکرد بهتری از خود نشان می‌دهد. این موضوع بیانگر آن است که کارایی تبدیل انرژی تنها به شدت قطبش وابسته نیست، بلکه نحوه توزیع یون‌ها و مکانیسم‌های احتمالی ائتلاف انرژی در داخل قطره نیز نقش تعیین‌کننده‌ای در فرآیند جهش ایفا می‌کنند. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که بازده تبدیل انرژی در مقیاس نانو معمولاً بسیار کمتر از مقیاس میکروسکوپی است، زیرا بخش عمده انرژی سطحی در اثر اتلافات ویسکوز و گرادیان‌های سرعت داخلی از بین می‌رود [۷، ۲۸]. بنابراین حتی افزایش‌های نسبتاً کوچک در بازده تبدیل انرژی می‌تواند نشان‌دهنده تغییرات قابل توجه در سازوکار انتقال انرژی در مقیاس مولکولی باشد.

برای ارزیابی عملکرد جهش القا شده، کمیت بازده تبدیل انرژی، η ، را تعریف می‌کنیم. در این مطالعه، η به‌عنوان یک شاخص مقایسه‌ای برای ارزیابی میزان تبدیل انرژی موئینگی آزاد شده به انرژی جنبشی انتقالی قطره ادغام شده تعریف شده است و نباید به‌عنوان یک بازده ترمودینامیکی مبتنی بر بقای کامل انرژی تفسیر شود. از آنجا که شبیه‌سازی‌ها در آنسامبل NVT و با استفاده از ترموستات Nosé-Hoover انجام شده‌اند، این کمیت صرفاً برای مقایسه نسبی عملکرد سامانه‌ها تحت شرایط مختلف مورد استفاده قرار می‌گیرد. لذا نسبت انرژی جنبشی جهش به انرژی سطحی آزاد شده در طی هم‌جوشی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم [۳۱]:

$$\eta = \frac{E_k}{E_{surf}}, \quad (2)$$

که در آن E_k انرژی جنبشی جهش قطره ادغام شده و E_{surf} انرژی سطحی آزاد شده در طول فرایند هم‌جوشی است. برای دو قطره هم‌اندازه، انرژی سطحی آزاد شده از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۳۲]:

$$E_{surf} = 4\pi\sigma_l R^2 [2 - 2^{2/3}], \quad (3)$$

که در آن R شعاع اولیه قطرات و σ_l کشش سطحی مایع است. در محاسبه انرژی سطحی آزاد شده، از مقادیر مؤثر کشش سطحی متناظر با ترکیب هر سامانه استفاده شد؛ به‌طوری که مقادیر ۷۶٫۵ و ۷۴٫۶۵ میلی نیوتن بر متر به ترتیب برای سامانه‌های شور-شور و آب خالص-شور در نظر گرفته شدند. اگرچه در مقیاس نانو کشش سطحی می‌تواند تحت تأثیر عواملی مانند انحنا، سطح، ساختار مولکولی فصل مشترک، بازآرایی یون‌ها و میدان الکتریکی اعمال شده تغییر کند، در این مطالعه رابطه کلاسیک انرژی سطحی به‌عنوان یک تقریب مؤثر برای مقایسه نسبی تبدیل انرژی میان سامانه‌های مختلف استفاده شده است.

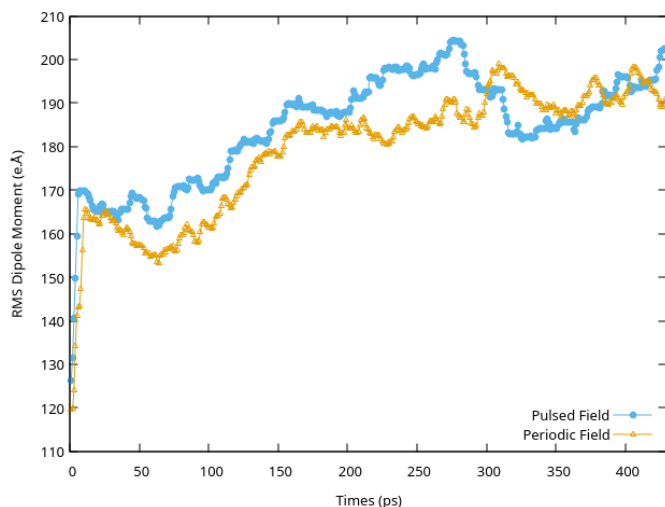
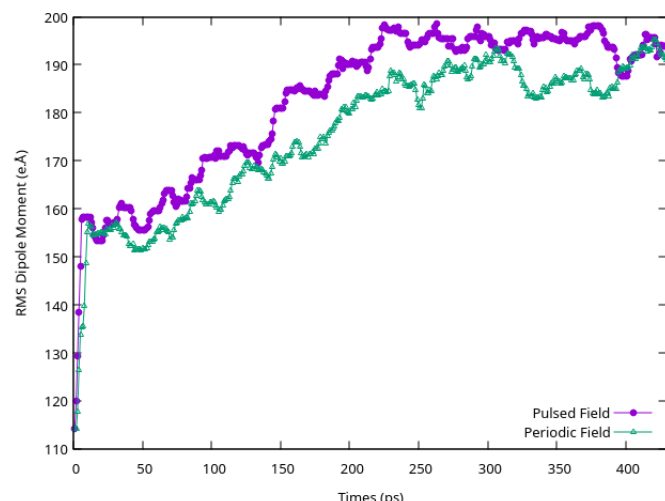
همچنین انرژی جنبشی جهش از رابطه

$$E_k^{effective} = \frac{1}{2} m v_j^2, \quad (4)$$

به دست می‌آید که در آن m جرم کل قطرات و v_j بیشینه مولفه عمودی سرعت مرکز جرم قطره در مرحله جهش است. بنابراین، بازده تبدیل انرژی به صورت نسبت انرژی جنبشی جهش به انرژی سطحی آزاد شده تعریف شده است.

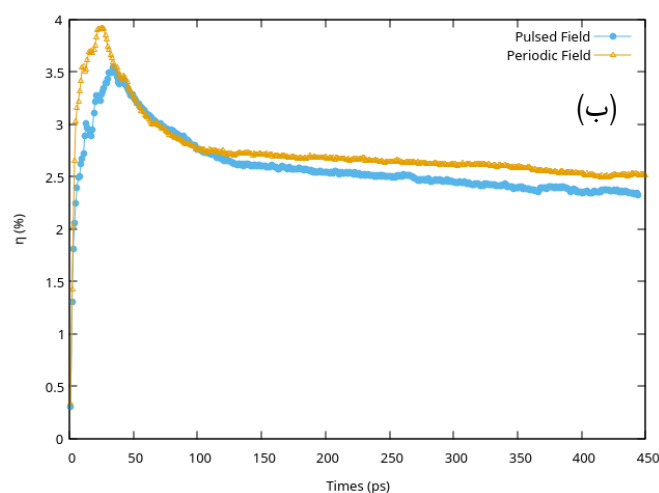
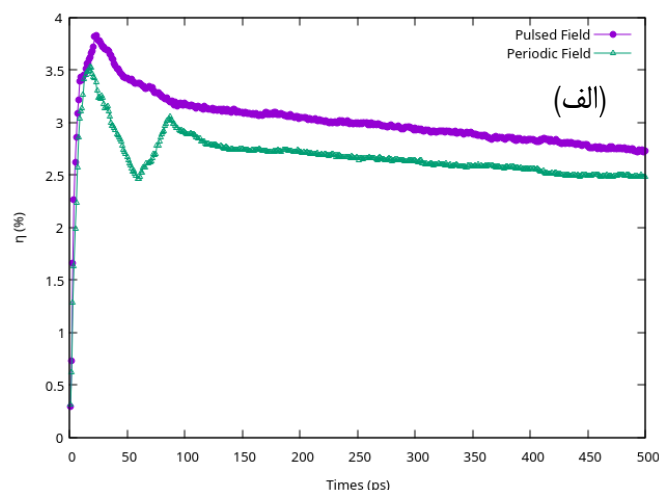
شکل ۵ (الف)، نشان می‌دهد که در سامانه شور-شور، بازده تبدیل انرژی در حضور میدان پالسی تقریباً ۸۴۳۰۶٪ بیشتر از میدان اعمالی متناوب است. افزایش بازده حاکی از آن است که سهم بیشتری از انرژی سطحی آزاد شده در هنگام هم‌جوشی به انرژی جنبشی جهشی اختصاص یافته است. این نتیجه نشان می‌دهد که میدان پالسی نه تنها سرعت جداسدن قطره را در سامانه‌های شور-شور افزایش می‌دهد، بلکه به نظر می‌رسد انتقال انرژی به حرکت جهشی مؤثرتر باشد. از طرفی دیگر، شکل ۵ (ب)، متفاوت با حالت قرارگیری قطره شور-شور

افزایش جذر میانگین مربعی گشتاور دوقطبی نشان می‌دهد که مولکول‌های آب و یون‌های موجود در قطره در میدان پالسی آرایش جهت‌دارتر و پایدارتری اتخاذ می‌کنند. این آرایش منظم‌تر، نشان‌دهنده جهت‌گیری منظم‌تر مولکول‌های آب است که احتمالاً بر رفتار دینامیکی سامانه اثر می‌گذارد و هنگام هم‌جوشی و بازآرایی ساختار قطره، بخشی از این انرژی ذخیره‌شده به انرژی جنبشی تبدیل شده و در نهایت به این روند می‌تواند با بهبود عملکرد جهش مشاهده شده، همبستگی داشته باشد.



شکل ۶. گشتاور دوقطبی الکتریکی برای سامانه (الف) قطرات شور-شور و (ب) قطرات شور-آب خالص تحت میدان‌های الکتریکی پالسی و تناوبی.

بنابراین بین مقدار گشتاور دوقطبی و بازده جهش الزاماً یک رابطه خطی و مستقیم وجود ندارد. در سامانه متقارن شور-شور، افزایش هم‌راستایی ممان‌های دوقطبی مولکولی با افزایش ارتفاع جهش، کاهش زمان جداسازی سطح و بهبود بازده تبدیل انرژی همراه است. اما در سامانه نامتقارن شور-آب خالص، ممکن است بخشی از اثر هم‌راستایی ممان دوقطبی مولکولی در



شکل ۵. بازدهی تبدیل انرژی سطحی قطره ادغام شده به انرژی جنبشی پرش از سطح زیرلایه برای آرایش قرارگیری قطرات (الف) شور-شور (ب) شور-آب خالص تحت میدان‌های الکتریکی خارجی به صورت پالسی و متناوب.

در این مطالعه، تغییرات ناشی از میدان الکتریکی و حضور یون‌ها از طریق بررسی تغییرات گشتاور دوقطبی و جهت‌گیری ممان‌های دوقطبی مولکول‌های آب تحلیل شده است. با توجه به استفاده از مدل SPC/E، که یک مدل غیرقطبش‌پذیر با بارهای ثابت است، این تغییرات بیانگر بازآرایی جهت‌گیری مولکول‌های آب و هم‌راستایی ممان‌های دوقطبی آن‌ها بوده و به معنای قطبش الکترونی القاشده نیست. برای روشن شدن نقش جهت‌گیری ممان‌های دوقطبی مولکولی در بهبود جهش، جذر میانگین مربعی (RMS) گشتاور دوقطبی کل سامانه در طول زمان محاسبه شد.

استفاده از مقدار جذر میانگین مربعی، امکان حذف نوسانات شدید لحظه‌ای و استخراج روند کلی تحول قطبش را فراهم می‌کند. شکل ۶ (الف)، مربوط به حالت قرارگیری قطرات شور-شور است. مشاهده می‌شود که مقدار جذر میانگین مربعی گشتاور دوقطبی در میدان پالسی در اکثر زمان‌ها بزرگ‌تر از میدان متناوب است. همین روند در سامانه شور-آب خالص نیز مشاهده می‌شود (شکل ۶ (ب)).

نیست، بلکه به شکل موج میدان و آرایش یونی سامانه نیز بستگی دارد. در سامانه متقارن شور-شور، میدان پالسی موجب افزایش ارتفاع جهش، کاهش زمان جدا شدن قطره از سطح و بهبود بازده تبدیل انرژی شد، در حالی که در سامانه نامتقارن شور-آب خالص، میدان متناوب عملکرد بهتری از نظر ارتفاع جهش و بازده تبدیل انرژی نشان داد.

مقایسه نتایج حاصل از ارتفاع مرکز جرم، انرژی برهم‌کنش قطره-زیرلایه، بازده تبدیل انرژی و گشتاور دوقطبی نشان داد که افزایش هم‌راستایی ممان‌های دوقطبی مولکولی سامانه، به‌تنهایی تضمین‌کننده بهبود عملکرد جهش نیست و نحوه آرایش یونی سامانه نیز نقش مهمی در رفتار مشاهده شده دارد. این نتایج نشان می‌دهد که انتخاب مناسب شکل موج میدان الکتریکی می‌تواند به‌عنوان یک پارامتر کنترلی مؤثر برای تنظیم رفتار نانوقطرات، در محدوده شرایط بررسی‌شده در این مطالعه، مورد استفاده قرار گیرد. لازم به ذکر است که نتایج این پژوهش به شرایط شبیه‌سازی حاضر، شامل اندازه قطرات، غلظت یونی و شدت میدان الکتریکی محدود است و تعمیم آن به سایر شرایط نیازمند مطالعات تکمیلی است. همچنین، بررسی مستقیم توزیع فضایی یون‌ها، پروفایل چگالی و مؤلفه‌های انرژی الکترواستاتیکی، شدت و فرکانس میدان الکتریکی، می‌تواند در پژوهش‌های آینده به درک دقیق‌تر مکانیزم‌های میکروسکوپی حاکم بر فرآیند جهش نانوقطرات کمک کند.

۵- تعارض منافع

هیچ تعارض منافی توسط نویسندگان گزارش نشده است.

۶- تشکر و قدردانی

از دانشگاه خلیج فارس برای در اختیار گذاشتن دسترسی به کلاستر محاسباتی برای انجام این پژوهش سپاسگزارم.

مراجع

[1] X. He, B-X. Zhang, S-L. Wang, Y-F. Wang, Y-R. Yang, X-D. Wang, D-J. Lee, "The Cassie-to-Wenzel wetting transition of water films on textured surfaces with different topologies," *Physics of Fluids*, 33, 112006, 2021. <https://doi.org/10.1063/5.0066106>.

[2] X. He, B-X. Zhang, Y-F. Wang, Y-Y. Zhang, Y-R. Yang, X-D. Wang, D-J. Lee, "Dynamic coalescence of two charged droplets with deflected angles in the presence of electric fields", *Journal of Molecular Liquids*, 353, 118812, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.118812>

نوسانات داخلی سامانه ظاهر شود. بنابراین رابطه میان گشتاور دوقطبی و عملکرد جهش در این سامانه غیرمستقیم بوده و احتمالاً به نحوه توزیع یون‌ها در دو قطره وابسته است. این موضوع نشان می‌دهد که علاوه بر شدت قطبش، تقارن یونی سامانه نیز نقش تعیین‌کننده‌ای در مسیرهای انتقال انرژی پس از هم‌جوشی دارد. بنابراین برتری میدان پالسی به نوع آرایش یونی سامانه وابسته است. برای سامانه متقارن شور-شور، میدان پالسی موجب افزایش ارتفاع جهش، کاهش زمان جدا شدن از سطح و افزایش بازده تبدیل انرژی می‌شود. با این حال، در سامانه نامتقارن شور-آب خالص، میدان متناوب می‌تواند ارتفاع جهش بزرگتری ایجاد کند. این موضوع بیانگر آن است که پاسخ دینامیکی قطرات به میدان خارجی تنها تابع شدت میدان نیست، بلکه به نحوه توزیع بار و تقارن یونی سامانه نیز وابسته است. این یافته‌ها بیان می‌کنند که انتخاب شکل موج میدان الکتریکی می‌تواند به‌عنوان یک پارامتر کنترلی مؤثر برای بهینه‌سازی فرایند حذف قطرات در سامانه‌های الکتروهیدرودینامیکی مورد استفاده قرار گیرد. برای بررسی اعتبار مدل شبیه‌سازی و پارامترهای مورد استفاده، نتایج حاصل از این مطالعه با داده‌ها و روندهای گزارش‌شده در مطالعات پیشین مقایسه شد. در مقیاس نانو، به دلیل افزایش نقش اتلافات ویسکوز داخلی، اصطکاک خط تماس و برهم‌کنش قوی‌تر مایع-سطح، تنها بخش کوچکی از انرژی سطحی آزادشده در فرآیند هم‌جوشی به انرژی جنبشی جهش تبدیل می‌شود. بازده تبدیل انرژی به‌دست‌آمده در این مطالعه با مقادیر گزارش‌شده برای قطرات نانومتری روی سطوح آب‌گریز در مطالعه [۳۳] سازگاری دارد، که نشان‌دهنده توانایی مدل حاضر در بازتولید رفتار انرژی‌زدایی در سامانه‌های نانومقیاس است. علاوه بر این، رفتار هم‌جوشی و جهش قطرات یونی در شرایط بدون و با میدان الکتریکی تناوبی با نتایج گزارش‌شده در مطالعه اخیر [۳۱] مقایسه شد. روند تغییرات زمان هم‌جوشی و بازده تبدیل انرژی در سامانه‌های متقارن و نامتقارن یونی (شور-شور و شور-آب خالص) با نتایج گزارش‌شده سازگاری نشان داد. همچنین مدل برهم‌کنش آب-زیرلایه در این مطالعه بر اساس پارامترهای لنارد-جونز گزارش‌شده و اعتبارسنجی‌شده در مطالعات پیشین [۳۴] برای بازتولید نتایج تعامل قطرات با زیرلایه انتخاب شدند. این مقایسه‌ها نشان می‌دهد که مدل مولکولی و پارامترهای برهم‌کنش مورد استفاده، روندهای فیزیکی اصلی حاکم بر هم‌جوشی و تبدیل انرژی در سامانه مورد مطالعه را به‌طور مناسب بازتولید می‌کنند.

۴- نتیجه گیری

در این پژوهش، اثر شکل موج میدان الکتریکی خارجی بر رفتار هم‌جوشی و جهش نانوقطرات یونی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شد. نتایج نشان داد که پاسخ دینامیکی قطرات تنها به حضور میدان الکتریکی وابسته

- surfaCes”, Langmuir, 34, 11195-11203, 2018. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.8b02428>.
- [10] Z. Zhang, J. Wang, Y. He, F. Jiao, “DireCtional droplet coalesCenCe-induced jumping regulated by laplaCe pressure”, Langmuir, 41, 8921-8933, 2025. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.5c00279>.
- [11] W. Hong, Z. Liu, M. Liao, B. Pan, F. Xie, “A moleCular dynamiCs study on coalesCenCe-induced jumping of moving and static droplets.” The Journal of Chemical PhysiCs, 162, 124303, 2025. <https://doi.org/10.1063/5.0260138>.
- [12] S. Li, F. Chu, J. Zhang, D. Brutin, D. Wen, “Droplet jumping induced by coalesCenCe of a moving droplet and a static one: Effect of initial veloCity”, ChemiCal Engineering SCienCe, 211, 115252, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.115252>.
- [13] R. Enright, N. MiljkoviC, J. Sprittles, K. Nolan, R. Mitchell, E. N. Wang, “How coalesCing droplets jump.” ACS Nano, 8, 10352-10362, 2014. <https://doi.org/10.1021/nn503643m>.
- [14] X.Wang, B. Xu, Z. Chen , D. Del Col, D. Li, L.Zhang, X. Mou, Q. Liu, Y. Yang, Q. Cao, “Review of droplet dynamiCs and dropwise condensation enhanCement: Theory, experiments and appliCations”, AdvanCes in Colloid and InterfaCe SCienCe, 305, 102684, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2022.102684>.
- [3] Y.Hou, M. Yu, X. Chen, Z.Wang, S. Yao, “ReCurrent filmwise and dropwise condensation on a beetle mimetic surfaCe,” ACS Nano, 9, 71-81, 2015. <https://doi.org/10.1021/nn505716b>.
- [4] G. S. Watson, M. Gellender, J. A. Watson, “Self-propulsion of dew drops on lotus leaves: A potential mechanism for self cleaning,” Biofouling, 30, 427-434, 2014. <https://doi.org/10.1080/08927014.2014.880885>.
- [5] J. B. Boreyko, C. P. Collier, “Delayed frost growth on jumping-drop super-hydrophobic surfaCes.” ACS Nano, 7, 1618-1627, 2013. <https://doi.org/10.1021/nn3055048>.
- [6] J. B. Boreyko, C-H. Chen, “Self-propelled dropwise condensate on superhydrophobic surfaces”, Phys. Rev. Lett., 103, 184501, 2009. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.184501>.
- [7] S.Gao, Q. Liao, W. Liu, Z. Liu, “CoalesCenCe-induced jumping of nanodroplets on textured surfaCes.” The Journal of Physical Chemistry Letters, 9, 13-18, 2018. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.7b02939>.
- [8] X.He, L. Zhao, J. Cheng, “CoalesCenCe-induced swift jumping of nanodroplets on curved surfaCes”, Langmuir, 35, 9979-9987, 2019. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.9b01300>.
- [9] F-F. Xie, G. Lu, X-D. Wang, D-Q. Wang, “Enhancement of coalesCenCe- induced nanodroplet jumping on superhydrophobic

manipulated vapor condensation on the dimpled surface: Insights from molecular dynamics simulations,” *Langmuir*, 39, 829-840, 2023. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.2c02897>.

[21] X. He, B-X. Zhang, S-L. Wang, Y-F. Wang, Y-R. Yang, X-D. Wang, D-J. Lee, “Electrocoalescence of two charged nanodroplets under different types of external electric fields,” *Journal of Molecular Liquids*, 341, 117417, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.117417>.

[22] F. Song, R. Chen, G. Wang, J. Fan, H. Niu, “Coalescence and Break-Up Behaviors of Nanodroplets under AC Electric Field,” *Molecules*, 28, 3064, 2023. <https://doi.org/10.3390/molecules28073064>.

[23] Z. Liang, P. Keblinski, “Coalescence-induced jumping of nanoscale droplets on superhydrophobic surfaces,” *Applied Physics Letters*, 107, 143105, 2015. <https://doi.org/10.1063/1.4932648>.

[24] S. Alaei, “Functionalized Carbon nanotubes as advanced adsorbents: Molecular dynamics simulation,” *Nanomeghyas*, 12, 318-337, 2025 (In Persian). <https://doi.org/10.22034/ns.2025.2069010.1403>.

[25] N. Torabi, F. Ebrahimi, G. Maktabdaran, “Effective factors on water transport through Connections of Carbon nanotubes,” *Nanomeghyas*, 9, 190-203, 2022 (In Persian). <https://doi.org/20.1001.1.24235628.1401.9.1.20.6>.

[26] F. Ebrahimi, A. Pischevar, Conditions of occurrence of wetting transparency of graphene nano-coatings in Cu-Graphene system,”

[15] S-F. Zheng, U. Gross, X-D. Wang, “Dropwise Condensation: From fundamentals of wetting, nucleation, and droplet mobility to performance improvement by advanced functional surfaces”, *Advances in Colloid and Interface Science*, 295, 102503, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2021.102503>.

[16] L. Sun, J. Wang, Y. Chen, “Coalescence of multiple droplets induced by a constant dc electric field,” *PLOS ONE*, 19, 1-16, 2024. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0300925>.

[17] J. H. Lee, C. Kim, M. Tokman, M. E. Colvin, “Energy component analysis of electric field-induced shape change in water nanodroplets,” *The Journal of Physical Chemistry C*, 125, 6933-6944, 2021. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c00632>.

[18] B. Traipattanakul, C. Tso, C. Y. Chao, “Study of jumping water droplets on superhydrophobic surfaces with electric fields,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 115, 672-681, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.07.096>.

[19] D. T. S. Ranathunga, A. Shamir, X. Dai, S. O. Nielsen, “Molecular dynamics simulations of water condensation on surfaces with tunable wettability,” *Langmuir*, 36, 7383-7391, 2020. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.0c00915>.

[20] S-Y. Wang, Z-J. Wang, D-Q. Wang, Y-R. Yang, X-D. Wang, D-J. Lee, “Electrically

surface,” *Processes*, 11, 1865, 2023. <https://doi.org/10.3390/pr11071865>.

[33] X. Yan, L. Zhang, S. Sett, L. Feng, C. Zhao, Z. Huang, H. Vahabi, A. K. Kota, F. Chen, N. Miljkovic, “Droplet jumping: Effects of droplet size, surface structure, pinning, and liquid properties”, *ACS Nano*, 13, 1309-1323, 2019. <https://doi.org/10.1021/acsnano.8b06677>.

[34] F. Taherian, V. MarCon, N. F. A. van der Vegt, F. Leroy, “What is the contact angle of water on graphene?”, *Langmuir*, 29, 1457-1465, 2013. <https://doi.org/10.1021/la304645w>.

Nanomeghyas, 9, 105-118, 2022 (In Persian). <https://doi.org/20.1001.1.24235628.1401.9.1.11.7>.

[27] M. Farrokhbin, S. Hashemzadeh Rizi, A. Lohrasebi, “Nano-droplet jumping due to surface wettability variation: Molecular modeling approach,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 25, 2161-2166, 2023. <https://doi.org/10.1039/D2CP05447G>.

[28] D-Q. Wang, Z-J. Wang, S-Y. Wang, Y-R. Yang, S-F. Zheng, D-J. Lee, X-D. Wang, “Coalescence-Induced Jumping of Nanodroplets in a Perpendicular Electric Field: A Molecular Dynamics Study,” 40, 3248-3259, 2024. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.3c03758>.

[29] M. Allen, D. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford: Oxford University Press, 2017. <https://doi.org/10.1093/oso/9780198803195.001.0001>.

[30] J. Zhang, M. B. Clennell, D. N. Dewhurst, “Transport properties of NaCl in aqueous solution and hydrogen solubility in brine,” *J. Phys. Chem. B.*, 127, 8900-8915, 2023. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c03863>.

[31] M. Farrokhbin, A. Lohrasebi, “Electrically enhanced coalescence-jumping of saline nanodroplets: Insights from molecular dynamics simulations,” *Surfaces and Interfaces*, 72, 107455, 2025. <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2025.107455>.

[32] M-J. Liao, X-Q. Ren, Z-H. Liu, W-P. Hong, F-F. Xie, “Study on the coalescence-induced jumping of droplets with different radii on superhydrophobic



Molecular Dynamics Investigation of Coalescence-Induced Jumping of Ionic Nanodroplets under Pulsed and Oscillatory Electric Fields

Mojtaba Farrokhbin *

Department of Physics, Faculty of Nano and Bioscience and Technology, Persian Gulf University, Bushehr
7516913817, Iran

Received: 2026-06-02

Revised: 2026-07-10

Accepted: 2026-07-15

Abstract: Coalescence-induced droplet jumping plays a crucial role in heat transfer, dropwise condensation, and electrohydrodynamic systems. In this study, molecular dynamics simulations were performed to investigate the effects of pulsed and oscillatory electric fields on the coalescence and jumping behavior of saline nanodroplets. Two droplet configurations, namely symmetric saline-saline and asymmetric pure water-saline systems, were considered. The jumping height, droplet-substrate interaction energy, energy conversion efficiency, and dipole moment were analyzed to elucidate the underlying molecular mechanisms.

The results show that, for the symmetric saline-saline system with 4 nm radius nanodroplets, the pulsed electric field outperforms the oscillatory field, increasing the jumping height and the surface-to-kinetic energy conversion efficiency by 8.8482% and 8.4306%, respectively. In contrast, for the asymmetric pure water-saline system, the oscillatory electric field enhances the jumping height and energy conversion efficiency by 3.7885% and 10.8498%, respectively, compared with the pulsed field. Dipole moment analysis reveals that the pulsed electric field promotes stronger alignment of water molecular dipoles in both systems; however, the enhanced dipole alignment does not necessarily translate into improved jumping performance. These findings demonstrate that, in addition to the electric-field waveform, ionic distribution and system symmetry play decisive roles in governing post-coalescence energy transfer pathways. This study provides new molecular-level insights into the controlled manipulation of droplet dynamics in electrohydrodynamic systems.

Keywords: Wetting, Electric Field, Coalescence-Induced Nanodroplets Jumping, Molecular Dynamics

Corresponding Author. Email: m.farrokhbin@pgu.ac.ir

How to Cite This Article:

Farrokhbin M. Molecular Dynamics Investigation of Coalescence-Induced Jumping of Ionic Nanodroplets under Pulsed and Oscillatory Electric Fields. Nanomeghyas. 2026;():e738436 (In Persian). doi: 10.22034/ns.2026.2092370.1436



This is an open access article under the CC-BY license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).