



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΙΙ: ΑΝΑΛΥΣΗΣ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΚΑΙ  
ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ  
ΤΟΥ ΒΑΣΙΛΕΙΟΥ Χ. ΧΑΡΙΤΑΤΟΥ

**ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΣΤΑΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ  
ΔΙΑΒΡΕΚΤΙΚΟΤΗΤΑΣ ΥΠΕΡΥΔΡΟΦΟΒΩΝ  
ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ ΑΠΟ ΣΤΑΓΟΝΕΣ**

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ  
ΑΘΑΝΑΣΙΟΣ Γ. ΠΑΠΑΘΑΝΑΣΙΟΥ, ΕΠΙΚΟΥΡΟΣ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΕΜΠ

ΑΘΗΝΑ  
ΙΟΥΝΙΟΣ 2016

## **ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ**

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα Καθηγητή αυτής της εργασίας, Αθανάσιο Παπαθανασίου, που μέσω αυτού του θέματος μου έδωσε την ευκαιρία να ασχοληθώ με απαιτητικούς υπολογισμούς στην επιστημονική περιοχή της Μικρορευστομηχανικής. Με τις κατευθυντήριες οδηγίες του και τις εύστοχες παρατηρήσεις του διαμόρφωσε εύφορες συνθήκες για την πραγματοποίηση αυτής της διπλωματικής εργασίας.

Θερμές ευχαριστίες θέλω να απευθύνω και στον Υποψήφιο Διδάκτορα Νικόλαο Χαμάκο, για την αμέριστη στήριξη του κατά τη διάρκεια αυτής της εργασίας. Η καθοδήγηση του στους υπολογισμούς και η βοήθεια του στην κατανόηση του φαινομένου της διαβροχής απεδείχθη καταλυτική για την ολοκλήρωση αυτής της εργασίας.

Τέλος, ιδιαίτερος ευχαριστώ τους συνεργάτες μου στο Ηλιακό Εργαστήριο, Γιάννη Αβιζιώτη, Δρ. Ελένη Κορωνάκη και Δρ. Γιώργο Πάσχο για το γόνιμο κλίμα συνεργασίας που υπήρχε κατά την παραμονή μου στο εργαστήριο.

# ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΕΡΙΛΗΨΗ.....	4
ABSTRACT.....	5
ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	6
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΔΙΑΒΡΟΧΗΣ .....	7
1.1. Ορισμός της διεπιφάνειας.....	7
1.2. Διεπιφανειακή Τάση.....	8
1.3. Επαφή μεταξύ τριών φάσεων .....	9
1.3.1. Ολική και μερική διαβροχή.....	9
1.3.2. Εξίσωση Young.....	10
1.4. Εξίσωση Young-Laplace.....	12
1.5. Επαυξημένη εξίσωση Young-Laplace .....	13
1.6. Δυναμική συμπεριφορά σταγόνων .....	19
1.7. Μηχανισμοί παγίδευσης περιβάλλουσας φάσης.....	20
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΔΙΑΒΡΟΧΗΣ.....	23
2.1. Μοντελοποίηση διαβροχής στην ισορροπία .....	23
2.1.1. Παραμετροποίηση αξονοσυμμετρικής σταγόνας σε κυλινδρικές συντεταγμένες .....	24
2.1.2. Παραμετροποίηση αξονοσυμμετρικής σταγόνας σε σφαιρικές συντεταγμένες .....	29
2.1.3. Παραμετροποίηση μήκους τόξου .....	33
2.2. Μοντελοποίηση δυναμικής συμπεριφοράς σταγόνων .....	40
2.2.1. Διέπουσες εξισώσεις .....	40
2.2.2. Συνοριακές συνθήκες .....	40
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΥΖΗΤΗΣΗ ΣΤΑΤΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΩΝ.....	43
3.1. Συσχέτιση της παραμέτρου διαβροχής $w^{LS}$ με την γωνία επαφής $\theta_Y$ .....	43
3.2. Σύγκριση αποτελεσμάτων συμβατικής και επαυξημένης εξίσωσης Young-Laplace .....	44
3.3. Ενσωμάτωση φαινομένων προσρόφησης στην πίεση Derjaguin.....	48
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΥΖΗΤΗΣΗ ΔΥΝΑΜΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΩΝ.....	52
4.1. Γραμμή επαφής και δυναμική γωνία: Σύγκριση με πειραματικά αποτελέσματα .....	52
4.2. Χαρτογράφηση του φαινομένου της παγίδευσης της περιβάλλουσας φάσης.....	55
4.2.1. Περίπτωση υψηλής επιφανειακής τάσης.....	55

4.2.2. Περίπτωση χαμηλής επιφανειακής τάσης .....	61
4.3. Επίδραση του ιξώδους της περιβάλλουσας φάσης στη δυναμική γωνία επαφής.....	62
4.4. Εξέλιξη του σχήματος της παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης .....	64
4.4.1. Αρχική ακτίνα δίσκου .....	64
4.4.2. Μέγιστο ύψος φυσαλίδας .....	67
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ .....	71
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: ΤΡΕΧΟΥΣΑ ΕΡΕΥΝΑ – ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ .....	74
6.1. Παγίδευση περιβάλλουσας φάσης σε τραχιές επιφάνειες.....	74
6.1.1. Δυναμική συμπεριφορά σταγόνων για αρχικούς και τελικούς χρόνους .....	75
6.2.2. Ποσότητα παγιδευμένης φάσης συναρτήσει της απόστασης των στερεών προεξοχών ..	78
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α: ΕΠΙΛΥΣΗ ΤΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ ΕΙΚΟΝΑΣ .....	81
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β: 11 <sup>th</sup> HSTAM INTERNATIONAL CONGRESS ON MECHANICS .....	83

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η μελέτη της διαβρεκτικότητας αφορά στο πώς ένα υγρό απλώνει και ισορροπεί πάνω σε μια στερεή επιφάνεια, σε περιβάλλουσα φάση ρευστού (αέρα ή άλλου υγρού). Στην παρούσα εργασία, εξετάζεται από υπολογιστική σκοπιά τόσο η στατική όσο και η δυναμική συμπεριφορά σταγόνων που διαβρέχουν στερεές επιφάνειες. Ειδικότερα, μελετούνται περιπτώσεις όπου κατά την εξάπλωση του υγρού, μια ποσότητα περιβάλλουσας φάσης εγκλωβίζεται ανάμεσα στο υγρό και την στερεή επιφάνεια.

Στις υπάρχουσες μεθόδους μοντελοποίησης, οι διαβρεκτικές ιδιότητες της στερεής επιφάνειας εισάγονται στο πρόβλημα με μορφή συνοριακής συνθήκης στο τριπλό σημείο επαφής υγρού/στερεής επιφάνειας/περιβάλλουσας φάσης. Σε αυτήν την εργασία, στην θέση της συνοριακής συνθήκης, χρησιμοποιείται ένας όρος διαμοριακών δυνάμεων για την ποσοτικοποίηση των μικρο-αλληλεπιδράσεων στερεού/υγρού. Συγκεκριμένα, για την προσομοίωση της στατικής συμπεριφοράς, η συμβατική διαφορική εξίσωση Young-Laplace επαυξάνεται με αυτόν τον όρο. Έτσι, μας δίνεται η δυνατότητα να αντιμετωπίσουμε προβλήματα διαβροχής στα οποία η στερεή επιφάνεια έχει τραχύτητα. Αντίστοιχα, για την περιγραφή της δυναμικής συμπεριφοράς, ο όρος των διαμοριακών αλληλεπιδράσεων συνυπολογίζεται στις συνοριακές συνθήκες των εξισώσεων Navier-Stokes.

Στα αποτελέσματα που αφορούν τη στατική συμπεριφορά του συστήματος, συγκρίνεται το τελικό σχήμα της σταγόνας όπως αυτό προκύπτει από την επίλυση της συμβατικής και της τροποποιημένης εξίσωσης Young-Laplace. Επίσης, εξετάζεται τί αλλαγές επιφέρει στο σχήμα της σταγόνας η χρήση ενός διαφορετικού όρου διαμοριακών αλληλεπιδράσεων. Για τη δυναμική συμπεριφορά του συστήματος, παρουσιάζονται αποτελέσματα που αφορούν τις συνθήκες που ευνοούν την παγίδευση της περιβάλλουσας φάσης. Παράλληλα, πραγματοποιείται μελέτη της επίδρασης των ιδιοτήτων της περιβάλλουσας φάσης στο δυναμικό σχήμα της σταγόνας. Επιπλέον, εξετάζεται η επίδραση της ταχύτητας πρόσκρουσης της σταγόνας στο σχήμα της παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης. Τέλος, γίνεται μια συνοπτική ανάλυση της επίδρασης της γεωμετρίας της στερεής επιφάνειας, στο φαινόμενο της παγίδευσης της περιβάλλουσας φάσης.

## **ABSTRACT**

Wetting regards the study of how a liquid spreads and balances on a solid surface, in the presence of an ambient phase, may that be air or another liquid. In this thesis, we computationally examine both the static and dynamic behavior of such systems. More specifically, we study cases where during the spreading of the liquid, a small quantity of ambient phase gets entrapped between the liquid and the solid surface.

In existing modeling approaches, the wetting properties of the solid surface are introduced to the problem by imposing a boundary condition on the point where the liquid, the solid surface and the ambient phase meet. In this thesis, instead of a boundary condition, an intermolecular forces term is used to describe the liquid/solid micro-scale interactions. Specifically, in order to model the static behavior of the system, the conventional Young-Laplace differential equation is augmented with this term. In this way, we can tackle cases where the solid surface is geometrically patterned. Moreover, concerning the modeling of the dynamic behavior of the system, this term is included within the boundary conditions for the Navier-Stokes equations.

Regarding the static computations, the results include a comparison of the final shape of the droplet as it derives from the conventional and the augmented Young-Laplace. Furthermore, the change of the droplet shape when altering the intermolecular forces term is examined. On the other hand, results concerning the dynamic behavior of the system include the identification of the conditions that inhibit ambient phase entrapment. In addition, we study the effect of the ambient phase properties on the dynamic shape of the droplet. We also consider the effect of the impact velocity of the droplet on the shape of the entrapped ambient phase. Finally, a brief analysis of the effect of the geometry of the solid surface on the ambient phase entrapment phenomenon is conducted.

## ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Εξετάζεται το φαινόμενο της διαβροχής στερεών επιφανειών από υγρές σταγόνες, δηλαδή το πως μια σταγόνα απλώνει πάνω σε μια στερεή επιφάνεια παρουσία περιβάλλουσας φάσης ρευστού (αέρα ή άλλου υγρού). Μελετώντας το φαινόμενο της διαβροχής μπορούμε να ερμηνεύσουμε γιατί το νερό διαβρέχει πλήρως μια επιφάνεια γυαλιού ενώ διαβρέχει μερικώς μια επιφάνεια Teflon™. Επιπλέον, μας δίνεται η δυνατότητα να μεταβάλλουμε (ακόμα και με δυναμικό τρόπο) τις διαβρεκτικές ιδιότητες των υλικών.<sup>1</sup>

Η θεωρητική και υπολογιστική μελέτη της διαβροχής είναι μείζονος σημασίας καθώς τα φαινόμενα διαβροχής μιας στερεής επιφάνειας από υγρές σταγόνες λαμβάνουν χώρα σε πληθώρα τεχνολογικών εφαρμογών. Ενδεικτικά αναφέρονται οι εξής κατηγορίες εφαρμογών:

- Βιομηχανικές εφαρμογές όπως επιστρώσεις επιφανειών<sup>2</sup> (coatings), και κατασκευή αυτοκαθαριζόμενων επιφανειών<sup>3</sup>,
- Βιοϊατρικές εφαρμογές όπως κατασκευή μικρο-εργαστηριακών μονάδων<sup>4</sup> (lab-on-a-chip),
- Ενεργειακές εφαρμογές όπως μετατροπή μηχανικής ενέργειας σε ηλεκτρική ενέργεια μέσω κίνησης σταγόνων<sup>5</sup>.

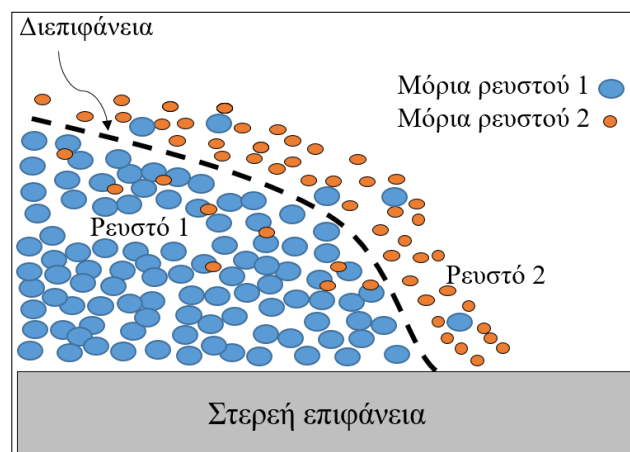
Ειδικότερα, σε αυτήν την εργασία θα μελετήσουμε το πώς κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες, μια σταγόνα που προσκρούει κάθετα σε μια στερεή επιφάνεια μπορεί να παγιδεύσει μια ποσότητα περιβάλλοντος ρευστού. Αυτό το φαινόμενο είναι άκρως ανεπιθύμητο σε εφαρμογές που αφορούν σε επιστρώσεις επιφανειών (coatings), καθώς οι σχηματιζόμενες φυσαλίδες αέρα καθιστούν την επίστρωση ελαττωματική και αναποτελεσματική. Στόχος της εργασίας είναι η κατά το δυνατόν ορθότερη μοντελοποίηση της επίδρασης της περιβάλλουσας φάσης στη δυναμική συμπεριφορά της σταγόνας προκειμένου να αναγνωρισθούν οι παράγοντες (ιξώδες περιβάλλουσας φάσης, ταχύτητα πρόσκρουσης της σταγόνας, γεωμετρία της στερεής επιφάνειας) που εντείνουν το φαινόμενο παγίδευσης της περιβάλλουσας φάσης.

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΔΙΑΒΡΟΧΗΣ

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται έννοιες που θα μας χρησιμεύσουν κατά τη διερεύνηση του φαινομένου της διαβροχής στερεών επιφανειών από σταγόνες. Συγκεκριμένα παρουσιάζεται ο ορισμός της διεπιφάνειας και της διεπιφανειακής τάσης και δίνονται παραδείγματα για τα διαφορετικά είδη διαβροχής στερεών επιφανειών από σταγόνες. Επίσης, αναλύεται η συμβατική εξίσωση Young-Laplace που περιγράφει τα φαινόμενα διαβροχής στην ισορροπία και περιγράφεται η διαδικασία τροποποίησης της για να μπορεί να αντιμετωπίσει πιο σύνθετες περιπτώσεις διαβροχής. Τέλος, γίνεται μια μικρή αναφορά στην χρονική εξέλιξη των φαινομένων διαβροχής καθώς προσεγγίζουν την ισορροπία και περιγράφονται οι διαφορετικοί μηχανισμοί παγίδευσης περιβάλλουσας φάσης ανάμεσα στη σταγόνα και στη στερεή επιφάνεια.

## 1.1. Ορισμός της διεπιφάνειας

Ως διεπιφάνεια χαρακτηρίζεται η γεωμετρική επιφάνεια που διαχωρίζει δύο διαφορετικές φάσεις, όπως δύο μη αναμίξιμα ρευστά (π.χ λάδι-νερό) ή ένα στερεό από ένα υγρό (π.χ νερό-Teflon™). Αυτός ο τρόπος διατύπωσης αφήνει να εννοηθεί ότι μια διεπιφάνεια δεν έχει πάχος και επιπλέον θέτει σαφή όρια μεταξύ των δύο φάσεων που διαχωρίζει. Στην πραγματικότητα όμως, ο ορισμός της διεπιφάνειας είναι πιο πολύπλοκος και ο διαχωρισμός των δύο φάσεων σε επαφή εξαρτάται ισχυρά από την αλληλεπίδραση των δύο φάσεων σε μοριακό επίπεδο. Αναλόγως την ένταση των αλληλεπιδράσεων, επιτρέπεται περισσότερο ή λιγότερο η ανταλλαγή μάζας μεταξύ των δύο φάσεων σε μοριακή κλίμακα<sup>6</sup>. Μια καλύτερη εικόνα για τις διεπιφάνειες δίνεται στο Σχήμα 1.1.

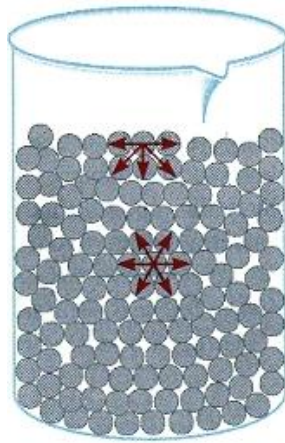


Σχήμα 1.1 : Η διεπιφάνεια μεταξύ δύο ρευστών σε μοριακή κλίμακα



## 1.2. Διεπιφανειακή Τάση

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, όταν δύο φάσεις είναι σε επαφή (π.χ υγρό-αέριο) διαχωρίζονται από μια διεπιφάνεια. Μακριά από τη διεπιφάνεια, στο εσωτερικό του υγρού, τα μόρια ασκούν ελκτικές δυνάμεις μεταξύ τους, προς όλες τις κατευθύνσεις. Όμως στη διεπιφάνεια, ασκείται μια ελκτική δύναμη προς το εσωτερικό του υγρού που τείνει να ελαχιστοποιήσει την ελεύθερη επιφάνεια του υγρού (Σχήμα 1.2).



Σχήμα 1.2: Δυνάμεις που ασκούνται στα μόρια στην επιφάνεια και στο εσωτερικό του υγρού

Ως διεπιφανειακή τάση  $\gamma$ , ορίζεται το έργο  $\delta W$  της δύναμης αυτής, που απαιτείται ώστε να αλλάξει ισοθερμοκρασιακά το εμβαδόν της διεπιφάνειας κατά μια μονάδα εμβαδού  $dA$ <sup>1</sup> (εξίσωση 1-1).

$$\gamma = \frac{\delta W}{dA} \quad (1-1)$$

Η διεπιφανειακή τάση είναι ένα φυσικό μέγεθος χαρακτηριστικό για κάθε διεπιφάνεια και μετράται σε μονάδες δύναμης ανά απόσταση, δηλαδή N/m. Αξίζει να αναφερθεί ότι όσο μεγαλύτερη είναι η διεπιφανειακή τάση μιας διεπιφάνειας τόσο μεγαλύτερο έργο απαιτείται για την παραμόρφωση της διεπιφάνειας. Για παράδειγμα, η διεπιφάνεια νερού/αέρα έχει διεπιφανειακή τάση  $\gamma = 72 \text{ mN/m}$  ενώ η διεπιφάνεια υδραργύρου/αέρα έχει  $\gamma = 425 \text{ mN/m}$ . Αυτό σημαίνει ότι η διεπιφάνεια υδραργύρου/αέρα απαιτεί περισσότερο έργο προκειμένου να μεταβληθεί το εμβαδόν της.

## 1.3. Επαφή μεταξύ τριών φάσεων

### 1.3.1. Ολική και μερική διαβροχή

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, μια σταγόνα νερού διαβρέχει πλήρως μια επιφάνεια γυαλιού ενώ διαβρέχει μερικώς μια επιφάνεια Teflon™. Η παράμετρος διαβροχής  $S$  που χαρακτηρίζει αυτές τις δύο καταστάσεις, μετρά την διαφορά μεταξύ των επιφανειακών ενεργειών όταν η σταγόνα δεν διαβρέχει την επιφάνεια με όταν η σταγόνα διαβρέχει την επιφάνεια.

Η παράμετρος διαβροχής  $S$  ορίζεται ως εξής<sup>1</sup> (εξίσωση 1-2):

$$S = [E_{\text{υπόστρωμα}}]_{\text{μη διαβρεγμένο}} - [E_{\text{υπόστρωμα}}]_{\text{διαβρεγμένο}}$$

$$S = \gamma_{SV} \cdot A_{SV} - (\gamma_{SL} \cdot A_{SL} + \gamma_{LV} \cdot A_{LV}) \quad (1-2)$$

όπου  $\gamma_{SV}$ : διεπιφανειακή τάση διεπιφάνειας στερεού/περιβάλλοντος ρευστού,

$A_{SV}$ : εμβαδόν διεπιφάνειας στερεού/περιβάλλοντος ρευστού

$\gamma_{SL}$ : διεπιφανειακή τάση διεπιφάνειας στερεού/υγρού,

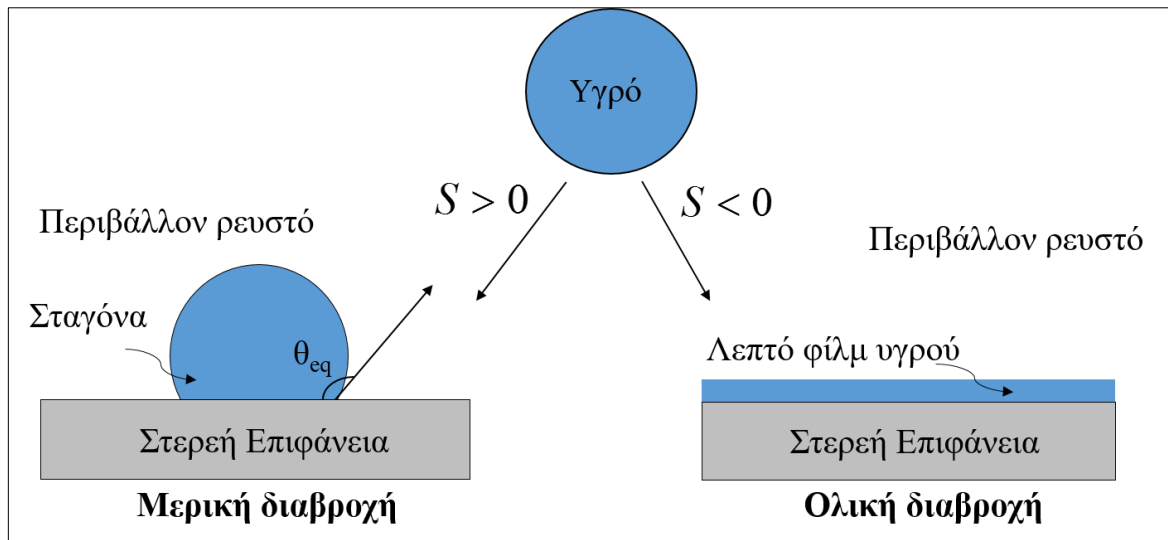
$A_{SL}$ : εμβαδόν διεπιφάνειας στερεού/υγρού,

$\gamma_{LV}$ : διεπιφανειακή τάση υγρού/περιβάλλοντος ρευστού,

$A_{LV}$ : εμβαδόν διεπιφάνειας υγρού/περιβάλλοντος ρευστού.

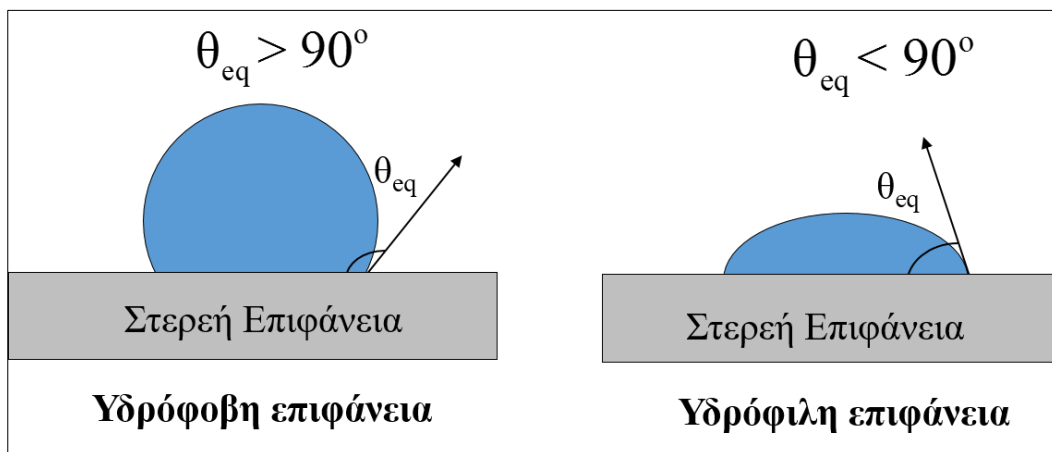
Στην περίπτωση που  $S > 0$ , το υγρό διαβρέχει πλήρως το υπόστρωμα ώστε να ελαχιστοποιήσει την επιφανειακή του ενέργεια (ολική διαβροχή). Το τελικό αποτέλεσμα της διαβροχής είναι ένα λεπτό φιλμ. Χαρακτηριστικό παράδειγμα ολικής διαβροχής είναι μια μικροποσότητα νερού που απλώνεται σε ένα πολύ καθαρό και λείο υπόστρωμα γυαλιού, σχηματίζοντας ένα λεπτό υμένιο.

Στην περίπτωση που  $S < 0$  το υγρό δεν απλώνει τελείως αλλά σχηματίζει μια σταγόνα με σχήμα που αποτελεί τμήμα σφαίρας (μερική διαβροχή) (Σχήμα 1.3).



Σχήμα 1.3: Καταστάσεις μερικής και ολικής διαβροχής

Η γωνία επαφής  $\theta_{eq}$  που σχηματίζει η σταγόνα με το υπόστρωμα λαμβάνει τιμές στο διάστημα  $0 \leq \theta_{eq} \leq 180^\circ$ . Αν  $\theta_{eq} \leq 90^\circ$  τότε η στερεή επιφάνεια χαρακτηρίζεται ως υδρόφιλη, ενώ αν  $\theta_{eq} > 90^\circ$  η στερεή επιφάνεια χαρακτηρίζεται ως υδρόφοβη (Σχήμα 1.4). Σημειώνεται ότι η γωνία  $\theta_{eq} = 90^\circ$  δεν έχει κάποιο ιδιαίτερο θερμοδυναμικό νόημα, σε αντίθεση με την  $\theta_{eq} = 0$  όπου παρατηρείται ολική διαβροχή.



Σχήμα 1.4: Υδρόφιλες και υδρόφοβες επιφάνειες

### 1.3.2. Εξίσωση Young

Έστω μια σταγόνα υγρού που ισορροπεί σε μια λεία στερεή επιφάνεια και περιβάλλεται από ρευστό (αέρα ή άλλο υγρό). Στο σημείο επαφής των τριών φάσεων (υγρού, στερεού και περιβάλλοντος ρευστού) σχηματίζεται μια τριπλή γραμμή επαφής. Έτσι, σχηματίζονται τρεις διακριτές διεπιφάνειες όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.5: στερεού/υγρού,

στερεού/περιβάλλοντος ρευστού και υγρού/περιβάλλοντος ρευστού. Η κάθε διεπιφάνεια χαρακτηρίζεται από την αντίστοιχη διεπιφανειακή της τάση. Όταν αυτό το σύστημα βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία, η εξίσωση του Young (εξίσωση 1-3) συσχετίζει την στατική γωνία επαφής που σχηματίζει η σταγόνα με την στερεή επιφάνεια  $\theta_{eq}$ , με τις τρεις διεπιφανειακές τάσεις ως εξής:

$$\gamma_{SV} = \gamma_{SL} + \gamma_{LV} \cos \theta_{eq} \quad (1-3)$$

όπου  $\gamma_{SV}$ : διεπιφανειακή τάση στερεού/περιβάλλοντος ρευστού

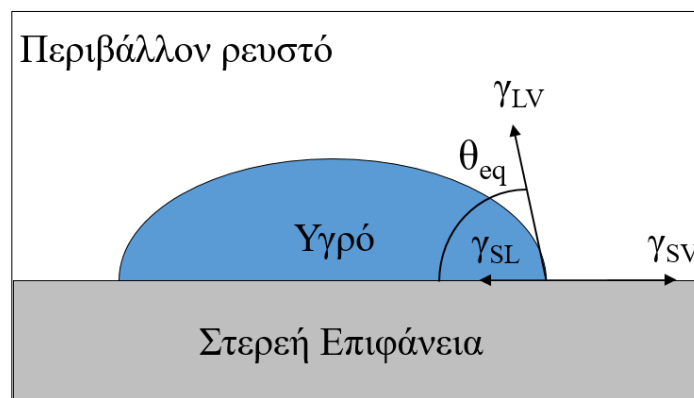
$\gamma_{SL}$ : διεπιφανειακή τάση στερεού/υγρού

$\gamma_{LV}$ : διεπιφανειακή τάση υγρού/περιβάλλοντος ρευστού

Λύνοντας ως προς την στατική γωνία επαφής έχουμε:

$$\cos \theta_{eq} = \frac{\gamma_{SV} - \gamma_{SL}}{\gamma_{LV}} \quad (1-4)$$

Τονίζεται ότι η εξίσωση του Young ισχύει μόνο για ιδανικές επιφάνειες, χωρίς ατέλειες σε μικροσκοπική και νανοσκοπική κλίμακα.



Σχήμα 1.5: Σχηματιζόμενες διεπιφάνειες με τις αντίστοιχες διεπιφανειακές τάσεις

## 1.4. Εξίσωση Young-Laplace

Έστω μια σταγόνα που περιβάλλεται από ρευστό και ισορροπεί πάνω σε μια στερεή επιφάνεια. Η εξίσωση Young-Laplace (εξίσωση 1-5) διατυπώνει την μηχανική ισορροπία της σταγόνας συσχετίζοντας την διαφορά πίεσης μεταξύ του εσωτερικού της σταγόνας και του περιβάλλοντος ρευστού, με την τιμή της μέσης τοπικής καμπυλότητας της διεπιφάνειας. Η εξίσωση έχει την μορφή:

$$\Delta p = \gamma_{LV} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = 2\gamma_{LV} H \quad (1-5)$$

όπου  $\gamma_{LV}$ : επιφανειακή τάση της διεπιφάνειας υγρού/περιβάλλοντος ρευστού,

$H$ : μέση τοπική καμπυλότητα της διεπιφάνειας,  $H = \frac{\nabla_s \cdot \vec{n}}{2}$ , με  $\vec{n}$  το κάθετο στη διεπιφάνεια διάνυσμα και  $\nabla_s$  ο τελεστής επιφανειακής απόκλισης.

Εδώ πρέπει να σημειωθεί ότι αγνοείται η επίδραση της βαρύτητας στην ισορροπία της σταγόνας. Αυτό διότι η ακτίνα των σταγόνων που θα μελετηθούν είναι μικρότερη από ένα χαρακτηριστικό μήκος που ονομάζεται τριχοειδές μήκος (capillary length) και ισούται με (εξίσωση 1-6):

$$\kappa^{-1} = \sqrt{\frac{\gamma}{\rho g}} \quad (1-6)$$

όπου  $\gamma$  η διεπιφανειακή τάση της διεπιφάνειας υγρού/περιβάλλοντος ρευστού,  $\rho$  η πυκνότητα του υγρού και  $g$  η επιτάχυνση της βαρύτητας. Σύμφωνα με τη θεωρία<sup>1</sup>, όταν η ακτίνα της σταγόνας είναι μικρότερη από το τριχοειδές μήκος η επίδραση της βαρύτητας θεωρείται αμελητέα.

Προκειμένου να αδιαστατοποιήσουμε την εξίσωση Young-Laplace, πολλαπλασιάζουμε και τα δύο μέλη με ένα χαρακτηριστικό μήκος  $R_0$  όπως φαίνεται παρακάτω:

$$\Delta p = 2\gamma_{LV} H \Rightarrow R_0 \cdot \Delta p = 2\gamma_{LV} H \cdot R_0 \quad (1-7)$$

και θεωρώντας  $K = \frac{R_0 \cdot \Delta p}{\gamma_{LV}}$  και  $C = 2H \cdot R_0$  τότε προκύπτει η αδιάστατη μορφή της εξίσωσης Young-Laplace (εξίσωση 1-8):

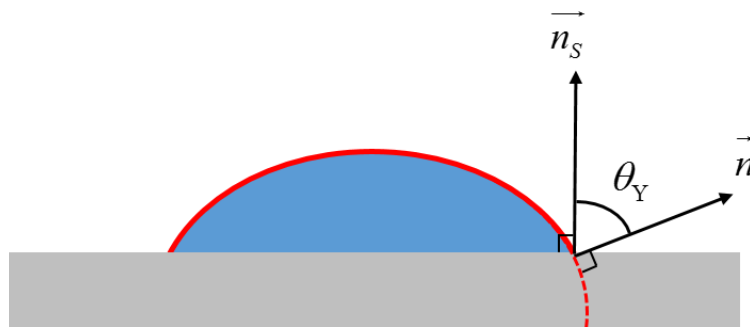
$$C = K \quad (1-8)$$

όπου  $C$ : αδιάστατη τοπική καμπυλότητα της διεπιφάνειας υγρού/περιβάλλοντος ρευστού

$K$ : αδιάστατη σταθερά πίεσης

Στο σημείο τριπλής επαφής (υγρό/περιβάλλον ρευστό/στερεό) ορίζονται δύο διανύσματα, το ένα κάθετο στην επιφάνεια της σταγόνας στο σημείο επαφής με το στερεό και το άλλο κάθετο στο στερεό,  $\vec{n}$  και  $\vec{n}_s$  αντίστοιχα (σχήμα 1.6). Στο σημείο τριπλής επαφής ισχύει η εξίσωση (1-9), η οποία αποτελεί την συνοριακή συνθήκη της εξίσωσης Young-Laplace, και υπαγορεύει της διαβρεκτικές ιδιότητες της στερεής επιφάνειας συσχετίζοντας τα δύο διανύσματα με την γωνία επαφής Young ως εξής:

$$\cos \theta_Y = \vec{n} \cdot \vec{n}_s. \quad (1-9)$$



Σχήμα 1.6: Διανύσματα  $\vec{n}$  και  $\vec{n}_s$  και η σχηματιζόμενη γωνία επαφής  $\theta_Y$

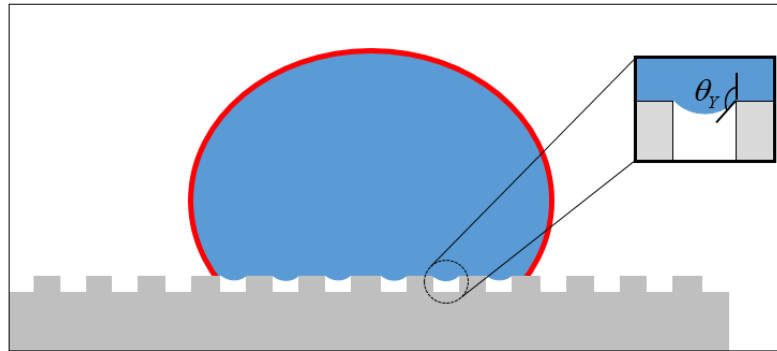
Η επίλυση της εξίσωσης Young-Laplace δίνει το σχήμα της σταγόνας και την διαφορά πίεσης μεταξύ του εσωτερικού της σταγόνας και του περιβάλλοντος ρευστού. Τονίζεται ότι η επίλυση της εξίσωσης δίνει το τελικό σχήμα ισορροπίας της σταγόνας και δεν μπορεί να περιγράψει την χρονική εξέλιξη του φαινομένου του απλώματος του υγρού στη στερεή επιφάνεια.

## 1.5. Επαυξημένη εξίσωση Young-Laplace

Μέχρι τώρα έχουν εξεταστεί περιπτώσεις σταγόνων που ισορροπούν σε ιδανικές επιφάνειες, χωρίς τραχύτητα. Παρακάτω θα μελετήσουμε τι συμβαίνει όταν η επιφάνεια στην οποία ισορροπεί η σταγόνα έχει μικροδομές ή νανοδομές, δηλαδή τραχύτητα.

Όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.7, το περιβάλλον ρευστό πλέον παγιδεύεται ανάμεσα στη σταγόνα και στο στερεό σχηματίζοντας φυσαλίδες ρευστού, με αποτέλεσμα να εμφανίζονται πολλαπλές τριπλές γραμμές επαφής. Το συγκεκριμένο φαινόμενο έχει παρατηρηθεί και πειραματικά<sup>7</sup>. Σε αυτή την περίπτωση τίθεται το πρόβλημα εφαρμογής

της συνοριακής συνθήκης Young σε τριπλές γραμμές επαφής που τόσο το πλήθος όσο και η θέση τους δεν είναι εκ των προτέρων γνωστές.



**Σχήμα 1.7: Επιφάνεια με τραχύτητα**

Σε αυτήν την εργασία χρησιμοποιείται μια επαυξημένη μορφή της εξίσωσης Young-Laplace<sup>8</sup>, η οποία πλέον διέπει και την διεπιφάνεια στερεού/υγρού, ενσωματώνοντας τις διαμοριακές αλληλεπιδράσεις στερεού/υγρού σε έναν όρο πίεσης αποσύνδεσης Derjaguin<sup>9</sup> (disjoining pressure), που προκύπτει από ένα δυναμικό τύπου Lennard-Jones. Με αυτόν τον τρόπο, μας δίνεται η δυνατότητα να λύσουμε την εξίσωση Young-Laplace για ολόκληρη την επιφάνεια της σταγόνας σε αντίθεση με την συμβατική Young-Laplace που η επίλυση πραγματοποιείται μόνο μέχρι το σημείο τριπλής επαφής (Σχήμα 1.8 & Σχήμα 1.9). Έτσι, οι διεπιφάνειες στερεού/υγρού και υγρού/περιβάλλοντος ρευστού αντιμετωπίζονται σε ένα ενιαίο πλαίσιο, ως μια διεπιφάνεια.

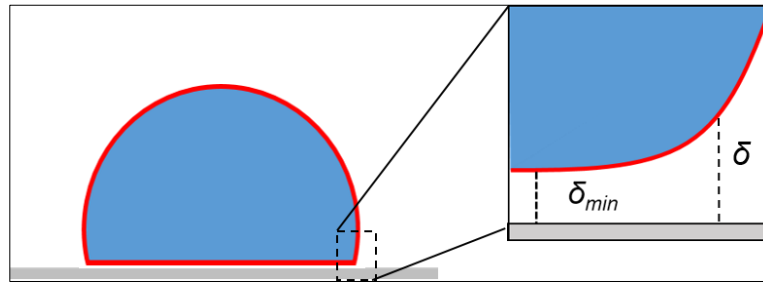


**Σχήμα 1.8: Λύση της συμβατικής Young-Laplace**      **Σχήμα 1.9: Λύση της επαυξημένης Young-Laplace**

Ο όρος της πίεσης Derjaguin περιέχει τις ελκτικές και απωστικές αλληλεπιδράσεις που οφείλονται σε δυνάμεις Van der Waals καθώς και τις ηλεκτροστατικές δυνάμεις λόγω της επικάλυψης ηλεκτρικών διπλοστοιβάδων<sup>10</sup>. Η αδιάστατη πίεση Derjaguin έχει τη μορφή (εξίσωση 1-10):

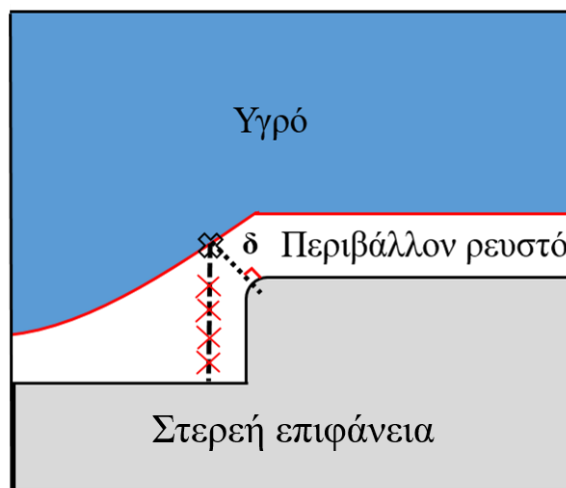
$$\frac{R_0}{\gamma_{LV}} p^{LS}(\delta) = w^{LS} \left[ \left( \frac{\sigma}{\delta + \varepsilon} \right)^{C_1} - \left( \frac{\sigma}{\delta + \varepsilon} \right)^{C_2} \right] \quad (1-10)$$

Οι δυνάμεις αλληλεπιδράσης που εκφράζονται μέσω της πίεσης  $p^{LS}$  είναι συνάρτηση της απόστασης  $\delta$  του στερεού από το υγρό. Στην περίπτωση λείων στερεών επιφανειών η απόσταση  $\delta$  ορίζεται ως η κατακόρυφη απόσταση του υγρού από το στερεό (Σχήμα 1.10).



Σχήμα 1.10: Απόσταση  $\delta$  σε λείες επιφάνειες

Όμως, στην περίπτωση στερεής επιφάνειας με τραχύτητα (Σχήμα 1.11), ο ορισμός της απόστασης  $\delta$  δεν είναι τόσο προφανής. Για αυτό το λόγο ως απόσταση  $\delta$  ορίζεται η Ευκλείδεια απόσταση του σημείου του υγρού από το στερεό, όπως αυτή προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης Eikonal. [βλ. Παράρτημα Α].



Σχήμα 1.11: Απόσταση  $\delta$  σε τραχιές επιφάνειες

Η παράμετρος  $w^{LS}$  είναι μια αδιάστατη παράμετρος που καθορίζει τις διαβρεκτικές ιδιότητες του στερεού (υδρόφιλη ή υδρόφοβη επιφάνεια) και αντικαθιστά πλέον την γωνία



Young. Η αύξηση της παραμέτρου  $w^{LS}$  οδηγεί σε μικρότερες γωνίες επαφής (πιο υδρόφιλες στερεές επιφάνειες).

Η συσχέτιση της γωνίας Young με την αδιάστατη παράμετρο διαβρεκτικότητας  $w^{LS}$  προκύπτει από την εξίσωση των Frumkin-Derjaguin<sup>8,11</sup> (εξίσωση 1-11):

$$\cos \theta_Y = \frac{\omega_{min}}{\gamma_{LS}} - 1 \quad (1-11)$$

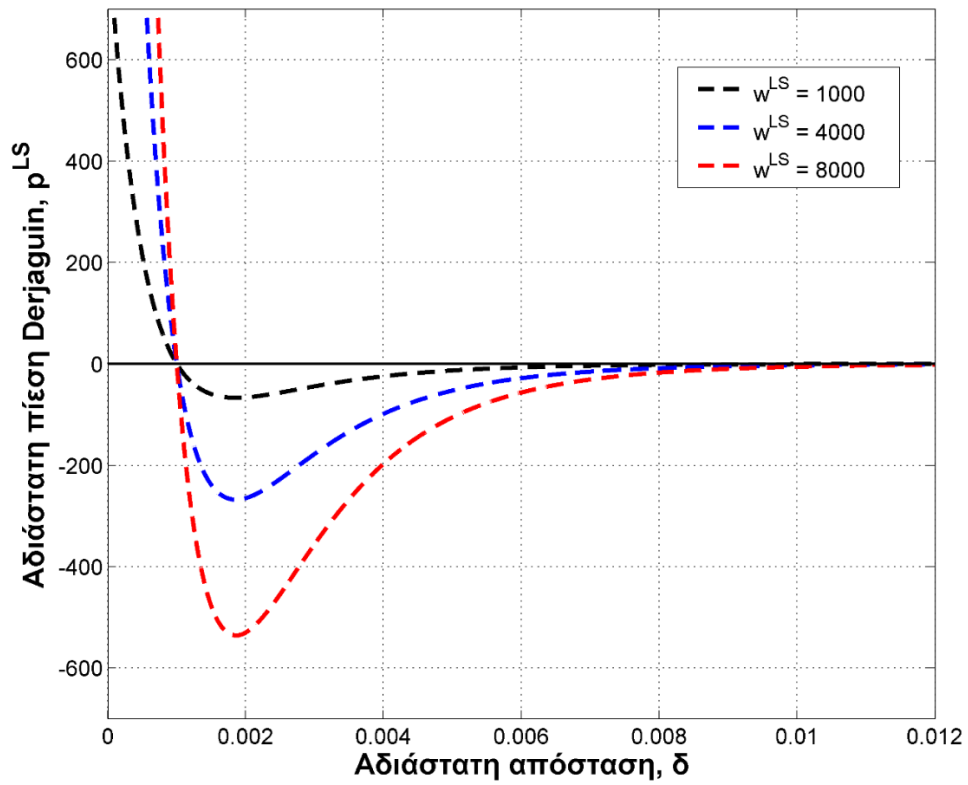
όπου το  $\omega_{min}$  είναι η ελάχιστη τιμή ενός διεπιφανειακού δυναμικού  $\omega$ , που εκφράζει την ελεύθερη ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας που απαιτείται ώστε να διατηρηθεί μια απόσταση μήκους  $\delta$  ανάμεσα στην επιφάνεια του υγρού και την επιφάνεια του στερεού. Το δυναμικό  $\omega$  συνδέεται με την πίεση Derjaguin ως εξής (εξίσωση 1-12):

$$p^{LS} = -\frac{d\omega}{d\delta} \quad (1-12)$$

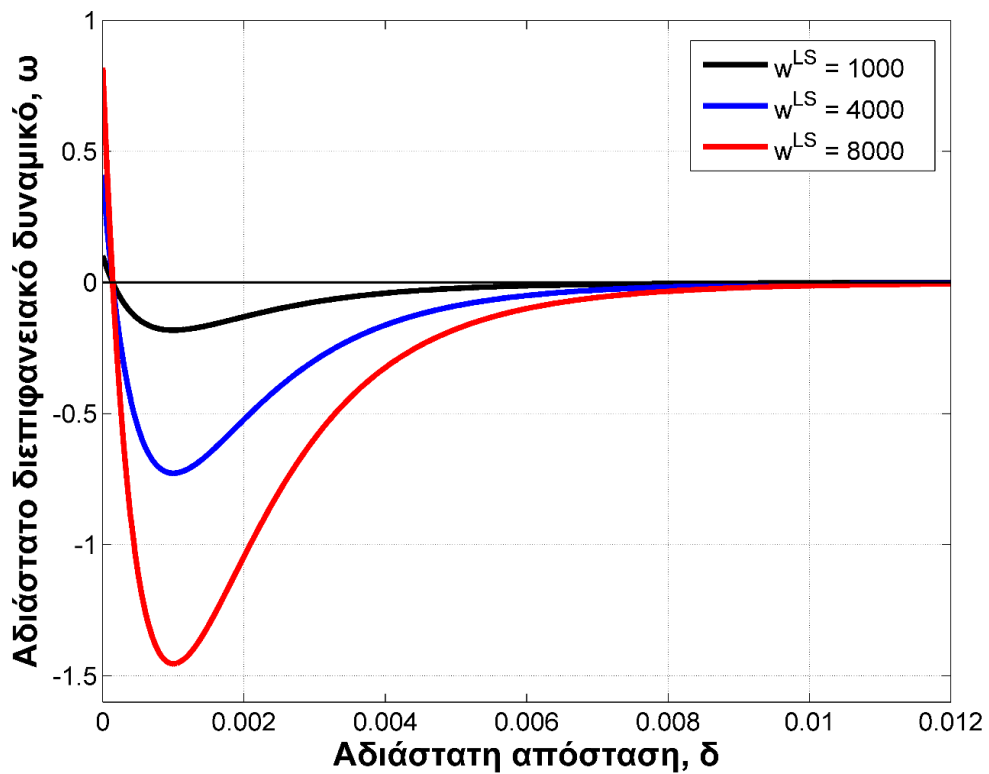
και λαμβάνει την ελάχιστη του τιμή,  $\omega_{min}$ , στην απόσταση  $\delta_{min}$ , όπου  $p^{LS} = 0$ . Συνδυάζοντας τις εξισώσεις (1-11) και (1-12), προκύπτει η μονοσήμαντη συσχέτιση  $w^{LS} - \theta_Y$  (εξίσωση 1-13) :

$$w^{LS} = \frac{(C_1 - 1)(C_2 - 1)(1 + \cos \theta_Y)}{\sigma(C_1 - C_2)} \quad (1-13)$$

Στα σχήματα 1.12 και 1.13 απεικονίζονται αντίστοιχα η εξάρτηση της αδιάστης πίεσης Derjaguin και του αδιάστατου διεπιφανειακού δυναμικού από την αδιάστατη απόσταση  $\delta$ , για διάφορες τιμές της παραμέτρου διαβρεκτικότητας  $w^{LS}$ . Παρατηρείται και στα δύο σχήματα ότι καθώς η παράμετρος διαβρεκτικότητας  $w^{LS}$  αυξάνεται, τόσο «βαθαίνει» και το πηγάδι της ενέργειας.



Σχήμα 1.12: Εξάρτηση της αδιάστατης πίεσης Derjaguin από την αδιάστατη απόσταση  $\delta$ , για διάφορες τιμές  $w^{LS}$ .  $C_1 = 12$ ,  $C_2 = 10$ ,  $\sigma = 9 \cdot 10^{-3}$ ,  $\varepsilon = 8 \cdot 10^{-3}$



Σχήμα 1.13: Εξάρτηση του αδιάστατου διεπιφανειακού δυναμικού  $\omega$  από την αδιάστατη απόσταση  $\delta$ , για διάφορες τιμές του  $w^{LS}$ .  $C_1 = 12$ ,  $C_2 = 10$ ,  $\sigma = 9 \cdot 10^{-3}$ ,  $\varepsilon = 8 \cdot 10^{-3}$

Οι παράμετροι  $C_1, C_2$  ελέγχουν το εύρος των δυνάμεων αλληλεπίδρασης υγρού/στερεού και η παράμετρος  $\sigma$  ελέγχει την ελάχιστη απόσταση μεταξύ υγρού και στερεού. Ειδικότερα, στην προσέγγιση μας θεωρούμε ότι η σταγόνα δεν αγγίζει την επιφάνεια του στερεού αλλά απέχει από το στερεό μια ελάχιστη απόσταση  $\delta_{min}$  (εξίσωση 1-14) ίση με:

$$\delta_{min} = R_0 (\sigma - \varepsilon) \quad (1-14)$$

Έτσι, προσθέτοντας τον επιπλέον όρο της πίεσης αποσύνδεσης στην εξίσωση Young-Laplace, προκύπτει η επαυξημένη εξίσωση Young-Laplace (εξίσωση 1-15) όπως φαίνεται παρακάτω:

$$C = K \Rightarrow$$

$$C + \frac{R_0}{\gamma_{LV}} p^{LS} = K \quad (1-15)$$

όπου τα μεγέθη που παρίστανται είναι ίδια με τα μεγέθη της συμβατικής εξίσωσης Young-Laplace (βλ. Παράγραφο 1.3) Τέλος το  $\varepsilon$  είναι μια σταθερά που χρησιμοποιείται για την αποφυγή αριθμητικών σφαλμάτων καθώς το  $\delta \rightarrow 0$ .

Αξίζει να αναφερθεί πως η πίεση Derjaguin μπορεί να εκφραστεί και με διαφορετικούς τρόπους, όπως για παράδειγμα<sup>12</sup> (εξίσωση 1-16):

$$\frac{R_0}{\gamma_{LV}} p^{LS}(\delta) = w^{LS} \frac{l_0^2 + \delta l_0 - \delta^2}{\delta^2 l_0} \exp\left(-\frac{\delta}{l_0}\right) \quad (1-16)$$

όπου η παράμετρος  $l_0$  ρυθμίζει την ελάχιστη απόσταση μεταξύ στερεού και υγρού,  $\delta_{min}$ . Τα υπόλοιπα μεγέθη που απεικονίζονται είναι τα ίδια με παραπάνω.

Έτσι, επαυξάνοντας την εξίσωση Young-Laplace με τον επιπλέον αδιάστατο όρο της πίεσης Derjaguin και χρησιμοποιώντας μια ειδική παραμετροποίηση του μήκους τόξου της σταγόνας (βλ. Κεφ.2, Παρ.2.1.3), η γωνία επαφής της σταγόνας με το στερεό προκύπτει ως αποτέλεσμα της αλληλεπίδρασης της πίεσης Derjaguin και των τριχοειδών δυνάμεων.

## 1.6. Δυναμική συμπεριφορά σταγόνων

Μέχρι τώρα αναφερθήκαμε σε συστήματα στα οποία δεν μας απασχολούσε η χρονική τους εξέλιξη παρά μόνο η κατάσταση τους στην ισορροπία. Προκειμένου όμως να μελετήσουμε διεξοδικά τα φαινόμενα διαβροχής κρίνεται απαραίτητη η μελέτη δυναμικών συστημάτων και η παρακολούθηση της χρονικής τους εξέλιξης. Η μελέτη αυτή αποτελεί χρήσιμο εργαλείο για την ανάπτυξη εφαρμογών στις οποίες εμφανίζονται φαινόμενα διαβροχής, όπως για παράδειγμα μετακίνηση σταγόνων σε μικρο-εργαστηριακές μονάδες (lab-on-a-chip).

Η επικρατούσα προσέγγιση στη μοντελοποίηση φαινομένων διαβροχής είναι το υδροδυναμικό μοντέλο, που ανήκει στις μεθόδους συνεχούς μέσου. Σύμφωνα με τη βιβλιογραφία<sup>13</sup>, στο υδροδυναμικό μοντέλο αρχικά δοκιμάστηκε η κλασική προσέγγιση μοντελοποίησης ροής ρευστών εφαρμόζοντας μια συνοριακή συνθήκη μη ολίσθησης στο σημείο επαφής της σταγόνας με το στερεό (no slip), η οποία διαπιστώθηκε ότι οδηγούσε σε ασυνέχειες (singularities) στη διατμητική τάση στο σημείο τριπλής επαφής. Αργότερα, προτάθηκε η εφαρμογή κάποιας συνοριακής συνθήκης για την γωνία επαφής σε συνδυασμό με μια συνθήκη ολίσθησης της επιφάνειας της σταγόνας στην περιοχή του στερεού<sup>13</sup>. Ως συνοριακή συνθήκη που αφορά την γωνία επαφής της σταγόνας με το στερεό μπορεί να χρησιμοποιηθεί μια εμπειρική εξίσωση που συνδέει την ταχύτητα της γραμμής επαφής με την δυναμική γωνία επαφής<sup>14,15</sup> (π.χ Cox-Voinov). Ακόμα, η γωνία επαφής με το στερεό μπορεί να θεωρηθεί σταθερή και ίση με την στατική γωνία επαφής όπως ορίζεται από την εξίσωση Young<sup>16</sup> (βλ. εξίσωση 1-4). Παρόλο που το τροποποιημένο υδροδυναμικό μοντέλο καταφέρνει να προσομοιώσει ρεαλιστικά τα φαινόμενα διαβροχής σε ιδανικές επιφάνειες, κρίνεται ακατάλληλο για τη μελέτη διαβροχής επιφανειών με τραχύτητα, όπου το πλήθος και η θέση των τριπλών γραμμών επαφής δεν είναι εκ των προτέρων γνωστά.

Εναλλακτικές προσεγγίσεις μοντελοποίησης των προβλημάτων δυναμικής διαβροχής περιλαμβάνουν μεσοσκοπικές μεθόδους<sup>17</sup> (lattice-Boltzmann) και μοριακές προσομοιώσεις<sup>18</sup>.

Σε αντίθεση με τις μεθόδους συνεχούς μέσου, οι μεσοσκοπικές μέθοδοι lattice-Boltzmann και οι μοριακές προσομοιώσεις αίρουν την ανάγκη εφαρμογής κάποιας συνοριακής συνθήκης στην περιοχή επαφής του υγρού με το στερεό<sup>18,19</sup>. Αντί συνοριακής συνθήκης, χρησιμοποιείται κάποιο διαμοριακό δυναμικό για να ποσοτικοποιηθούν οι

αλληλεπιδράσεις στερεού-υγρού (π.χ τύπου Lennard-Jones). Παρόλο που αυτές οι μέθοδοι αυτοί έχουν οδηγήσει σε βαθύτερη κατανόηση των φαινομένων διαβροχής, αντιμετωπίζουν σοβαρούς υπολογιστικούς περιορισμούς όταν εξετάζονται συστήματα ρεαλιστικού μεγέθους (π.χ σταγόνες με ακτίνα της τάξης του χιλιοστού).

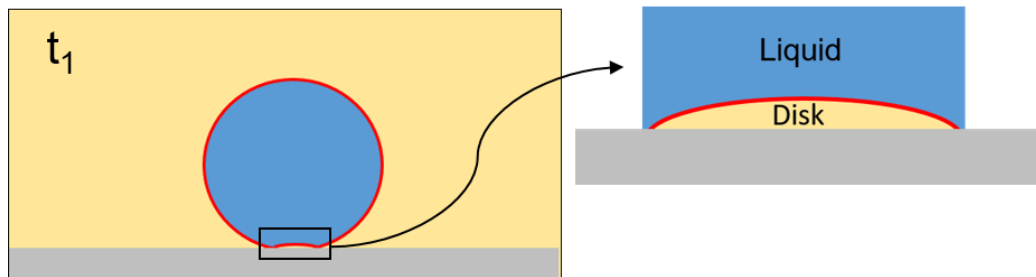
## 1.7. Μηχανισμοί παγίδευσης περιβάλλουσας φάσης

Κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες, μια σταγόνα που προσκρούει κάθετα σε μια στερεή επιφάνεια μπορεί να παγιδεύσει μια ποσότητα περιβάλλοντος ρευστού. Το φαινόμενο της παγίδευσης περιβάλλοντος ρευστού κατά την πρόσκρουση σταγόνων σε στερεές επιφάνειες ή σε άλλα υγρά έχει μελετηθεί αρκετά στη βιβλιογραφία. Η πειραματική μελέτη των Chandra και Avedisian (1991)<sup>20</sup> αποτελεί την πρώτη αναφορά σε παγίδευση ρευστού κατά την πρόσκρουση σταγόνας σε στερεή επιφάνεια. Αργότερα οι Pasandideh-Fard et al (1996)<sup>21</sup> παρατήρησαν το φαινόμενο χρησιμοποιώντας υπολογιστικές προσομοιώσεις (Volume of Fluids, VOF). Οι Thoroddsen και Sakakibara (1998)<sup>22</sup> παρατήρησαν το ίδιο είδος παγίδευσης σε πειράματα και έδωσαν πιο λεπτομερείς θεωρητικές εξηγήσεις για τον μηχανισμό της δημιουργίας της φυσαλίδας. Ακολούθησαν αρκετές μελέτες όπως η εργασία των Fujimoto et al (2000)<sup>23</sup>, που διερεύνησαν πειραματικά την πρόσκρουση μια σταγόνας νερού σε στερεή επιφάνεια σε περιβάλλον αέρα και η εργασία των Mehdi-Nejad et al (2003)<sup>24</sup> που προσομοίωσαν υπολογιστικά την παγίδευση φυσαλίδων αέρα χρησιμοποιώντας την μέθοδο VOF, για τρεις τύπους σταγόνων (νερό, κ-επτάνιο, λιωμένο νικέλιο) κατά την πρόσκρουση τους σε στερεή επιφάνεια. Τέλος, αξίζει να αναφερθεί η υπολογιστική εργασία των Huang et al (2009)<sup>25</sup>, που μελέτησαν το φαινόμενο της πρόσκρουσης μιας σταγόνας σε μια στερεή επιφάνεια σε περιβάλλον υγρού χρησιμοποιώντας την μέθοδο lattice-Boltzmann. Η σταγόνα και το περιβάλλον ρευστό θεωρήθηκαν μη αναμίξιμα ρευστά.

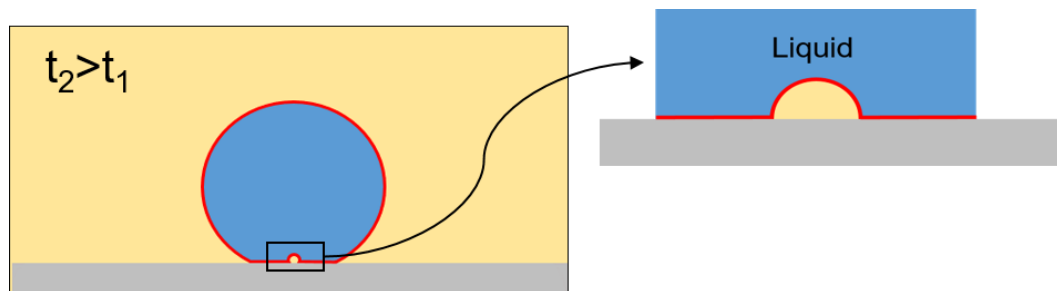
Συγκεκριμένα στις παραπάνω εργασίες έχουν παρατηρηθεί δύο διαφορετικοί μηχανισμοί παγίδευσης:

Στην πρώτη περίπτωση, για χαμηλές ταχύτητες πρόσκρουσης, καθώς η σταγόνα πλησιάζει την στερεή επιφάνεια, η πίεση του λεπτού στρώματος περιβάλλοντος ρευστού ανάμεσα στη σταγόνα και στη στερεή επιφάνεια αυξάνεται ραγδαία. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την παραμόρφωση του κάτω μέρους της σταγόνας σε σχήμα λοβού κάτι που παρεμποδίζει προσωρινά την επαφή της σταγόνας με το στερεό. Έπειτα, η πίεση του στρώματος

περιβάλλοντος ρευστού μειώνεται και η σταγόνα έρχεται σε επαφή με το στερεό σε πολλαπλά σημεία, σχηματίζοντας ένα δακτύλιο επαφής, που παγιδεύει ένα λεπτό δίσκο περιβάλλοντος ρευστού (σχήμα 1.14). Ο δίσκος του περιβάλλοντος ρευστού συστέλλεται απότομα σε φυσαλίδα ώστε να ελαχιστοποιηθεί η επιφανειακή του ενέργεια και μετακινείται προς το κέντρο της σταγόνας, κοντά στον άξονα συμμετρίας (σχήμα 1.15). Για τους σκοπούς αυτής της εργασίας ας ονομάσουμε αυτό το είδος παγίδευσης, παγίδευση κεντρικής φυσαλίδας.

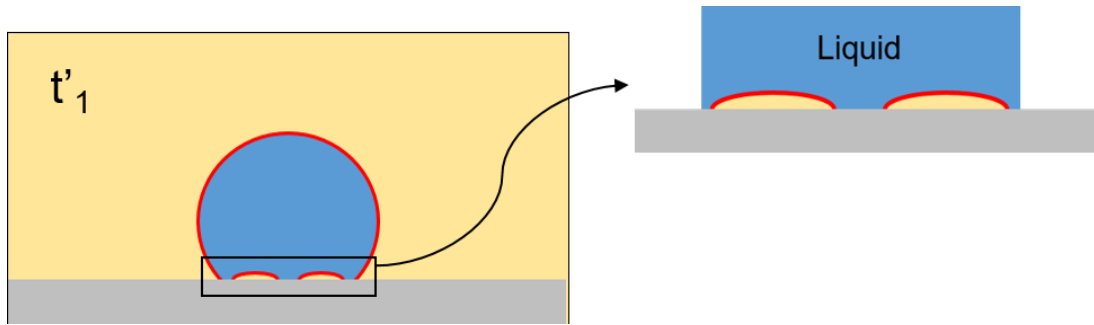


Σχημα 1.14: Η παγιδευμένη περιβάλλουσα φάση σχηματίζει ένα δίσκο.

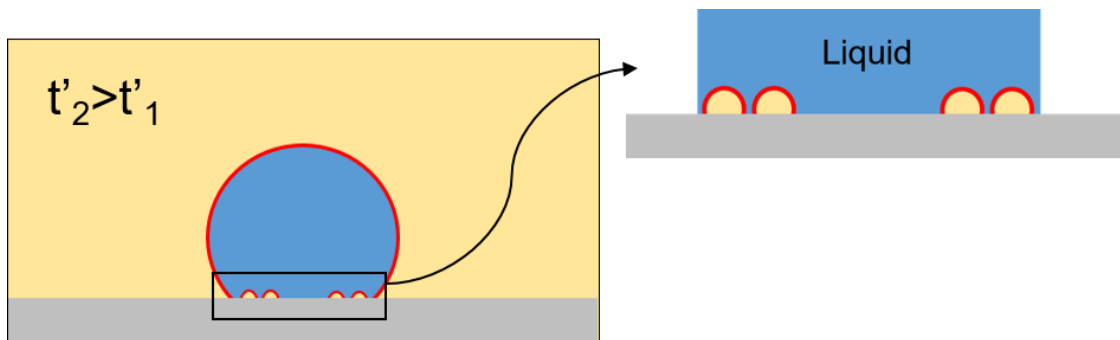


Σχημα 1.15: Ο δίσκος συστέλλεται σε φυσαλίδα και παραμένει κοντά στον άξονα συμμετρίας.

Στη δεύτερη περίπτωση, για υψηλότερες ταχύτητες πρόσκρουσης, η παγίδευση της περιβάλλουσας φάσης δε συμβαίνει τη στιγμή της πρόσκρουσης της σταγόνας με το στερεό, αλλά αργότερα. Αφού η σταγόνα έχει έρθει σε επαφή με το στερεό και έχει ξεκινήσει να απλώνει, τότε «καλύπτει» κατά το άπλωμα της μια ποσότητα περιβάλλουσας φάσης, η οποία στιγμιαία σχηματίζει σχήμα δίσκου (σχήμα 1.16). Όμως, αυτή η ποσότητα έχει πολύ μεγαλύτερο όγκο από την περίπτωση της παγίδευσης κεντρικής φυσαλίδας, κάτι που την καθιστά ενεργειακά ασταθή. Έτσι, μη μπορώντας να διατηρήσει το σχήμα της, καταρρέει και διαχωρίζεται σε παραπάνω από μια φυσαλίδες, όχι απαραίτητως και του ίδιου μεγέθους (σχήμα 1.17). Για τους σκοπούς αυτής της εργασίας ας ονομάσουμε αυτό το είδος παγίδευσης, παγίδευση περιβάλλουσας φάσης κατά το άπλωμα της σταγόνας.



Σχήμα 1.16: Στιγμαίοι δίσκοι παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης



Σχήμα 1.17: Φουσαλίδες που πρόερχονται από την κατάρρευση των στιγμαίων δίσκων

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΔΙΑΒΡΟΧΗΣ

Σε αυτό το κεφάλαιο περιγράφονται οι μέθοδοι μοντελοποίησης των φαινομένων διαβροχής που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτήν την εργασία. Στο πρώτο μέρος του κεφαλαίου αναλύονται οι διάφορες εναλλακτικές για την παραμετροποίηση της γεωμετρίας του σχήματος της σταγόνας στην ισορροπία. Επιπλέον, αναφέρονται οι εξισώσεις και οι συνοριακές συνθήκες που περιγράφουν το πρόβλημα, αναλόγως το είδος της παραμετροποίησης της γεωμετρίας. Στο δεύτερο μέρος, παρουσιάζεται η μοντελοποίηση που ακολουθήθηκε για την περιγραφή της δυναμικής συμπεριφοράς των φαινομένων διαβροχής.

### 2.1. Μοντελοποίηση διαβροχής στην ισορροπία

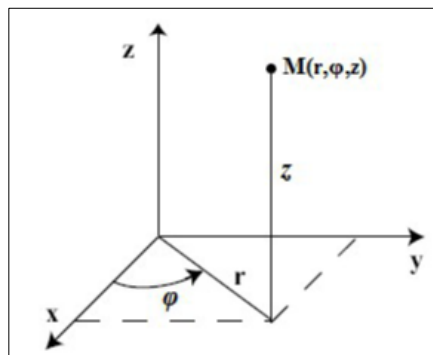
Προηγουμένως αναφερθήκαμε στο πρόβλημα της θερμοδυναμικής ισορροπίας μιας σταγόνας σε στερεή επιφάνεια. Σε αυτήν την παράγραφο ακολουθεί μια συνοπτική παρουσίαση τριών διαφορετικών μεθόδων παραμετροποίησης του σχήματος μιας αξονοσυμμετρικής σταγόνας –παραμετροποίηση σε κυλινδρικές και σφαιρικές συντεταγμένες και παραμετροποίηση μήκους τόξου – και διατυπώνεται το μαθηματικό πρόβλημα της ισορροπίας της σταγόνας (εξισώσεις και συνοριακές συνθήκες) για κάθε είδος παραμετροποίησης. Η έκφραση του προβλήματος σε σφαιρικές ή κυλινδρικές συντεταγμένες κρίνεται επαρκής για σταγόνες που ισορροπούν σε λεία επίπεδα. Όμως, στην περίπτωση που η στερεή επιφάνεια έχει μικροδομή τότε σε κυλινδρικές συντεταγμένες μια τιμή της συντεταγμένης  $\varphi$  μπορεί να αντιστοιχίζεται σε παραπάνω από μια τιμές της  $r$ -συντεταγμένης. Αντίστοιχα σε σφαιρικές συντεταγμένες, μια τιμή της  $\theta$ -συντεταγμένης μπορεί να αντιστοιχίζεται σε παραπάνω από μια τιμές της  $r$ -συντεταγμένης. Το τελευταίο πρόβλημα αντιμετωπίζεται επιτυχώς με την παραμετροποίηση μήκους τόξου, όπου το μήκος τόξου  $s$ , αυξάνεται μονότονα κατά μήκος της επιφάνειας της σταγόνας. Λόγω του τελευταίου, στην παραμετροποίηση μήκους τόξου γίνεται ειδική μνεία στη διατύπωση του προβλήματος και για την περίπτωση της επαυξημένης Young-Laplace.



## 2.1.1. Παραμετροποίηση αξονοσυμμετρικής σταγόνας σε κυλινδρικές συντεταγμένες

### 2.1.1.1. Κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων και διανύσματα βάσης

Σε σύστημα κυλινδρικών συντεταγμένων η θέση ενός σημείου  $M$  στον τρισδιάστατο χώρο καθορίζεται από μια διατεταγμένη τριάδα  $(r, \varphi, z)$  πραγματικών αριθμών που ονομάζονται κυλινδρικές συντεταγμένες. Τα  $r$  και  $\varphi$  ονομάζονται πολικές συντεταγμένες του σημείου  $M$  στο καρτεσιανό επίπεδο  $xy$  και το  $z$  είναι η κατακόρυφη ορθογώνια συντεταγμένη του (Σχήμα 2.1).



Σχήμα 2.1: Σύστημα κυλινδρικών συντεταγμένων

Προκειμένου να επιστρέψουμε σε καρτεσιανές συντεταγμένες ο μετασχηματισμός που γίνεται είναι (εξισώσεις 2-1, 2-2, 2-3):

$$x = r \cdot \cos\varphi \quad (2-1)$$

$$y = r \cdot \sin\varphi \quad (2-2)$$

$$z = z \quad (2-3)$$

Λόγω της αξονικής συμμετρίας που υπάρχει στο συγκεκριμένο πρόβλημα (ο  $z$ -άξονας είναι ο άξονας συμμετρίας), θεωρούμε ότι η λύση του προβλήματος θα είναι ακριβώς η ίδια για την κάθε τιμή της συντεταγμένης  $\varphi$  (π.χ  $\varphi=0$ ). Πλέον το τρισδιάστατο σύστημα συντεταγμένων «εκφυλίζεται» σε μια δισδιάστατη προβολή πάνω στο επίπεδο  $xz$ .

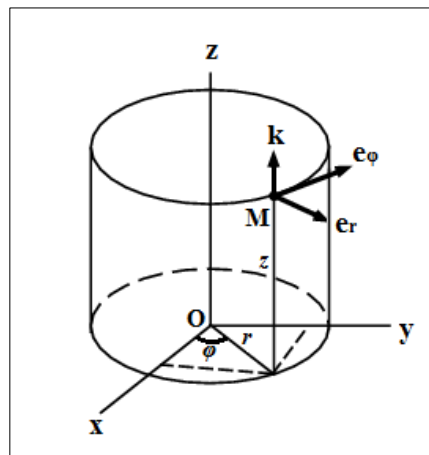
Ορίζονται επιπλέον και τα κυλινδρικά διανύσματα βάσης  $(\vec{e}_r, \vec{e}_\varphi, \vec{k})$ , που δείχνουν την κατεύθυνση αύξησης των τιμών των κυλινδρικών συντεταγμένων  $(r, \varphi, z)$  αντίστοιχα (σχήμα 2.2) Οι εξισώσεις μετατροπής των διανυσμάτων βάσης από το

κυλινδρικό στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων  $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$  είναι οι εξής εξισώσεις (εξισώσεις 2-4, 2-5, 2-6):

$$\vec{i} = \cos \varphi \vec{e}_r - \sin \varphi \vec{e}_\varphi \xrightarrow{\varphi=0} \vec{i} = \vec{e}_r \quad (2-4)$$

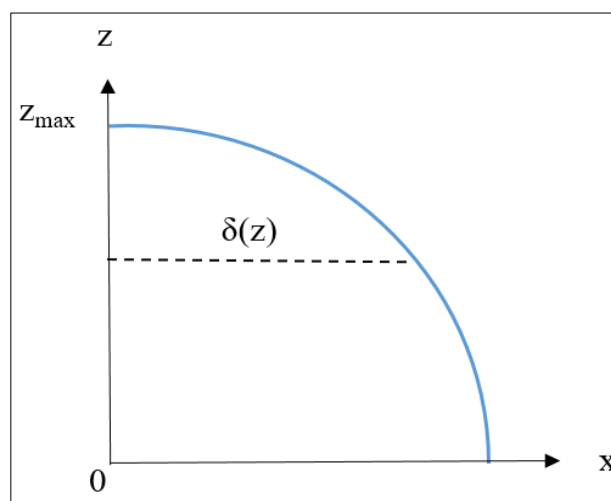
$$\vec{j} = \sin \varphi \vec{e}_r + \cos \varphi \vec{e}_\varphi \xrightarrow{\varphi=0} \vec{j} = \vec{e}_\varphi \quad (2-5)$$

$$\vec{k} = \vec{k} \quad (2-6)$$



Σχήμα 2.2: Διανύσματα βάσης κυλινδρικών συντεταγμένων

Έτσι στο επίπεδο  $xz$ , ένα σημείο της επιφάνειας της σταγόνας δίνεται ως η οριζόντια απόσταση  $\delta(z)$  της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας, από τον κατακόρυφο άξονα συμμετρίας  $z$  (Σχήμα 2.3).



Σχήμα 2.3: Παραμετροποίηση της σταγόνας σε κυλινδρικές συντεταγμένες

### 2.1.1.2. Διέπουσες εξισώσεις

Προκειμένου να επιλυθεί το πρόβλημα της ισορροπίας της σταγόνας στο λείο επίπεδο επιλύονται ταυτόχρονα:

- 1) Η αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης Young-Laplace (εξίσωση 2-7)
- 2) Η αδιάστατη ολοκληρωτική εξίσωση διατήρησης του όγκου της σταγόνας (εξίσωση 2-9)
- 3) Η αδιάστατη μορφή της εξίσωσης του κατακόρυφου επιπέδου, δηλαδή του άξονα  $z$  (εξίσωση 2-10)

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση Young-Laplace (βλ εξίσωση 1-8, Κεφ. 1, Παρ.4) την αδιάστατη μορφή της μέσης τοπικής καμπυλότητας υπολογισμένη σε κυλινδρικές συντεταγμένες, προκύπτει η εξίσωση (2-7) που συσχετίζει την αδιάστατη απόσταση  $\delta(z)$  με την αδιάστατη σταθερά πίεσης  $K$ . Το πρόβλημα έχει έναν επιπλέον άγνωστο, το μέγιστο ύψος της σταγόνας,  $z_{max}$ , που ισούται με την μέγιστη απόσταση  $z$  των κυλινδρικών συντεταγμένων.

$$K = -\frac{1}{\delta(1+\delta_z^2)^{1/2}} + \frac{\delta_{zz}}{(1+\delta_z^2)^{3/2}} \quad (2-7)$$

$$\text{όπου } \delta_z = \frac{d\delta}{dz} \text{ και } \delta_{zz} = \frac{d\delta_z}{dz} = \frac{d^2\delta}{dz^2}$$

Επιπλέον, η διαστατική εξίσωση του όγκου της σταγόνας σε κυλινδρικές συντεταγμένες είναι<sup>26</sup> (εξίσωση 2-8):

$$V_{droplet} = R_0^3 \pi \int_0^{z_{max}} \delta^2 dz \quad (2-8)$$

όπου  $V_{droplet}$  ο διαστατικός όγκος της σταγόνας και  $R_0$  ένα διαστατικό χαρακτηριστικό μήκος.

Αν ο διαστατικός όγκος της σταγόνας θεωρηθεί ίσος με τον όγκο σφαίρας ακτίνας  $R_0$ , και έπειτα διαιρεθεί με τον όγκο ενός κυλίνδρου ύψους  $R_0$  και ακτίνας  $R_0$  για να αδιαστατοποιηθεί, προκύπτει τελικά η αδιάστατη εξίσωση διατήρησης του όγκου σε σφαιρικές συντεταγμένες (εξίσωση 2-9):

$$V_{droplet} = V_{sphere} \rightarrow \pi R_0^3 \int_0^{z_{max}} \delta^2 dz = \frac{4}{3} \pi R_0^3 \xrightarrow{\div V_{cylinder}}$$

$$\frac{V_{droplet}}{V_{cylinder}} = \frac{V_{sphere}}{V_{cylinder}} \rightarrow \frac{\pi R_0^3 \int_0^{z_{max}} \delta^2 dz}{\pi R_0^3} = \frac{\frac{4}{3} \pi R_0^3}{\pi R_0^3} \rightarrow$$

$$\int_0^{z_{max}} \delta^2 dz = \frac{4}{3} \quad (2-9)$$

Τέλος, η εξίσωση κατακόρυφου επιπέδου που θα χρησιμοποιήσουμε είναι της μορφής  $x = 0$  σε καρτεσιανές συντεταγμένες και μετασχηματίζοντας την σε κυλινδρικές συντεταγμένες προκύπτει (εξίσωση 2-10):

$$r = 0 \quad (2-10)$$

### 2.1.1.3. Συνοριακές συνθήκες

Στο πρόβλημα εφαρμόζονται οι παρακάτω συνοριακές συνθήκες (εξισώσεις 2-11, 2-12):

- $\delta_z = 0$ , στο  $z = z_{max}$  (2-11)

δηλαδή η μεταβολή της κάθετης απόστασης  $\delta$  στο σημείο  $z = z_{max}$  είναι μηδέν και

- $\vec{n} \cdot \vec{n}_s = \cos \theta_Y$ , στο  $z = 0$  (2-12)

δηλαδή η γωνία που σχηματίζουν στο σημείο επαφής της σταγόνας με το στερεό, τα κάθετα διανύσματα στην επιφάνεια της σταγόνας ( $\vec{n}$ ) και στο στερεό ( $\vec{n}_s$ ) αντίστοιχα είναι ίση με την γωνία επαφής Young (βλ. Κεφ.1, Παρ.3). Υπολογίζοντας το  $\vec{n}$  σε κυλινδρικές συντεταγμένες:

$$\vec{n} = \frac{1}{(1 + \delta_z^2)^{1/2}} \vec{e}_r + \frac{-\delta_z}{(1 + \delta_z^2)^{1/2}} \vec{k} \quad (2-13)$$

$$\text{Ακόμα, το } \vec{n}_s = -\frac{f_x}{|\vec{n}_s|} \vec{e}_r + \frac{1}{|\vec{n}_s|} \vec{k} \quad (2-14)$$

όπου:  $f_x = \frac{df}{dx}$  η παράγωγος ως προς  $x$  της συνάρτησης  $f(x)$  του επιπέδου που ισορροπεί η σταγόνα.

$$\text{Για επίπεδο χωρίς κλίση η } f_x = 0 \text{ και συνεπώς το } \vec{n}_s = \frac{1}{|\vec{n}_s|} \vec{k}. \quad (2-15)$$

Πραγματοποιώντας τον πολλαπλασιασμό των κάθετων διανυσμάτων τελικά προκύπτει:

$$-\frac{\delta_z}{(1 + \delta_z^2)^{1/2}} = \cos \theta_Y \text{ στο } z=0 \quad (2-16)$$

#### 2.1.1.4. Μετασχηματισμός στο υπολογιστικό χωρίο [0,1]

Το πραγματικό χωρίο επίλυσης του προβλήματος είναι το D, ένα ευθύγραμμο τμήμα με  $z \in [0, z_{\max}]$ . Όπως είναι φανερό το χωρίο επίλυσης του προβλήματος δεν είναι πλήρως ορισμένο, εφόσον το  $z_{\max}$  προκύπτει από την επίλυση του συστήματος εξισώσεων. Για αυτό το λόγο το πρόβλημα ισορροπίας της σταγόνας ονομάζεται πρόβλημα «ελευθέρου συνόρου».

Προκειμένου να επιλυθεί το πρόβλημα, το πραγματικό χωρίο επίλυσης μετασχηματίζεται σε ένα υπολογιστικό χωρίο επίλυσης. Έτσι η ανεξάρτητη μεταβλητή  $z$  μετασχηματίζεται σε μία νέα μεταβλητή  $x$  (εξίσωση 2-17) όπου:

$$x = \frac{z}{z_{\max}} \quad (2-17)$$

$$\text{με } dz = z_{\max} dx \quad (2-18)$$

και το νέο χωρίο επίλυσης είναι το [0,1].

Εφαρμόζοντας τον κανόνα αλυσίδας του Leibniz στις εξισώσεις (2-17), (2-18) έχουμε:

$$\delta_z = \frac{d\delta}{dz} = \frac{d\delta}{dx} \cdot \frac{dx}{dz} = \frac{\delta_x}{z_x} = \frac{\delta_x}{z_{\max}} \Leftrightarrow \delta_z = \frac{\delta_x}{z_{\max}} \quad (2-19)$$

$$\delta_{zz} = \frac{d\delta_z}{dz} = \frac{d\delta_z}{dx} \cdot \frac{dx}{dz} = \frac{\delta_{zx}}{z_x} = \frac{\delta_{zx}}{z_{\max}} \Leftrightarrow \delta_{zz} = \frac{\delta_{zx}}{z_{\max}} \quad (2-20)$$

και αντικαθιστώντας τις (2-17), (2-18) στις (2-7),(2-9), προκύπτουν οι μετασχηματισμένες εξισώσεις (2-21) και (2-22):

$$K = -\frac{1}{\delta \left( 1 + \left( \frac{\delta_x}{z_{\max}} \right)^2 \right)^{1/2}} + \frac{\frac{\delta_{zx}}{z_{\max}}}{\left( 1 + \left( \frac{\delta_x}{z_{\max}} \right)^2 \right)^{3/2}} \quad (2-21)$$

$$\int_0^1 \delta^2 z_{\max} dx = \frac{4}{3} \quad (2-22)$$

Έπειτα, αντικαθιστώντας τις (2-19), (2-20) στις (2-11),(2-16) προκύπτουν οι μετασχηματισμένες συνοριακές συνθήκες (2-23) και (2-24):

- $\delta_x = 0$  στο  $x = 1$  (2-23)

- $-\frac{\frac{\delta_x}{z_{\max}}}{\left( 1 + \left( \frac{\delta_x}{z_{\max}} \right)^2 \right)^{1/2}} = \cos \theta_y$  στο  $x = 0$  (2-24)

## 2.1.2. Παραμετροποίηση αξονοσυμμετρικής σταγόνας σε σφαιρικές συντεταγμένες

### 2.1.2.1. Σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων και διανύσματα βάσης

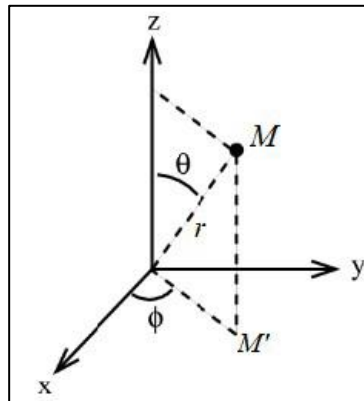
Στο σύστημα των σφαιρικών συντεταγμένων, η θέση ενός σημείου Μ στον τρισδιάστατο χώρο καθορίζεται από μια διατεταγμένη τριάδα  $(r, \theta, \varphi)$  πραγματικών αριθμών που ονομάζονται σφαιρικές συντεταγμένες. Η  $r$ -συντεταγμένη είναι η απόσταση του σημείου Μ από την αρχή Ο, η  $\theta$ -συντεταγμένη είναι η γωνία μεταξύ του θετικού z-άξονα και του ευθύγραμμου τμήματος ΟΜ και η  $\varphi$ -συντεταγμένη είναι η γωνία μεταξύ του θετικού x-άξονα και του ευθύγραμμου τμήματος ΟΜ', όπου Μ' είναι η προβολή του σημείου Μ πάνω στο καρτεσιανό επίπεδο xy (Σχήμα 2.4).

Προκειμένου να μετατραπούν οι σφαιρικές συντεταγμένες στις αντίστοιχες καρτεσιανές ακολουθούνται οι παρακάτω μετασχηματισμοί (εξισώσεις 2-25, 2-26, 2-27):

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad (2-25)$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi \quad (2-26)$$

$$z = r \cos \theta \quad (2-27)$$



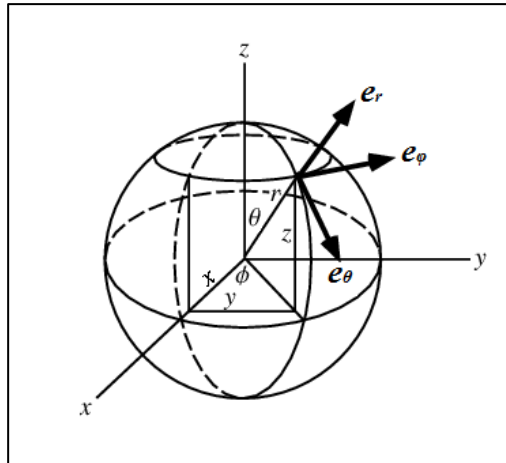
Σχήμα 2.4: Σύστημα σφαιρικών συντεταγμένων

Λόγω της αξονικής συμμετρίας που υπάρχει στο συγκεκριμένο πρόβλημα (ο  $z$ -άξονας είναι ο άξονας συμμετρίας), θεωρούμε ότι η λύση του προβλήματος θα είναι ακριβώς η ίδια για την κάθε τιμή της συντεταγμένης  $\varphi$  (π.χ  $\varphi=0$ ). Έτσι, το τρισδιάστατο σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων εκφυλίζεται σε μια δισδιάστατη προβολή πάνω στο επίπεδο  $zx$ . Τα σφαιρικά διανύσματα βάσης παριστάνονται με τα σύμβολα  $(\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\varphi)$  και δείχνουν τις κατευθύνσεις κατά τις οποίες αυξάνονται οι τιμές των σφαιρικών συντεταγμένων  $(r, \theta, \varphi)$  αντίστοιχα (Σχήμα 2.5). Οι εξισώσεις μετατροπής των διανυσμάτων βάσης από το σφαιρικό στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων είναι οι εξής (εξισώσεις 2-28, 2-29, 2-30):

$$\vec{i} = \sin \theta \cos \varphi \vec{e}_r - \cos \theta \cos \varphi \vec{e}_\theta - \sin \varphi \vec{e}_\varphi \xrightarrow{\varphi=0} \vec{i} = \sin \theta \vec{e}_r + \cos \theta \vec{e}_\theta \quad (2-28)$$

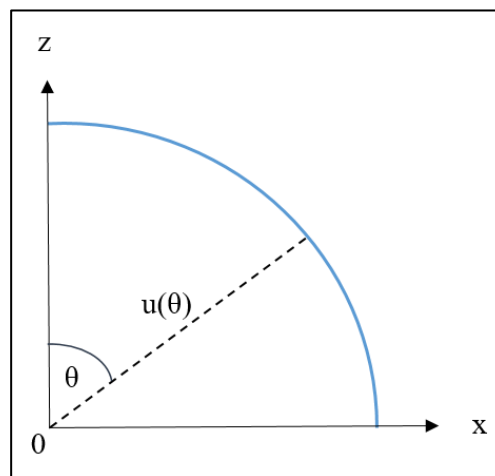
$$\vec{j} = \sin \theta \sin \varphi \vec{e}_r + \cos \theta \sin \varphi \vec{e}_\theta + \cos \varphi \vec{e}_\varphi \xrightarrow{\varphi=0} \vec{j} = \vec{e}_\varphi \quad (2-29)$$

$$\vec{k} = \cos \theta \vec{e}_r - \sin \theta \vec{e}_\theta \quad (2-30)$$



Σχήμα 2.5: Μοναδιαία διανύσματα βάσης σφαιρικών συντεταγμένων

Έτσι, στην παραμετροποίηση σε σφαιρικές συντεταγμένες ένα σημείο της επιφάνειας της σταγόνας δίνεται ως η αδιάστατη απόσταση  $u(\theta)$  του κέντρου του συστήματος συντεταγμένων από την ελεύθερη επιφάνεια της σταγόνας (Σχήμα 2.6). Η αδιάστατη απόσταση  $u$  είναι συνάρτηση της γωνίας  $\theta$  των σφαιρικών συντεταγμένων.



Σχήμα 2.6: Σταγόνα σε παραμετροποίηση σφαιρικών συντεταγμένων

### 2.1.2.2. Διέπουσες εξισώσεις

Προκειμένου να επιλυθεί το πρόβλημα της ισορροπίας της σταγόνας στο λείο επίπεδο επιλύονται ταυτόχρονα:

- 1) Η αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης Young-Laplace (εξίσωση 2-31)



2) Η αδιάστατη μορφή της ολοκληρωτικής εξίσωσης διατήρησης του όγκου της σταγόνας (εξίσωση 2-34)

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση Young-Laplace (βλ. εξίσωση 1-8, Κεφ.1 Παρ.4) την αδιάστατη μορφή της μέσης τοπικής καμπυλότητας υπολογισμένη σε σφαιρικές συντεταγμένες, προκύπτει η εξίσωση 2-31 που συσχετίζει την αδιάστατη απόσταση  $u(\theta)$  με την αδιάστατη σταθερά πίεσης  $K$ :

$$K = \frac{1}{u^2 \sin \theta} \left[ \frac{2u^2 \sin^2 \theta + u_\theta^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} - \frac{d}{d\theta} \frac{uu_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right] \quad (2-31)$$

$$\text{με } u_\theta = \frac{du}{d\theta} \quad (2-32)$$

Επιπλέον, η διαστατική εξίσωση του όγκου της σταγόνας σε σφαιρικές συντεταγμένες είναι<sup>26</sup>:

$$V_{droplet} = \frac{2}{3} \pi R_0^3 \int_0^{\pi/2} u^3 \sin \theta \, d\theta \quad (2-33)$$

όπου  $V_{droplet}$  ο διαστατικός όγκος της σταγόνας και  $R_0$  ένα διαστατικό χαρακτηριστικό μήκος.

Αν ο διαστατικός όγκος της σταγόνας θεωρηθεί ίσος με τον όγκο σφαίρας ακτίνας  $R_0$ , και έπειτα διαιρεθεί με τον όγκο μιας σφαίρας ακτίνας  $R_0$  για να αδιαστατοποιηθεί, προκύπτει τελικά η αδιάστατη εξίσωση διατήρησης του όγκου σε σφαιρικές συντεταγμένες (εξίσωση 2-34):

$$V_{droplet} = V_{sphere} \rightarrow \frac{2}{3} \pi R_0^3 \int_0^{\pi/2} u^3 \sin \theta \, d\theta = \frac{4}{3} \pi R_0^3 \xrightarrow{\div V_{sphere}}$$

$$\frac{V_{droplet}}{V_{sphere}} = \frac{V_{sphere}}{V_{sphere}} \rightarrow \frac{\frac{2}{3} \pi R_0^3 \int_0^{\pi/2} u^3 \sin \theta \, d\theta}{\frac{4}{3} \pi R_0^3} = \frac{\frac{4}{3} \pi R_0^3}{\frac{4}{3} \pi R_0^3} \rightarrow$$

$$\int_0^{\pi/2} u^3 \sin \theta \, d\theta = 2 \quad (2-34)$$

Το χωρίο επίλυσης του προβλήματος είναι το D, με  $\theta \in [0, \pi/2]$ , δηλαδή από τον κατακόρυφο άξονα z ( $\theta = 0$ ) ως το σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο ( $\theta = \pi/2$ ).

### 2.1.2.3. Συνοριακές συνθήκες

Στο πρόβλημα εφαρμόζονται οι παρακάτω συνοριακές συνθήκες (εξισώσεις 2-35, 2-36):

- $\frac{du}{d\theta} = 0$  στο  $\theta = 0$  (2-35)

δηλαδή η κλίση της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας είναι μηδενική στο σημείο  $\theta=0$ . Αυτή η συνθήκη δηλώνει την αξονική συμμετρία του προβλήματος. Στο  $\theta = \pi/2$  εφαρμόζεται η συνοριακή συνθήκη Young:

- $\vec{n} \cdot \vec{n}_s = \cos \theta_Y$  στο  $\theta = \pi/2$  (2-36)

Υπολογίζοντας το  $\vec{n}$  και το  $\vec{n}_s$  σε σφαιρικές συντεταγμένες (εξισώσεις 2-37, 2-38):

$$\vec{n} = \frac{u}{\sqrt{u^2 + u_\theta^2}} \vec{e}_r - \frac{u_\theta}{\sqrt{u^2 + u_\theta^2}} \vec{e}_\theta \quad (2-37)$$

$$\vec{n}_s = -\frac{f_x}{|\vec{n}_s|} \vec{e}_r + \frac{1}{|\vec{n}_s|} \vec{k} \quad (2-38)$$

Για επίπεδο χωρίς κλίση η  $f_x=0$ , συνεπώς το  $\vec{n}_s = \frac{1}{|\vec{n}_s|} \vec{k}$  και για  $\theta = \pi/2$  από την εξίσωση

(2-30) προκύπτει  $\vec{n}_s = -\vec{e}_\theta$ .

Πραγματοποιώντας τον πολλαπλασιασμό των διανυσμάτων προκύπτει τελικά:

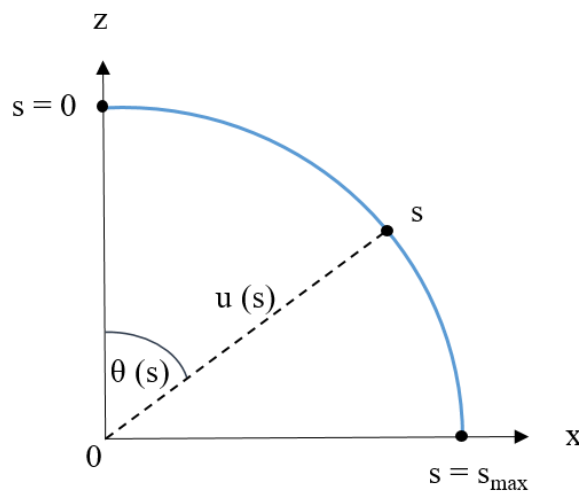
$$\frac{u_\theta}{\sqrt{u^2 + u_\theta^2}} = \cos \theta_Y \quad \text{στο } \theta = \pi/2 \quad (2-39)$$

### 2.1.3. Παραμετροποίηση μήκους τόξου

Η παραμετροποίηση του σχήματος της σταγόνας σε κυλινδρικές και σφαιρικές συντεταγμένες κρίνεται επαρκής για σταγόνες που ισορροπούν σε λεία επίπεδα. Όμως, στην περίπτωση που η στερεή επιφάνεια έχει μικροδομή τότε σε κυλινδρικές

συντεταγμένες μια τιμή της συντεταγμένης  $\varphi$  μπορεί να αντιστοιχίζεται σε παραπάνω από μια τιμές της  $r$ -συντεταγμένης. Αντίστοιχα στην σφαιρική παραμετροποίηση, μια τιμή της  $\theta$ -συντεταγμένης μπορεί να αντιστοιχίζεται σε παραπάνω από μια τιμές της  $r$ -συντεταγμένης. Το τελευταίο πρόβλημα αντιμετωπίζεται επιτυχώς με την παραμετροποίηση μήκους τόξου, όπου το μήκος τόξου  $s$ , αυξάνεται μονότονα κατά μήκος της επιφάνειας της σταγόνας. Σε αυτή την παράγραφο γίνεται ειδική μνεία στη διατύπωση του προβλήματος και για την περίπτωση της επαυξημένης Young-Laplace.

Το μήκος τόξου  $s$  μετράται κατά μήκος της επιφάνειας της σταγόνας. Το σημείο όπου ξεκινάει να μετράται το μήκος τόξου αναφέρεται ως αρχικό σημείο της καμπύλης ( $s = 0$ ). Ένα σημείο της σταγόνας δίνεται ως συνδυασμός της αδιάστατης απόστασης  $u(s)$  του κέντρου του συστήματος συντεταγμένων από την ελεύθερη επιφάνεια της σταγόνας και της γωνίας  $\theta(s)$  του σφαιρικού συστήματος συντεταγμένων (σχήμα 2.7). Παρατηρείται ότι στην παραμετροποίηση μήκους τόξου τόσο η απόσταση  $u$  όσο και η γωνία  $\theta$  εκφράζονται συναρτήσει του μήκους τόξου  $s$ .



Σχήμα 2.7: Σταγόνα σε παραμετροποίηση μήκους τόξου

### 2.1.3.1. Συμβατική εξίσωση Young-Laplace

#### 2.1.3.1.1. Διέπουσες εξισώσεις

Προκειμένου να επιλυθεί το πρόβλημα της ισορροπίας της σταγόνας στο λείο επίπεδο επιλύονται ταυτόχρονα:

- 1) Η αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης Young-Laplace (εξίσωση 2-40 ή 2-43)

- 2) Η αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης μήκους-τόξου της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας (εξίσωση 2-46)
- 3) Η αδιάστατη μορφή της ολοκληρωτικής εξίσωσης διατήρησης του όγκου ή της επιφάνειας της σταγόνας (εξίσωση 2-47 ή 2-48)
- 4) Η αδιάστατη μορφή της εξίσωσης του οριζοντίου επιπέδου που ισορροπεί η σταγόνα (εξίσωση 2-49)

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση Young-Laplace (βλ. εξίσωση 1-8, Κεφ.1, Παρ.4) την αδιάστατη μορφή της μέσης τοπικής καμπυλότητας υπολογισμένη για παραμετροποίηση μήκους-τόξου, προκύπτει η εξίσωση (2-40) που συσχετίζει την αδιάστατη απόσταση  $u(s)$  και την γωνία  $\theta(s)$  με την αδιάστατη σταθερά πίεσης  $K$  ως εξής:

$$K = \frac{1}{u \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2}} \left[ 2u \theta_s \sin \theta - u_s \cos \theta + u \sin \theta \frac{d}{ds} \arctan \left( \frac{u \theta_s}{u_s} \right) \right] \quad (2-40)$$

$$\text{με } \theta_s = \frac{d\theta}{ds} \text{ και } u_s = \frac{du}{ds} \quad (2-41), (2-42)$$

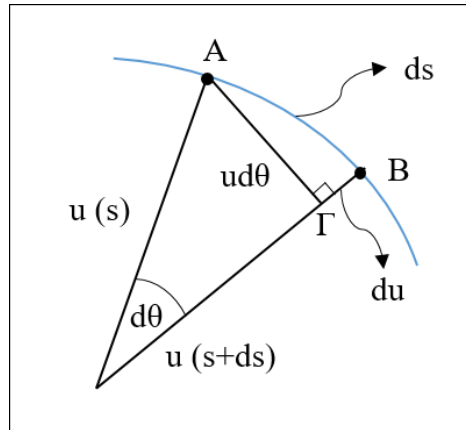
Να σημειωθεί εδώ ότι μπορεί να χρησιμοποιηθεί επίσης και η αδιάστατη μορφή της μέσης τοπικής καμπυλότητας υπολογισμένη για σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων για σταγόνα με μεταφορική συμμετρία<sup>27</sup>. Πραγματοποιώντας αλλαγή μεταβλητής από σφαιρική παραμετροποίηση σε παραμετροποίηση μήκους τόξου και αντικαθιστώντας την έκφραση της καμπυλότητας στην εξίσωση Young-Laplace προκύπτει (εξίσωση 2-43):

$$K = \frac{1}{\sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2}} \left[ \theta_s + \frac{d}{ds} \arctan \left( \frac{u \theta_s}{u_s} \right) \right] \quad (2-43)$$

$$\text{με } \theta_s = \frac{d\theta}{ds} \text{ και } u_s = \frac{du}{ds} \quad (2-44), (2-45)$$

Για απειροστή μεταβολή  $ds$  του μήκους τόξου προκύπτουν οι απειροστές μεταβολές  $d\theta$  της γωνίας  $\theta$  και  $du$  της αδιάστατης απόστασης  $u$  (σχήμα 2.8). Αν θεωρήσουμε ότι η απειροστή μεταβολή  $ds$  είναι ευθύγραμμο τμήμα και εφαρμόσουμε το πυθαγόρειο θεώρημα στο τρίγωνο ΑΒΓ, προκύπτει η αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης μήκους τόξου (εξίσωση 2-46):

$$(du)^2 + (u d\theta)^2 = (ds)^2 \Leftrightarrow \left( \frac{du}{ds} \right)^2 + u^2 \left( \frac{d\theta}{ds} \right)^2 = 1 \quad (2-46)$$



Σχήμα 2.8: Εξαγωγή διαφορικής εξίσωσης μήκους τόξου με εφαρμογή πυθαγορείου θεωρήματος στο τρίγωνο ABΓ

Επιπλέον, χρησιμοποιώντας την αδιάστατη μορφή της ολοκληρωτικής εξίσωσης διατήρησης του όγκου για σφαιρικές συντεταγμένες (εξίσωση 2-34) και πραγματοποιώντας αλλαγή μεταβλητής στο ολοκλήρωμα από  $\theta$  σε  $s$ , εξάγεται η εξίσωση διατήρησης του όγκου της σταγόνας σε παραμετροποίηση μήκους τόξου (εξίσωση 2-47):

$$\int_0^{\pi/2} u^3 \sin \theta d\theta = 2 \Leftrightarrow \int_0^{s_{\max}} u^3 \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds = 2 \quad (2-47)$$

Στην περίπτωση σταγόνας με μεταφορική συμμετρία, χρησιμοποιείται η εξίσωση διατήρησης της επιφάνειας της σταγόνας<sup>27</sup> (εξίσωση 2-48),  $A_{droplet}$ :

$$\int_0^{s_{\max}} u^2 \theta_s ds = \pi \quad (2-48)$$

Τέλος, η εξίσωση οριζοντίου επιπέδου που θα χρησιμοποιηθεί είναι της μορφής  $z = 0$  σε καρτεσιανές συντεταγμένες. Μετασχηματίζοντας την σε σφαιρικές συντεταγμένες προκύπτει (εξίσωση 2-49):

$$u \cos \theta = 0 \quad (2-49)$$

και εισάγεται στο πρόβλημα της παραμετροποίησης μήκους-τόξου.

### 2.1.3.1.2. Συνοριακές συνθήκες

Οι δύο πρώτες συνοριακές συνθήκες (εξισώσεις 2-50, 2-51) είναι ίδιες με τις αντίστοιχες της σφαιρικής παραμετροποίησης δηλαδή:

- $\frac{du}{ds} = 0$  στο  $s = 0$  (2-50)

- $\vec{n} \cdot \vec{n}_s = \cos \theta_\gamma$  στο  $s = s_{max}$  (2-51)

Η συνοριακή συνθήκη (εξίσωση 2-52) που εισάγεται για την επιπλέον διαφορική εξίσωση του προβλήματος (εξίσωση μήκους-τόξου), είναι μια συνθήκη Dirichlet που έχει την μορφή:

- $\theta(s) = 0$  στο  $s = 0$  (2-52)

### 2.1.3.1.3. Μετασχηματισμός στο υπολογιστικό χωρίο [0,1]

Το πραγματικό χωρίο επίλυσης του προβλήματος είναι το D, με  $s \in [0, s_{max}]$ . Όπως είναι φανερό το χωρίο επίλυσης του προβλήματος δεν είναι πλήρως ορισμένο, εφόσον το  $s_{max}$  προκύπτει από την επίλυση του συστήματος εξισώσεων. Για αυτό το λόγο το πρόβλημα ισορροπίας της σταγόνας ονομάζεται πρόβλημα «ελευθέρου συνόρου», όπως και στην περίπτωση κυλινδρικής παραμετροποίησης.

Προκειμένου να επιλυθεί το πρόβλημα, το πραγματικό χωρίο επίλυσης μετασχηματίζεται σε ένα υπολογιστικό χωρίο επίλυσης. Ο μετασχηματισμός που γίνεται στην ανεξάρτητη μεταβλητή είναι (εξίσωση 2-53):

$$x = \frac{s}{s_{max}} \quad (2-53)$$

$$\text{με } ds = s_{max} dx \quad (2-54)$$

και το νέο χωρίο επίλυσης είναι το [0,1]. Εφαρμόζοντας τον κανόνα αλυσίδας του Leibniz στις εξισώσεις (2-41), (2-42) έχουμε:

$$\theta_s = \frac{d\theta}{ds} = \frac{d\theta}{dx} \cdot \frac{dx}{ds} = \frac{\theta_x}{s_x} = \frac{\theta_x}{s_{max}} \Leftrightarrow \theta_s = \frac{\theta_x}{s_{max}} \quad (2-55)$$

$$u_s = \frac{du}{ds} = \frac{du}{dx} \cdot \frac{dx}{ds} = \frac{u_x}{s_x} = \frac{u_x}{s_{\max}} \Leftrightarrow u_s = \frac{u_x}{s_{\max}} \quad (2-56)$$

και αντικαθιστώντας τις (2-55),(2-56) στις (2-40), (2-43), (2-47) και (2-48) προκύπτουν οι μετασχηματισμένες εξισώσεις (2-57), (2-58), (2-59) και (2-60).

$$K = \frac{s_{\max}}{u \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_x^2 + u_x^2}} \left[ \frac{2u \theta_x \sin \theta - u_x \cos \theta}{s_{\max}} + u \sin \theta \frac{d}{ds} \arctan \left( \frac{u \theta_x}{u_x} \right) \right] \quad (2-57)$$

$$K = \frac{s_{\max}}{\sqrt{u^2 \theta_x^2 + u_x^2}} \left[ \frac{\theta_x}{s_{\max}} + \frac{d}{ds} \arctan \left( \frac{u \theta_x}{u_x} \right) \right] \quad (2-58)$$

$$\int_0^1 u^3 \theta_x \sin \theta dx = 2 \quad (2-59)$$

$$\int_0^1 u^2 \theta_x dx = \pi \quad (2-60)$$

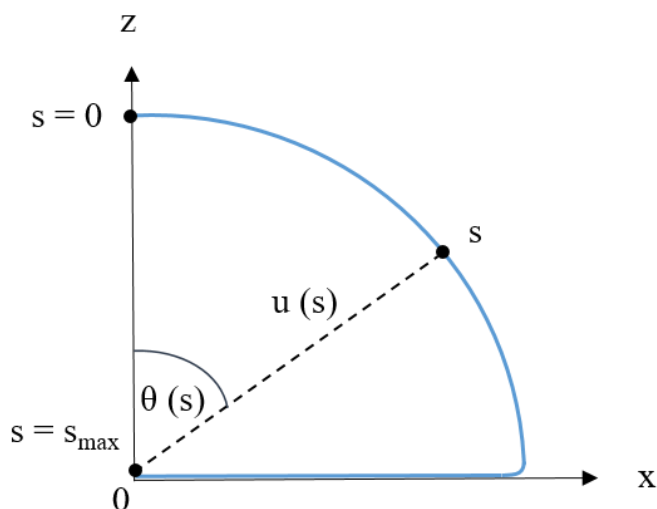
και οι μετασχηματισμένες συνοριακές συνθήκες (2-61) και (2-62):

- $\frac{du}{dx} = 0$  , στο  $x = 0$  (2-61)

- $-\frac{\frac{\delta_x}{z_{\max}}}{\left(1 + \left(\frac{\delta_x}{z_{\max}}\right)^2\right)^{1/2}} = \cos \theta_y$  , στο  $x = 1$  (2-62)

### 2.1.3.2. Επαυξημένη εξίσωση Young-Laplace

Σε αντίθεση με την συμβατική Young-Laplace, το πρόβλημα της επαυξημένης Young-Laplace δεν σταματάει στο τριπλό σημείο επαφής αλλά συνεχίζει μέχρι τον άξονα συμμετρίας της σταγόνας (σχήμα 2.9). Για αυτό το λόγο, η διατύπωση του μαθηματικού προβλήματος αλλάζει ελαφρώς.



Σχήμα 2.9: Σταγόνα σε παραμετροποίηση μήκους τόξου για επίλυση της επαυξημένης Young-Laplace

#### 2.1.3.2.1. Διέπουσες εξισώσεις

Πλέον, αντί της αλγεβρικής εξίσωσης οριζοντίου επιπέδου  $u \cos(\theta) = 0$  (εξίσωση 2-49) επιλύεται η αλγεβρική εξίσωση του κατακόρυφου επιπέδου (εξίσωση 2-63):

$$u \sin(\theta) = 0. \quad (2-63)$$

Οι υπόλοιπες εξισώσεις και συνοριακές συνθήκες του προβλήματος παραμένουν ως έχουν.

#### 2.1.3.2.2. Συνοριακές συνθήκες

Στο  $s_{max}$  δεν ισχύει πια η συνοριακή συνθήκη για την γωνία επαφής Young, αλλά ως νέα συνοριακή συνθήκη εισάγεται η εξίσωση (2-64):

$$\frac{du}{ds} = 0 \quad \text{στο } s = s_{max}, \quad (2-64)$$

και πραγματοποιώντας μετασχηματισμό στο υπολογιστικό χωρίο επίλυσης η συνοριακή συνθήκη γίνεται:

$$\frac{du}{dx} = 0 \quad \text{στο } x=1. \quad (2-65)$$

Οι υπόλοιπες συνοριακές συνθήκες του προβλήματος παραμένουν ως έχουν.



## 2.2. Μοντελοποίηση δυναμικής συμπεριφοράς σταγόνων

Όσον αφορά την μοντελοποίηση της δυναμικής συμπεριφοράς των σταγόνων, σε αυτήν την εργασία δεν ακολουθείται κάποια από τις προαναφερθείσες μεθόδους (βλ. Κεφ.1, Παρ.6). Πιο συγκεκριμένα, δεν επιβάλλεται κάποιου είδους συνοριακή συνθήκη για την δυναμική γωνία επαφής. Αντιθέτως, όπως και στην περίπτωση της επαυξημένης εξίσωσης Young-Laplace (βλ. Κεφ.1, Παρ.5), έτσι κι εδώ χρησιμοποιείται η πίεση Derjaguin για την μοντελοποίηση των διαμοριακών αλληλεπιδράσεων στερεού/υγρού. Ακολουθώντας αυτή την μεθοδολογία, αποφεύγεται η ανάγκη εφαρμογής της συνοριακής συνθήκης Young για την γωνία επαφής<sup>28,29</sup>.

### 2.2.1. Διέπουσες εξισώσεις

Συγκεκριμένα, επιλύονται οι εξισώσεις Navier-Stokes (εξισώσεις 2-66, 2-67) σε κυλινδρικές συντεταγμένες, για μια αξονοσυμμετρική σταγόνα υγρού και για το περιβάλλον ρευστό:

$$\rho(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F} \quad (2-66)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2-67)$$

Παράλληλα με τις εξισώσεις Navier-Stokes επιλύονται και οι εξισώσεις Winslow (εξισώσεις 2-68, 2-69) για την κίνηση του πλέγματος:

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial z^2} = 0 \quad (2-68)$$

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2} = 0 \quad (2-69)$$

όπου  $\xi, \eta$ : συντεταγμένες που ακολουθούν την κίνηση του πλέγματος.

### 2.2.2. Συνοριακές συνθήκες

Για τις διαφορικές εξισώσεις Navier-Stokes, σαν συνοριακή συνθήκη εφαρμόζεται ένα τοπικό ισοζύγιο δυνάμεων (εξίσωση 2-70) στην ενιαία διεπιφάνεια, που συσχετίζει τις τάσεις που ασκούνται στην διεπιφάνεια με την τοπική μεταβολή της καμπυλότητας:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_1 = \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_2 + \gamma_{LV} (\nabla_s \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \quad (2-70)$$

όπου  $\mathbf{n}$  το κάθετο διάνυσμα στην διεπιφάνεια υγρού/περιβάλλοντος ρευστού,  $T_1$  ο τανυστής τάσεων της σταγόνας,  $T_1 = -p_L \mathbf{I} + \mu_L (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$  (2-71),  $T_2$  ο τανυστής τάσεων του περιβάλλοντος ρευστού,  $\gamma_{LV}$  η διεπιφανειακή τάση υγρού/περιβάλλοντος ρευστού και  $\nabla_s$  η τοπική κλίση της επιφάνειας. Ο τανυστής τάσεων  $T_2$  μπορεί να γραφτεί ως:

$$\mathbf{n} \cdot T_2 = (\mathbf{n} \cdot T_2 \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + (\mathbf{n} \cdot T_2 \cdot \mathbf{t}) \mathbf{t} \quad (2-72)$$

όπου  $(\mathbf{n} \cdot T_2 \cdot \mathbf{n})$  η κάθετη στην διεπιφάνεια συνιστώσα των τάσεων και  $(\mathbf{n} \cdot T_2 \cdot \mathbf{t})$  η εφαπτόμενη στην διεπιφάνεια συνιστώσα των τάσεων. Η κάθετη στην διεπιφάνεια συνιστώσα περιλαμβάνει τις δυνάμεις που ασκούνται στην διεπιφάνεια λόγω του περιβάλλοντος ρευστού (δυνάμεις ιξώδους και πίεσης) και τις αλληλεπιδράσεις στερεού/υγρού που εκφράζονται μέσω της πίεσης Derjaguin  $p^{LS}$ , όπως φαίνεται στην εξίσωση (2-73):

$$\mathbf{n} \cdot T_2 \cdot \mathbf{n} = -p_A \mathbf{I} + \mu_A (\nabla \mathbf{u} + \nabla(\mathbf{u})^T) + p^{LS} \quad (2-73)$$

Σαν εφαπτομενική συνιστώσα των τάσεων, νοείται μια συνθήκη ολίσθησης Navier (Navier slip) του υγρού στο στερεό, ουσιαστικά προσομοιάζοντας μια τριβή μεταξύ του υγρού και στερεού. Η τριβή αυτή είναι ανάλογη της ταχύτητας του υγρού στη στερεή επιφάνεια και δίνεται από την εξίσωση (2-74):

$$\mathbf{n} \cdot T_2 \cdot \mathbf{t} = \beta_{eff} (\mathbf{t} \cdot \mathbf{u}), \quad (2-74)$$

με  $\beta_{eff}$  τον συντελεστή ολίσθησης:

$$\beta_{eff} = \beta_{st} \cdot \frac{\mu_L}{R_0} \left( 1 - \tanh \left[ 5 \left( \frac{z}{\delta_{min}} - 1 \right) \right] \right), \quad (2-75)$$

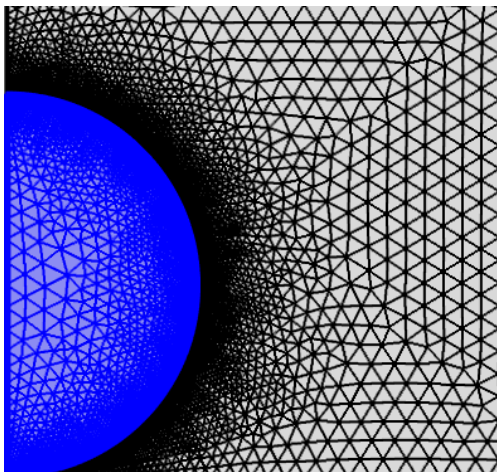
όπου  $\beta_{st}$  παράμετρος η οποία ποσοτικοποιεί την τριβή του υγρού στο στερεό. Η τριβή αυτή «ενεργοποιείται» όταν το υγρό φτάνει πολύ κοντά στο στερεό (για  $z \approx \delta_{min}$ ) ενώ δεν ισχύει για την υπόλοιπη διεπιφάνεια. Αυτό επιτυγχάνεται με την χρήση της συνάρτησης  $\tanh$ . Με αυτόν τον τρόπο, προσομοιάζουμε μια τραχύτητα νανο-κλίμακας στο επίπεδο στερεό, χωρίς να είναι απαραίτητος ο σχεδιασμός της μικροδομής της επιφάνειας.

Για τις εξισώσεις Winslow, η κινηματική συνοριακή συνθήκη στην διεπιφάνεια είναι (εξίσωση 2-76):

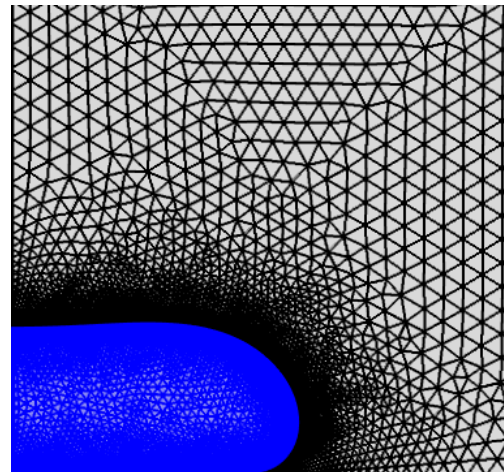
$$(\mathbf{u}_{mesh} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (2-76)$$

με  $\mathbf{u}_{mesh}$  την ταχύτητα του πλέγματος στην διεπιφάνεια και  $\mathbf{u}$  την ταχύτητα της διεπιφάνειας.

Το παραπάνω πρόβλημα επιλύεται στο πρόγραμμα COMSOL Multiphysics®. Ταυτόχρονα με την επίλυση των εξισώσεων, το COMSOL Multiphysics® δημιουργεί νέο πλέγμα όταν η ποιότητα του πλέγματος πέφτει κάτω από ένα συγκεκριμένο όριο. Στο σχήμα 2.10 φαίνεται το αρχικό πλέγμα, και στο σχήμα 2.11 φαίνεται το επαναδημιουργημένο πλέγμα σε αργότερους χρόνους, όπου η σταγόνα έχει απλώσει στη στερεή επιφάνεια.



Σχήμα 2.10: Αρχικό πλέγμα



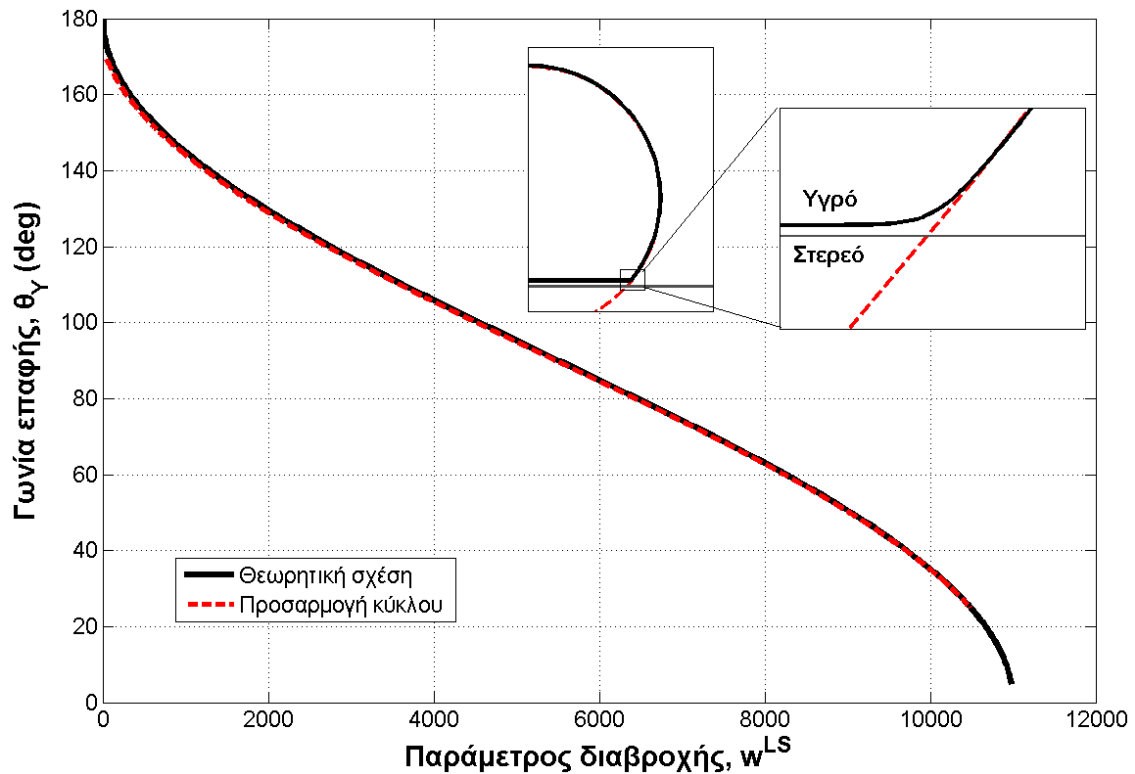
Σχήμα 2.11: Επαναδημιουργημένο πλέγμα

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΥΖΗΤΗΣΗ ΣΤΑΤΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΩΝ

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται αποτελέσματα υπολογισμών για ισορροπία σταγόνων σε στερεές επιφάνειες. Συγκεκριμένα μας ενδιαφέρει μόνο η τελική κατάσταση της σταγόνας και αγνοούμε προς το παρόν την χρονική εξέλιξη των φαινομένων. Αρχικά συγκρίνεται το τελικό σχήμα της σταγόνας που προκύπτει από την επίλυση της συμβατικής και της επαυξημένης Young-Laplace. Παράλληλα εξετάζεται η αλλαγή που επιφέρει η τροποποίηση της πίεσης αποσύνδεσης  $p^{LS}$ , στο σχήμα της σταγόνας.

### 3.1. Συσχέτιση της παραμέτρου διαβροχής $w^{LS}$ με την γωνία επαφής $\theta_Y$

Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως (βλ. Κεφ.1. Παρ.5), όταν χρησιμοποιείται η επαυξημένη εξίσωση Young-Laplace για την μοντελοποίηση στατικών φαινομένων διαβροχής, εισάγεται η παράμετρος διαβροχής  $w^{LS}$  για να καθορισθούν οι διαβρεκτικές ιδιότητες της στερεής επιφάνειας. Η παράμετρος διαβροχής  $w^{LS}$  συνδέεται με την γωνία Young,  $\theta_Y$ , σύμφωνα με τη εξίσωση (1-13) (βλ. Κεφ.1, Παρ 5). Προκειμένου να ελεγχθεί η ορθότητα αυτής της προσέγγισης συγκρίνεται η θεωρητική σχέση (1-13) με την αντίστοιχη συσχέτιση που προκύπτει από τα αποτελέσματα υπολογισμών με τη χρήση της τροποποιημένης εξίσωσης Young-Laplace για μια σταγόνα που βρίσκεται σε ισορροπία πάνω σε μια επίπεδη και λεία στερεή επιφάνεια. Στην περίπτωση των υπολογισμών, η γωνία  $\theta_Y$  που προκύπτει για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου διαβροχής υπολογίζεται με την προσαρμογή ενός κύκλου στη διεπιφάνεια υγρού/περιβάλλοντος ρευστού. Η προσαρμογή του κύκλου γίνεται σε ύψος όπου η επίδραση της πίεσης Derjaguin μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα. Τα αποτελέσματα αυτής της σύγκρισης παρουσιάζονται στο Σχήμα 3.1



Σχήμα 3.1: Εξάρτηση της γωνίας επαφής από την παράμετρο διαβροχής

Παρατηρείται άριστη συμφωνία των υπολογισμών με την θεωρητική σχέση, εκτός από περιπτώσεις όπου η τιμή της παραμέτρου  $w^{LS}$  είναι χαμηλή ( $w^{LS} \rightarrow 0$ ), δηλαδή η στερεή επιφάνεια που εξετάζεται είναι υπερυδρόφοβη, γεγονός που δεν ανταποκρίνεται σε ρεαλιστικά συστήματα. Από την παραπάνω σύγκριση συμπεραίνεται ότι η χρήση της θεωρητικής σχέσης (1-13) για τη συσχέτιση της παραμέτρου διαβροχής  $w^{LS}$  με την γωνία  $\theta_\gamma$  είναι ασφαλής.

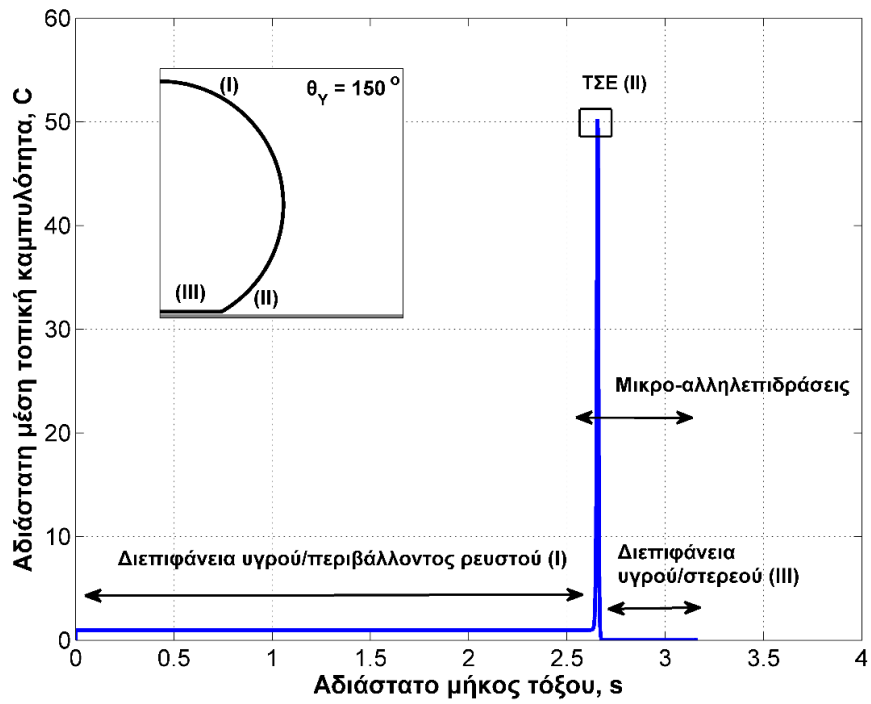
### 3.2. Σύγκριση αποτελεσμάτων συμβατικής και επαυξημένης εξίσωσης Young-Laplace

Στα παρακάτω σχήματα συγκρίνονται τα σχήματα των σταγόνων που προκύπτουν από την επίλυση της συμβατικής Young-Laplace με τα σχήματα από την επίλυση της τροποποιημένης Young-Laplace. Σημειώνεται ότι και στις δύο περιπτώσεις οι σταγόνες έχουν μεταφορική συμμετρία και το πρόβλημα είναι εκφρασμένο σε σφαιρική παραμετροποίηση.

Στο σχήμα 3.3 οι σταγόνες σχηματίζουν γωνία επαφής  $\theta_\gamma=150^\circ$  με την στερεή επιφάνεια. Παρατηρείται ότι η λύση της επαυξημένης Young-Laplace προσεγγίζει άριστα την λύση

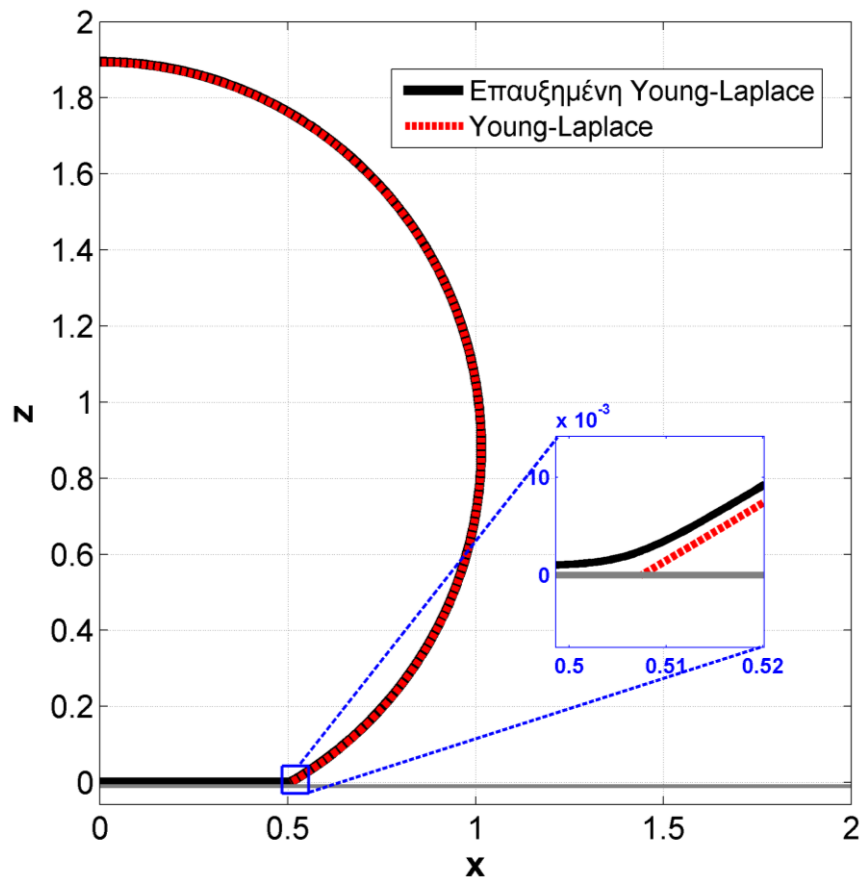
της συμβατικής Young-Laplace. Η θεμελιώδης διαφορά των δύο λύσεων είναι η συμπεριφορά τους κοντά στο τριπλό σημείο επαφής. Η λύση της συμβατικής Young-Laplace «σταματάει» στο σημείο επαφής, ενώ η λύση της επαυξημένης Young-Laplace «συνεχίζει» μέχρι τον άξονα συμμετρίας της σταγόνας ( $z=0$ ), αποτέλεσμα της προσθήκης του επιπλέον όρου της πίεσης αποσύνδεσης Derjaguin που ποσοτικοποιεί τις μικρο-αλληλεπιδράσεις στερεού/υγρού. Στο σχήμα 3.2 απεικονίζεται η αδιάστατη μέση καμπυλότητα της επιφάνειας της σταγόνας συναρτήσει του μήκους τόξου, όπως προκύπτει από την επίλυση της επαυξημένης Young-Laplace. Παρατηρούνται οι τρεις διακριτές περιοχές (I), (II) και (III). Η περιοχή (I) αντιστοιχεί στην διεπιφάνεια υγρού/περιβάλλοντος ρευστού όπου η καμπυλότητα παραμένει σταθερή, η (II) που αντιστοιχεί στην περιοχή κοντά στο τριπλό σημείο επαφής και η (III) που αντιστοιχεί στη διεπιφάνεια υγρού/στερεού, όπου η καμπυλότητα είναι μηδέν λόγω επίπεδου στερεού. Σε περίπτωση που το στερεό είχε τραχύτητα η καμπυλότητα στην περιοχή (III) θα ισούταν με αυτή του στερεού (διαφορετική του μηδενός). Κοντά στο σημείο επαφής, ο όρος της πίεσης αποσύνδεσης «ενεργοποιείται» κάτι που έχει ως συνέπεια την απότομη αύξηση της καμπυλότητας της σταγόνας. Επίσης, στις περιοχές (II) και (III) δρουν οι μικρο-αλληλεπιδράσεις μεταξύ υγρού και στερεού, λόγω της «ενεργοποίησης» της πίεσης Derjaguin.

Λόγω της απότομης μεταβολής της καμπυλότητας στην περιοχή (II), το σχήμα της γραμμής επαφής της σταγόνας που προκύπτει από την λύση της επαυξημένης Young-Laplace (μαύρη καμπύλη) έχει καμπυλωτή μορφή και συνεχίζει μέχρι τον άξονα συμμετρίας της σταγόνας. Αντιθέτως, το σχήμα που προκύπτει από την επίλυση της συμβατικής Young-Laplace (κόκκινη καμπύλη), σταματάει στο σημείο επαφής με το στερεό. Αξίζει επίσης να αναφερθεί ότι η μαύρη καμπύλη δεν έρχεται σε επαφή με την στερεή επιφάνεια, αλλά όπως αναφέρθηκε στο Κεφ.1 , Παρ.5 απέχει μια ελάχιστη απόσταση  $\delta_{min}$ .



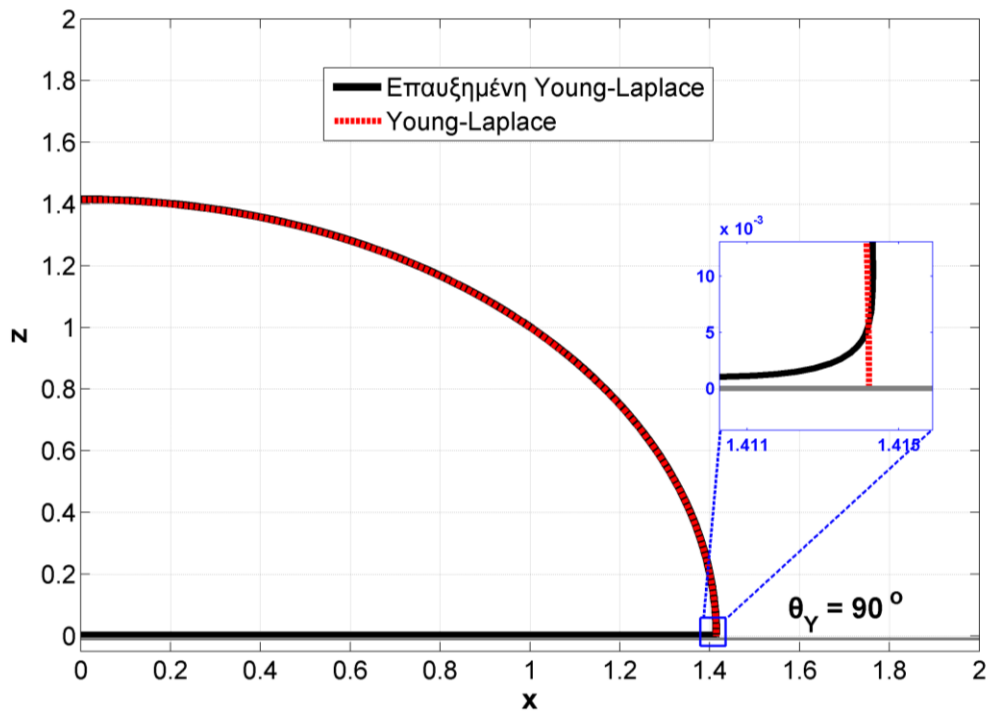
Σχήμα 3.2: Αδιάστατη μέση τοπική καμπυλότητα συναρτήσει του αδιάστατου μήκους τόςου.

$$C_1 = 12, C_2 = 10, \sigma = 9 \cdot 10^{-3}, \varepsilon = 8 \cdot 10^{-3}, w^{LS} = 733$$

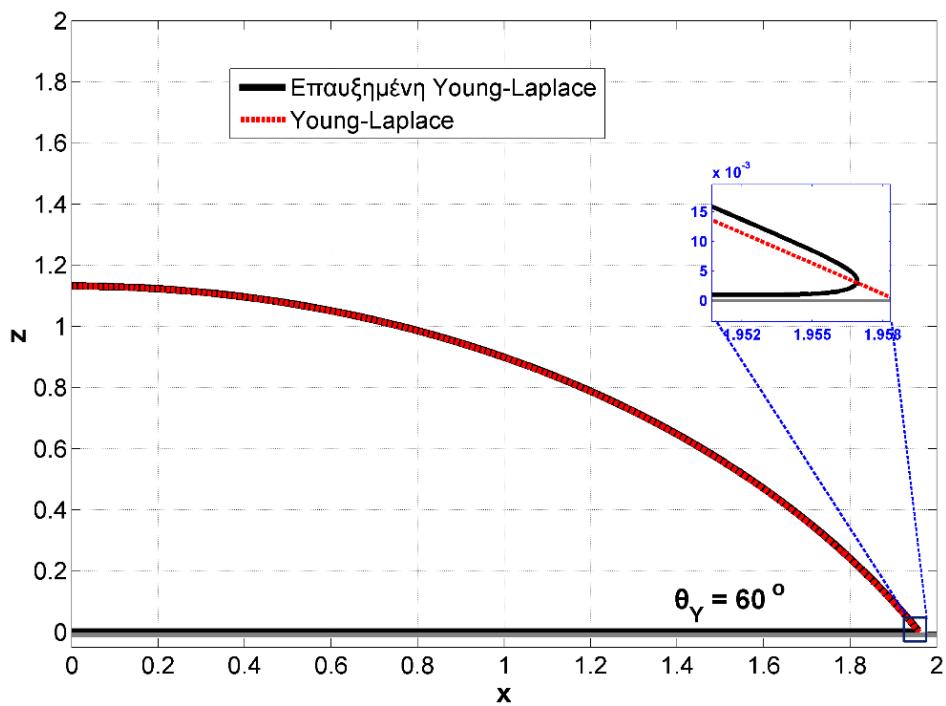


Σχήμα 3.3: Σύγκριση λύσεων συμβατικής με επαυξημένης Young-Laplace για  $\theta_Y = 150^\circ$

Παρακάτω ακολουθούν σχήματα σταγόνων για γωνίες επαφής  $\theta_Y = 90^\circ$  και  $\theta_Y = 60^\circ$ .



Σχήμα 3.4: Σύγκριση λύσεων συμβατικής με επαυξημένης Young-Laplace για  $\theta_Y = 90^\circ$



Σχήμα 3.5: Σύγκριση λύσεων συμβατικής με επαυξημένης Young-Laplace για  $\theta_Y = 60^\circ$



Παρατηρείται ότι όσο η γωνία επαφής μειώνεται δηλαδή οι επιφάνειες που εξετάζονται γίνονται όλο και πιο υδρόφιλες, τόσο πιο απότομη είναι η μεταβολή του σχήματος της μαύρης καμπύλης κοντά στο τριπλό σημείο επαφής.

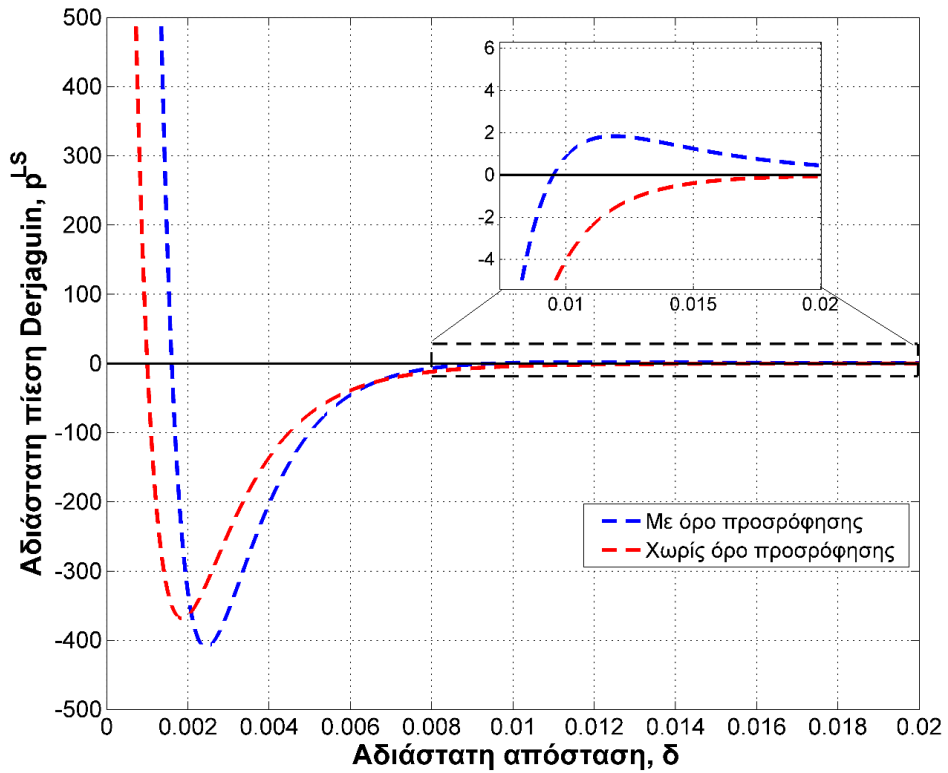
### 3.3. Ενσωμάτωση φαινομένων προσρόφησης στην πίεση Derjaguin

Η πίεση Derjaguin μπορεί να τροποποιηθεί ώστε να ενσωματώνει φαινόμενα προσρόφησης του υγρού στη στερεή επιφάνεια (εξίσωση 3-1). Για παράδειγμα προσθέτοντας έναν επιπλέον όρο έχουμε:

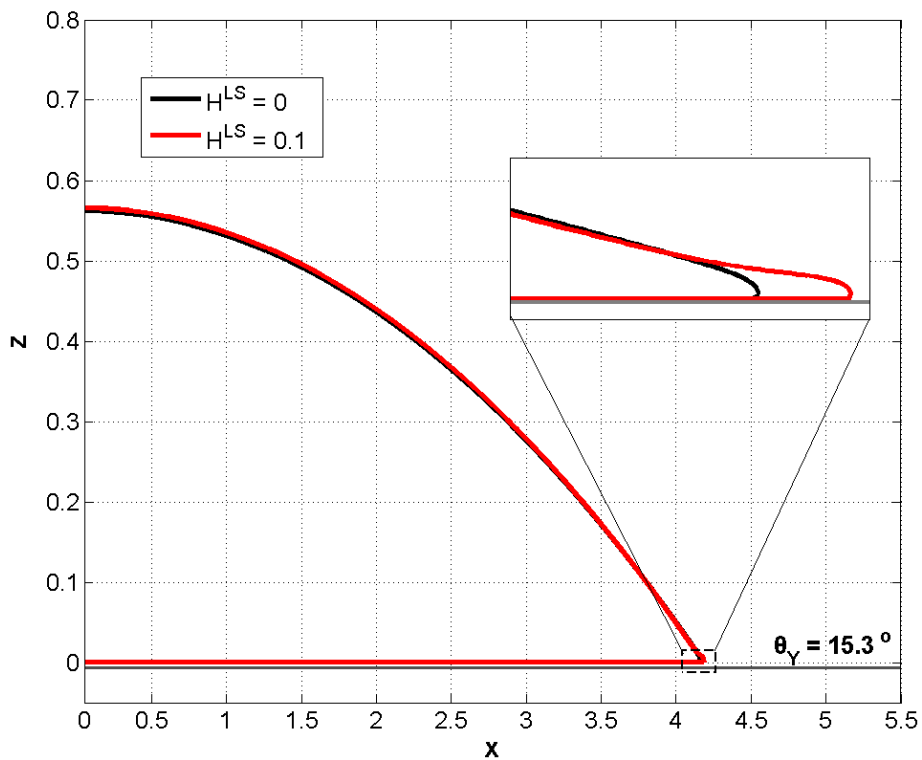
$$\frac{R_0}{\gamma_{LV}} p^{LS}(\delta) = w^{LS} \left[ \left( \frac{\sigma}{\delta + \varepsilon} \right)^{C_1} - \left( \frac{\sigma}{\delta + \varepsilon} \right)^{C_2} + H^{LS} \left( \frac{\sigma}{\delta + \varepsilon} \right)^{C_3} \right], \quad (3-1)$$

όπου η παράμετρος  $H^{LS}$  ελέγχει την ένταση του φαινομένου προσρόφησης. Λόγω της προσθήκης αυτού του όρου αλλάζει ελαφρώς η μορφή της πίεσης Derjaguin. Στο σχήμα 3.6 συγκρίνεται η εξάρτηση της πίεσης Derjaguin από την αδιάστατη απόσταση  $\delta$ , αναλόγως αν υπάρχει ή όχι ο επιπλέον όρος προσρόφησης. Για ύπαρξη του επιπλέον όρου παρατηρείται ότι η πίεση λαμβάνει θετικές τιμές σε ένα διάστημα και έπειτα τείνει προς το μηδέν. Χρησιμοποιώντας αυτό το είδος πίεσης Derjaguin, για μικρές γωνίες επαφής σχηματίζεται ένα λεπτό φίλμ στην άκρη της σταγόνας, κάτι που υποδηλώνει την σταδιακή προσρόφηση του υγρού στο στερεό.

Στο σχήμα 3.7 ακολουθεί μια σύγκριση του σχήματος της σταγόνας, με και χωρίς τη χρήση του πρόσθετου όρου, για στερεή επιφάνεια με γωνία επαφής  $\theta_Y = 15.3^\circ$ . Παρατηρείται ότι το σχήμα της σταγόνας που προκύπτει για πίεση Derjaguin που ενσωματώνει φαινόμενα προσρόφησης (κόκκινη καμπύλη), δημιουργεί ένα λεπτό φίλμ και φαίνεται να έχει απλώσει περισσότερο από την σταγόνα που προκύπτει για πίεση Derjaguin χωρίς όρο προσρόφησης. Σημειώνεται ότι οι άξονες δε βρίσκονται στην ίδια κλίμακα χάριν κατανόησης του φαινομένου.



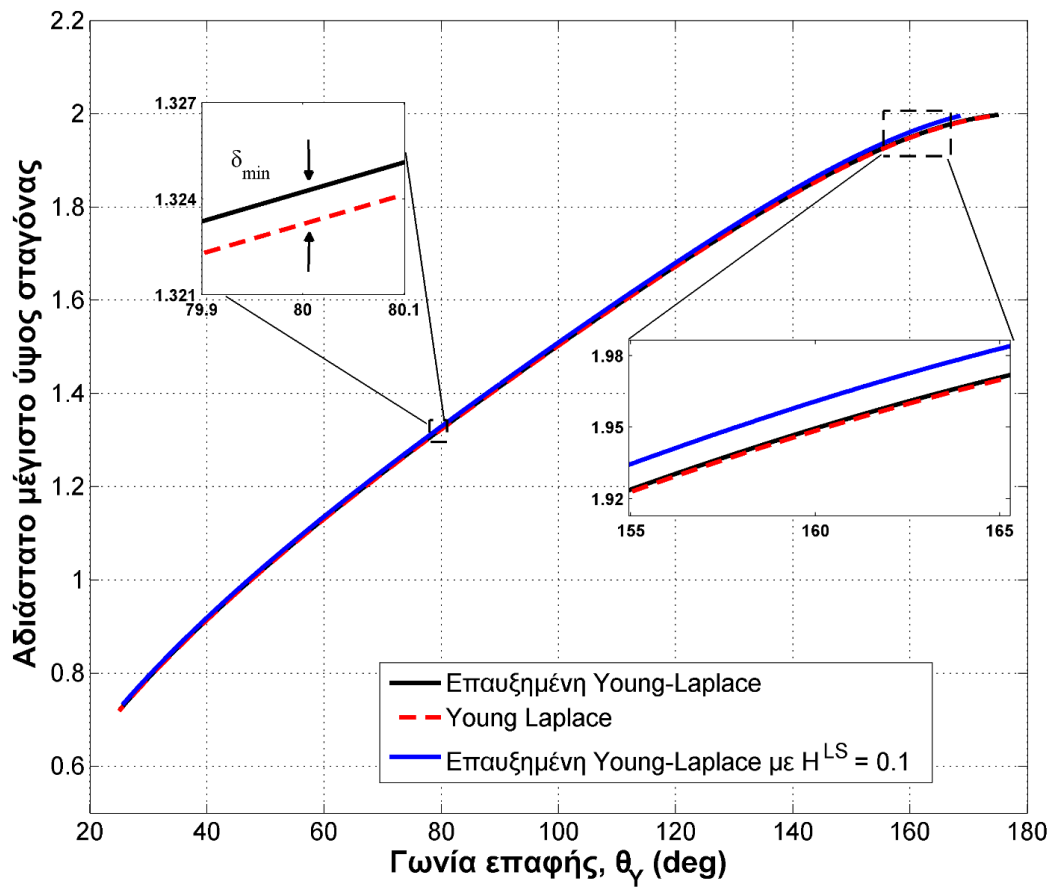
Σχήμα 3.6 : Μορφή της καμπύλης της πίεσης Derjaguin με και χωρίς όρο προσρόφησης,  $w^{LS} = 5500$   
 $(H^{LS} = 0)$ ,  $w^{LS} = 17935$  ( $H^{LS} = 0.1$ ),  $C_1 = 12$ ,  $C_2 = 10$ ,  $C_3 = 7$ ,  $\sigma = 9 \cdot 10^{-3}$ ,  $\varepsilon = 8 \cdot 10^{-3}$



Σχήμα 3.7: Σχήμα σταγόνας για πίεση Derjaguin με και χωρίς όρο προσρόφησης.  
 $w^{LS} = 10805$  ( $H^{LS} = 0$ ),  $w^{LS} = 35551.5$  ( $H^{LS} = 0.1$ ),  $C_1 = 12$ ,  $C_2 = 10$ ,  $C_3 = 7$ ,  $\sigma = 9 \cdot 10^{-3}$ ,  $\varepsilon = 8 \cdot 10^{-3}$

Στο Σχήμα 3.8 συγκρίνεται το μέγιστο ύψος της σταγόνας ως συνάρτηση της γωνίας επαφής  $\theta_Y$  για λύσεις της επαυξημένης εξίσωσης Young-Laplace (για χρήση πίεσης Derjaguin με και χωρίς όρο προσρόφησης) και της συμβατικής Young-Laplace. Όπως και με τα παραπάνω σχήματα, και εδώ παρατηρείται μια πολύ καλή συμφωνία των αποτελεσμάτων που προκύπτουν από την επίλυση των δύο εξισώσεων. Αν υπερμεγεθυνθεί το σχήμα κοντά στην περιοχή όπου  $\theta_Y = 80^\circ$ , παρατηρείται ότι η γραφική παράσταση που αντιστοιχεί σε λύσεις της επαυξημένης Young-Laplace για πίεση Derjaguin χωρίς όρο προσρόφησης απέχει από την γραφική παράσταση που αντιστοιχεί σε λύσεις της συμβατικής Young-Laplace, την ελάχιστη απόσταση  $\delta_{min}$ . Για τις συγκεκριμένες παραμέτρους της αδιάστατης πίεσης Derjaguin ( $C_1 = 12$ ,  $C_2 = 10$ ,  $\sigma = 9 \cdot 10^{-3}$ ,  $\varepsilon = 8 \cdot 10^{-3}$ ) και ακτίνα σταγόνας  $R_0 = 1$ , η ελάχιστη απόσταση ισούται με  $\delta_{min} = 10^{-3}$ . Αυτή η μικρή διαφορά, είναι λογική αφού η γραφική παράσταση χρώματος μαύρου αντιστοιχεί σε σχήματα σταγόνων που έχουν προκύψει από την επίλυση της επαυξημένης Young-Laplace, όπου έχει θεωρηθεί ότι η σταγόνα απέχει από την στερεή επιφάνεια απόσταση  $\delta_{min}$ . Σημειώνεται ότι η μεγέθυνση είναι τόσο μεγάλη ώστε να μην φαίνεται η γραφική παράσταση χρώματος μπλε που αντιστοιχεί σε λύσεις της επαυξημένης Young-Laplace με πίεση Derjaguin που περιέχει επιπλέον όρο προσρόφησης. Άρα, για την ίδια γωνία επαφής, οι σταγόνες που προκύπτουν ως λύσεις της επαυξημένης Young-Laplace, για πίεση Derjaguin χωρίς όρο προσρόφησης θα είναι πάντα υψηλότερες κατά  $\delta_{min}$  από τις αντίστοιχες λύσεις της συμβατικής Young-Laplace.

Επίσης, παρατηρείται καλή συμφωνία των γραφικών παραστάσεων που αντιστοιχούν σε λύσεις της επαυξημένης Young-Laplace, για πίεση Derjaguin με και χωρίς όρο προσρόφησης. Η μικρή διαφορά που παρατηρείται ιδίως για μεγάλες τιμές της γωνίας επαφής  $\theta_Y$  (δηλαδή υπερυδρόφοβες επιφάνειες), οφείλεται στον επιπλέον όρο προσρόφησης που δίνει ελαφρώς διαφορετικό σχήμα στην σταγόνα.



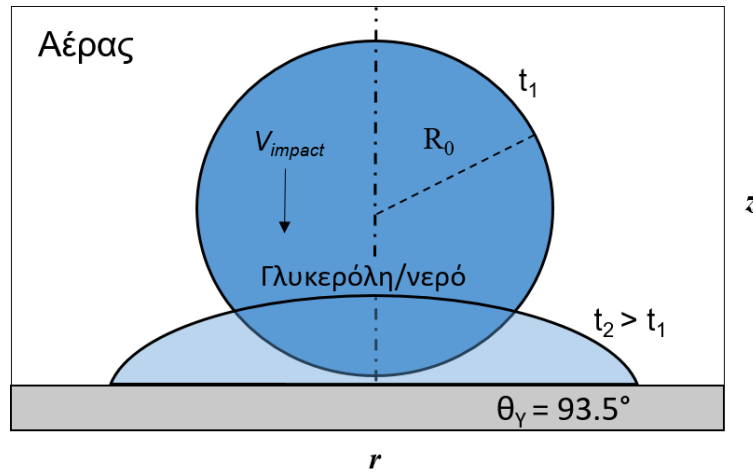
Σχήμα 3.8: Μέγιστο ύψος σταγόνας συναρτήσει της γωνίας επαφής

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΥΖΗΤΗΣΗ ΔΥΝΑΜΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΩΝ

Αφού εξετάστηκαν συστήματα σταγόνων που ισορροπούν πάνω σε στερεές επιφάνειες, ακολουθεί η μελέτη της δυναμικής συμπεριφοράς των σταγόνων. Συγκεκριμένα, αναλύονται περιπτώσεις όπου μια σταγόνα προσκρούει και απλώνει πάνω σε μια στερεή επιφάνεια (λεία ή με τραχύτητα) με μια αρχική ταχύτητα, κάτι που όπως θα δούμε παρακάτω έχει ως αποτέλεσμα την παγίδευση μικρής ποσότητας περιβάλλοντος ρευστού (αέρα ή άλλου υγρού) ανάμεσα στην επιφάνεια και στη σταγόνα. Ειδικότερα, μας ενδιαφέρει να αναγνωρίσουμε τις συνθήκες (δυναμικό ιξώδες περιβάλλουσας φάσης, ταχύτητα πρόσκρουσης της σταγόνας, γεωμετρικά χαρακτηριστικά της επιφάνειας) που αναστέλλουν την παγίδευση του περιβάλλοντος ρευστού. Αυτό, όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή, είναι χρήσιμο για εφαρμογές που αφορούν επιστρώσεις επιφανειών. Επίσης, αναλύεται η επίδραση των ιδιοτήτων της περιβάλλουσας φάσης στη δυναμική συμπεριφορά της σταγόνας. Τέλος, διερευνείται η εξέλιξη του σχήματος της παγιδευμένης φυσαλίδας περιβάλλουσας φάσης.

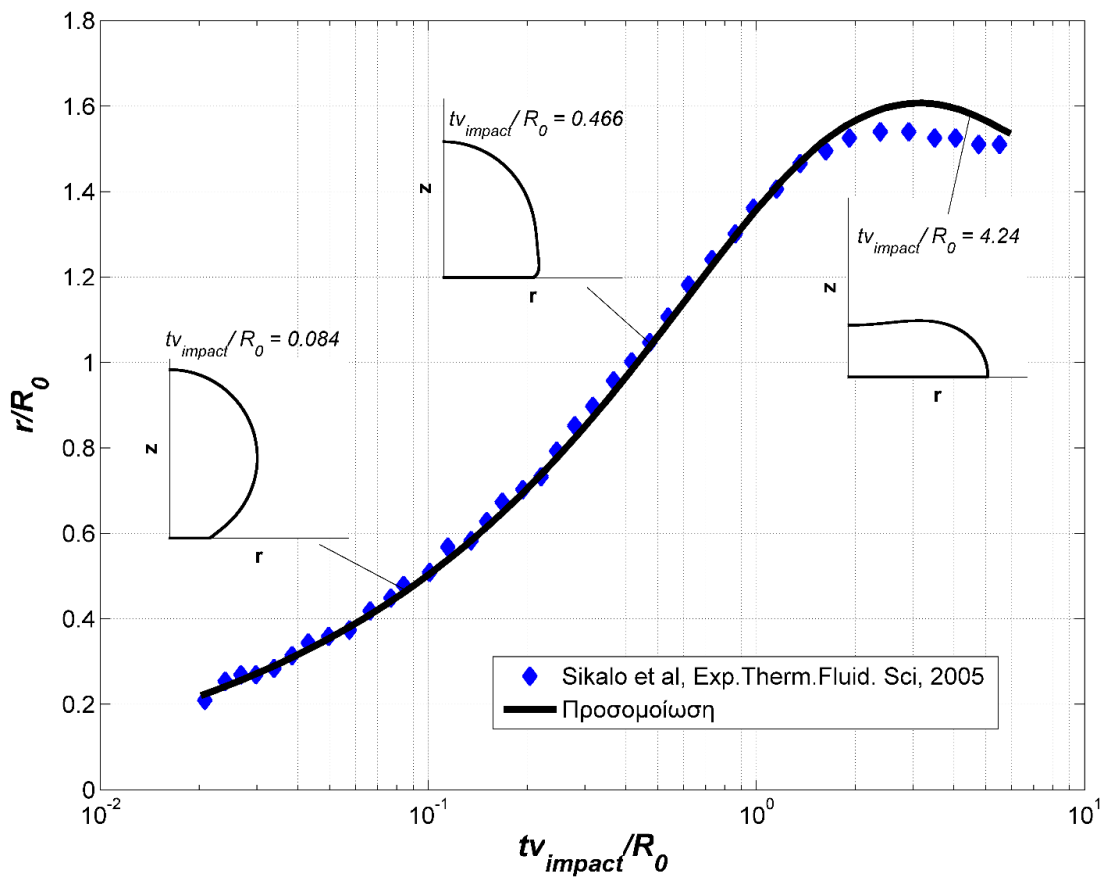
### 4.1. Γραμμή επαφής και δυναμική γωνία: Σύγκριση με πειραματικά αποτελέσματα

Προκειμένου να διαπιστωθεί η ορθότητα της μοντελοποίησης του φυσικού προβλήματος (βλ. Κεφ.2, Παρ.2), αναπαράγεται υπολογιστικά η πειραματική μελέτη<sup>30</sup> των *Sikalo et al, Exp.Therm.Fluid. Sci, 2005* και έπειτα συγκρίνονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης με τα πειραματικά αποτελέσματα. Το υπό μελέτη σύστημα είναι μια σταγόνα ακτίνας  $R_0 = 1.225 \text{ mm}$ , μίγματος γλυκερόλης (85%) / νερού (15%), πυκνότητας  $\rho_{droplet} = 1220 \text{ kg/m}^3$ , δυναμικού ιξώδους  $\mu_{droplet} = 116 \text{ cP}$ , επιφανειακής τάσης  $\gamma = 63 \text{ mN/m}$ , που προσκρούει με ταχύτητα  $v_{impact} = 1.04 \text{ m/s}$  σε μια επίπεδη στερεή επιφάνεια κεριού με γωνία επαφής  $\theta_Y = 93.5^\circ$ , σε περιβάλλον αέρα (Σχήμα 4.1).

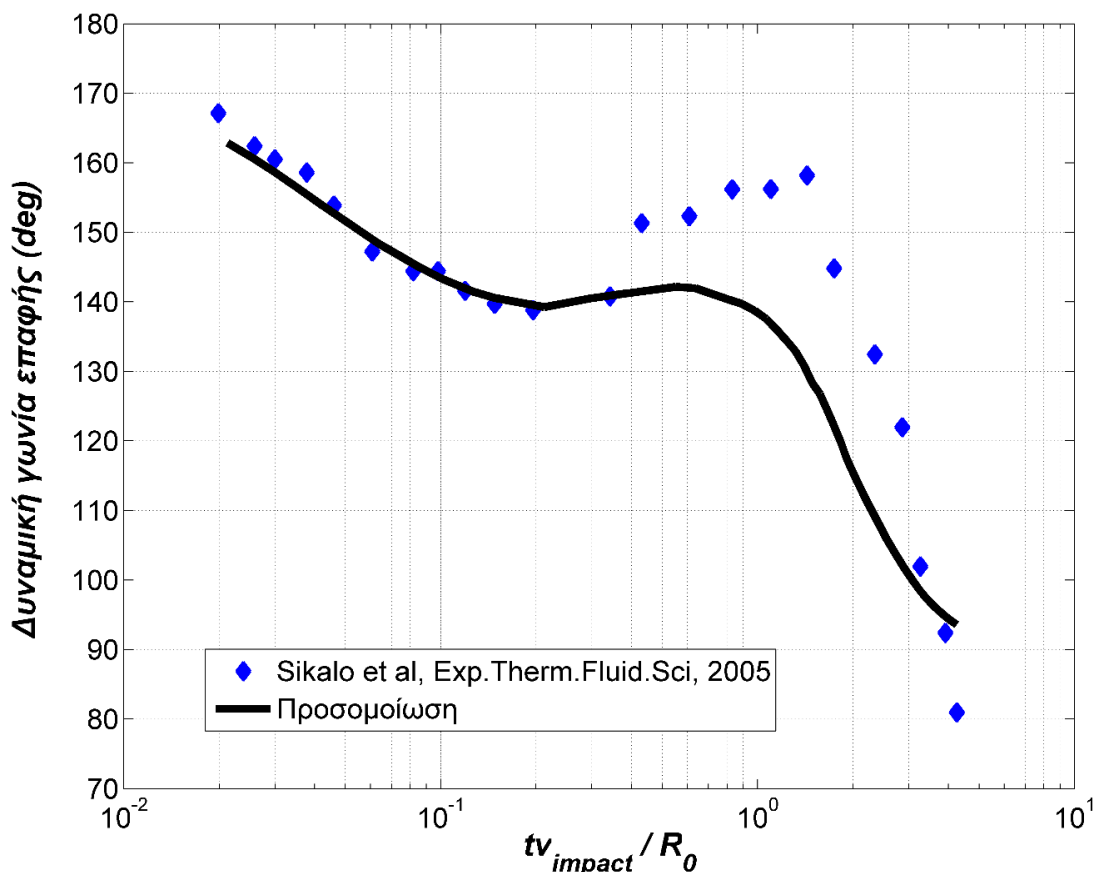


Σχήμα 4.1: Πειραματικές συνθήκες των *Sikalo et al, Exp.Therm.Fluid. Sci, 2005*

Στα σχήματα 4.2 και 4.3 φαίνεται η εξέλιξη της θέσης της γραμμής επαφής της σταγόνας και της δυναμικής γωνίας επαφής της σταγόνας με τη στερεή επιφάνεια, συναρτήσει του αδιάστατου χρόνου  $t \cdot v_{\text{impact}} / R_0$ . Σημειώνεται ότι η κλίμακα του χρόνου είναι λογαριθμική.



Σχήμα 4.2: Χρονική εξέλιξη της θέσης της γραμμής επαφής,  
 $C_1 = 12, C_2 = 10, \sigma = 9 \cdot 10^{-3}, \varepsilon = 8 \cdot 10^{-3}, w^{LS} = 5164, \beta_{sl} = 10^3$



Σχήμα 4.3: Χρονική εξέλιξη της δυναμικής γωνίας επαφής

Παρατηρείται ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης τόσο για την θέση της γραμμής επαφής όσο και για την δυναμική γωνία επαφής, προσεγγίζουν αρκετά καλά τα πειραματικά αποτελέσματα για το μεγαλύτερο χρονικό κομμάτι της προσομοίωσης. Αξίζει να τονισθεί ότι αυτή η συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις συμβαίνει παρόλο που η δυναμική γωνία επαφής στην προσέγγιση μας, δεν δίνεται από κάποιον εμπειρικό τύπο (π.χ Cox-Voinov), αντιθέτως απορρέει φυσικά από την αλληλεπίδραση των τριχοειδών δυνάμεων και της πίεσης Derjaguin. Πρέπει να σημειωθεί βέβαια, ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης εμφανίζουν μια μικρή απόκλιση από τα πειραματικά δεδομένα ιδίως για μεγαλύτερους χρόνους. Αυτό οφείλεται στην υπόθεση ότι η επιφάνεια είναι εντελώς λεία. Στην πραγματικότητα η συγκεκριμένη επιφάνεια<sup>30</sup> έχει μια τραχύτητα μικροσκοπικής κλίμακας (ύψους περίπου 0.3 μm). Σε μεγάλους χρόνους λοιπόν, οι δυνάμεις αδράνειας της σταγόνας εξασθενούν και τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της επιφάνειας στην μικρο-κλίμακα επηρεάζουν σημαντικά την δυναμική συμπεριφορά της σταγόνας, καθώς η γραμμή επαφής προσαρμόζεται στη γεωμετρία της τραχύτητας επιφέροντας αύξηση της τριβής. Συμπερασματικά, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι το

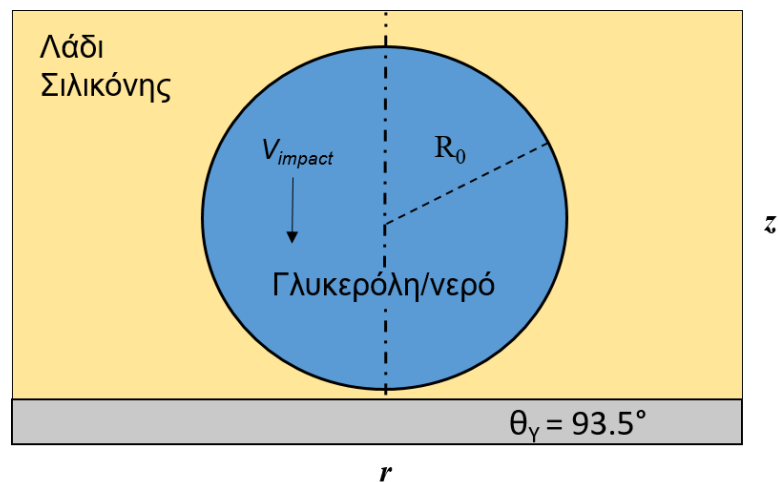
μοντέλο προσομοιάζει με ικανοποιητικό τρόπο την δυναμική συμπεριφορά μιας σταγόνας που προσκρούει σε μια επίπεδη στερεή επιφάνεια.

## 4.2. Χαρτογράφηση του φαινομένου της παγίδευσης της περιβάλλουσας φάσης

Αφού επιβεβαιώθηκε ότι το μοντέλο λειτουργεί ορθά, σε αυτήν την παράγραφο παρουσιάζονται αποτελέσματα που αφορούν την παγίδευση της περιβάλλουσας φάσης ανάμεσα στη σταγόνα και στη στερεή επιφάνεια.

### 4.2.1. Περίπτωση υψηλής επιφανειακής τάσης

Προκειμένου να αναγνωρισθούν οι συνθήκες που επάγουν το φαινόμενο της παγίδευσης της περιβάλλουσας φάσης, εξετάστηκε το σύστημα μιας σταγόνας μίγματος γλυκερόλης (85%) / νερού (15%) (ακτίνα  $R_0 = 1.225$  mm, πυκνότητα  $\rho_{droplet} = 1220$  kg/m<sup>3</sup>, δυναμικό ιξώδες  $\mu_{droplet} = 116$  cP, επιφανειακή τάση  $\gamma = 63$  mN/m) που προσκρούει σε μια στερεή επιφάνεια με γωνία επαφής  $\theta_Y = 93.5^\circ$ , σε περιβάλλουσα φάση λαδιού σιλικόνης με πυκνότητα  $\rho_{amb} = 950$  kg/m<sup>3</sup> (σχήμα 4.4).



Σχήμα 4.4: Σύστημα σταγόνας που προσκρούει σε επίπεδη στερεή επιφάνεια, σε περιβάλλον λαδιού σιλικόνης

Στο σύστημα πραγματοποιήθηκαν αρκετές υπολογιστικές προσομοιώσεις για διαφορετικές τιμές της ταχύτητας πρόσκρουσης της σταγόνας,  $v_{impact}$ , και του δυναμικού ιξώδους της περιβάλλουσας φάσης,  $\mu_{amb}$ . Έτσι, για κάθε «ζευγάρι» τιμών  $v_{impact} - \mu_{amb}$

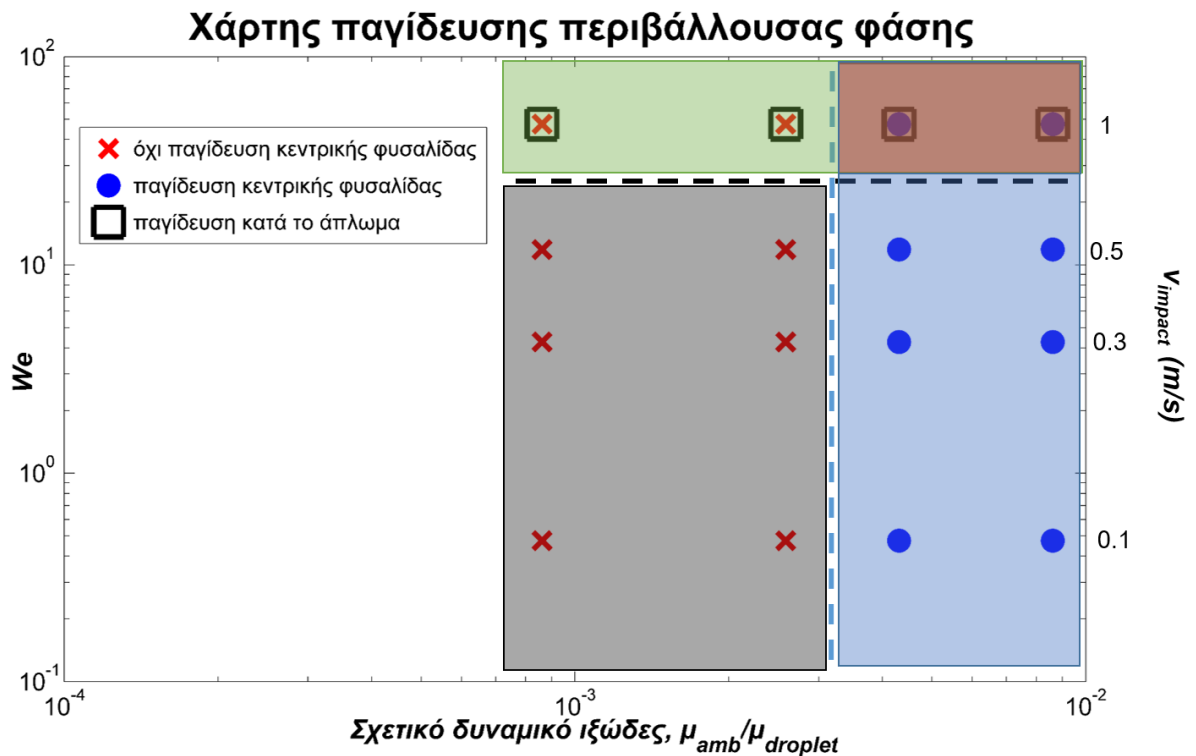


εξετάστηκε αν υπάρχουν φαινόμενα παγίδευσης της περιβάλλουσας φάσης ή όχι. Έπειτα, κατασκευάστηκε ένας «χάρτης» (σχήμα 4.5) στον οποίο απεικονίζεται σε ποιες «περιοχές» ταχύτητας πρόσκρουσης και ιξώδους περιβάλλουσας φάσης υπάρχουν φαινόμενα παγίδευσης. Η αριστερή  $y$ -συντεταγμένη του χάρτη είναι ο αδιάστατος αριθμός Weber (εξίσωση 4-1),  $We$ , που εκφράζει τις δυνάμεις αδράνειας που δρουν στην σταγόνα και είναι μια αύξουσα συνάρτηση της ταχύτητας πρόσκρουσης ως εξής:

$$We = \frac{\rho_L \cdot v_{impact}^2 \cdot (2R_0)}{\gamma} \quad (4-1)$$

Η δεξιά  $y$ -συντεταγμένη του χάρτη είναι η ταχύτητα πρόσκρουσης της σταγόνας,  $v_{impact}$ . Τέλος, η  $x$ -συντεταγμένη του χάρτη είναι το σχετικό δυναμικό ιξώδες των δύο φάσεων, δηλαδή το δυναμικό ιξώδες της περιβάλλουσας φάσης,  $\mu_{amb}$ , προς το δυναμικό ιξώδες της σταγόνας,  $\mu_{droplet}$ . Σημειώνεται ότι και οι δύο άξονες βρίσκονται σε λογαριθμική κλίμακα.

Να υπενθυμιστεί σε αυτό το σημείο ότι έχουν παρατηρηθεί στη βιβλιογραφία δύο περιπτώσεις παγίδευσης της περιβάλλουσας φάσης, η παγίδευση κεντρικής φυσαλίδας και η παγίδευση περιβάλλουσας φάσης κατά το άπλωμα της σταγόνας (βλ. Κεφ.1, Παρ.7). Έτσι, τα κόκκινα «X» υποδηλώνουν την έλλειψη του φαινομένου παγίδευσης της κεντρικής φυσαλίδας, οι μπλε κύκλοι υποδηλώνουν την παρουσία της παγίδευσης κεντρικής φυσαλίδας περιβάλλουσας φάσης και τα μαύρα τετράγωνα υποδηλώνουν την παρουσία φαινομένων παγίδευσης κατά το άπλωμα της σταγόνας. Τέλος, η έλλειψη μαύρων τετραγώνων υποδηλώνει την έλλειψη παγίδευσης περιβάλλουσας φάσης κατά το άπλωμα της σταγόνας.



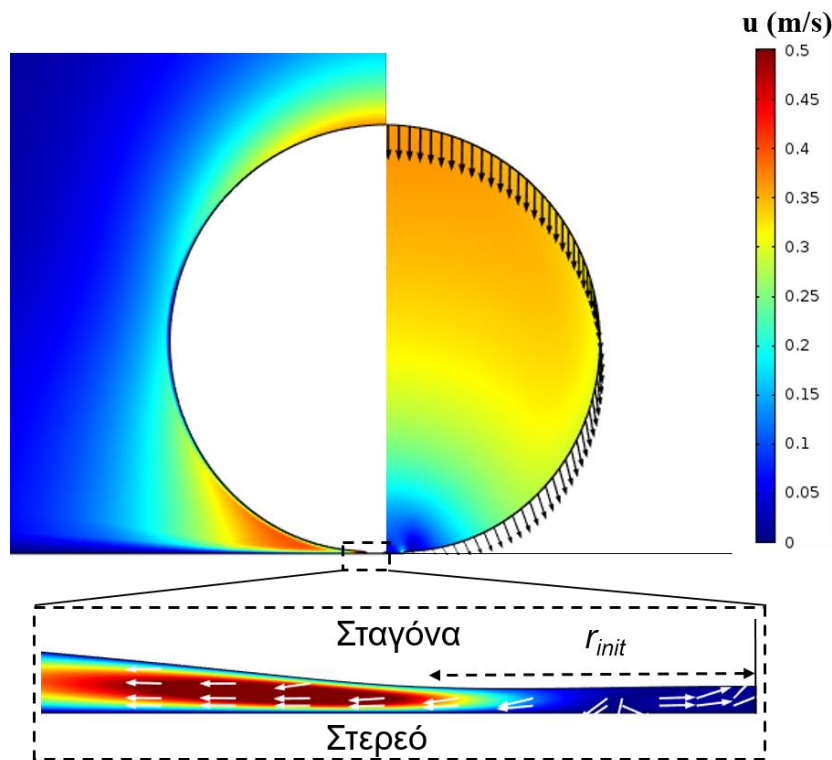
**Σχήμα 4.5: Χάρτης παγίδευσης περιβάλλουσας φάσης λαδιού σιλικόνης**

Παρατηρείται στο χάρτη, ότι στην περιοχή που το σχετικό δυναμικό ιξώδες είναι χαμηλό και ο αριθμός Weber βρίσκεται στο διάστημα  $10^{-1} < We < 30$ , δεν υπάρχει κανενός είδους παγίδευση (ούτε η πρώτη ούτε η δεύτερη περίπτωση). Αυτή η περιοχή σκιάζεται με μαύρο χρώμα. Στο ίδιο διάστημα αριθμού Weber, αν αυξηθεί το σχετικό δυναμικό ιξώδες μεταπηδάμε δεξιότερα της μπλέ διακεκομμένης γραμμής, στην περιοχή σκιασμένη με μπλέ χρώμα, όπου εκδηλώνονται φαινόμενα παγίδευσης κεντρικής φυσαλίδας. Τα φαινόμενα αυτά εκδηλώνονται όπως φαίνεται στο χάρτη και για υψηλότερα σχετικά δυναμικά ιξώδη. Όπως αναφέρθηκε και στο Κεφ.1, Παρ.7, η παγίδευση της περιβάλλουσας φάσης συμβαίνει σε δύο στάδια. Αρχικά, η παγιδευμένη περιβάλλουσα φάση σχηματίζει ένα δίσκο κάτω από τη σταγόνα, κοντά στον άξονα συμμετρίας της. Έπειτα, ο δίσκος συστέλλεται απότομα σε σχήμα φυσαλίδας που παραμένει κοντά στον άξονα συμμετρίας της σταγόνας.

Από την άλλη μεριά, η περίπτωση της παγίδευσης περιβάλλουσας φάσης κατά το άπλωμα της σταγόνας δε φαίνεται να συμβαίνει όσο συχνά συμβαίνει η παγίδευση κεντρικής φυσαλίδας. Η περιοχή στην οποία υπάρχει παγίδευση περιβάλλουσας φάσης κατά το άπλωμα της σταγόνας σκιάζεται με πράσινο χρώμα στο χάρτη. Παρατηρείται, ότι αυτό το είδος παγίδευσης εκδηλώνεται μόνο αν ξεπεραστεί κάποια τιμή του αριθμού Weber και

συμβαίνει σε όλο το εύρος του σχετικού δυναμικού ιξώδους, άπαξ και ξεπεραστεί αυτή η κρίσιμη τιμή. Όπως αναφέρθηκε και στο Κεφ.1, Παρ.7, αυτό το είδος παγίδευσης συμβαίνει μετά την πρόσκρουση της σταγόνας στο στερεό, σε αντίθεση με την περίπτωση της παγίδευσης κεντρικής φυσαλίδας. Αρχικά, η σταγόνα «σκεπάζει» μια ποσότητα περιβάλλουσας φάσης καθώς απλώνει, και η περιβάλλουσα φάση σχηματίζει σχήμα δίσκου. Έπειτα, ο δίσκος καταρρέει σε μικρές φυσαλίδες, όχι απαραίτητα του ίδιου μεγέθους.

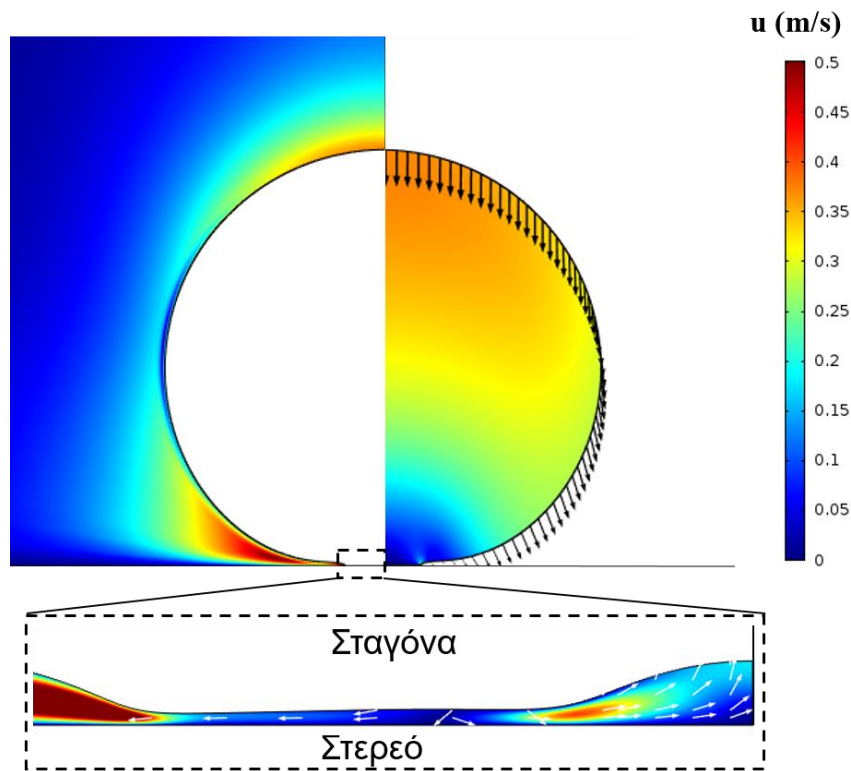
Τέλος, παρατηρείται στο χάρτη και μια επικάλυψη της πράσινης και της μπλε περιοχής που σκιάζεται με κόκκινο χρώμα. Σε αυτήν την περιοχή, υπάρχει και παγίδευση κεντρικής φυσαλίδας και παγίδευση περιβάλλουσας φάσης κατά το άπλωμα της σταγόνας.



Σχήμα 4.6: Προφίλ ταχύτητας του συστήματος κατά το σχηματισμό του δίσκου περιβάλλουσας φάσης

Στα σχήματα 4.6 και 4.7 εξετάζεται η περίπτωση όπου  $We \approx 14$  και  $\mu_{amb} / \mu_{droplet} \approx 4 \cdot 10^{-3}$ , περιοχή όπου εκδηλώνεται φαινόμενο παγίδευσης κεντρικής φυσαλίδας. Στο σχήμα 4.6 απεικονίζεται το προφίλ ταχύτητας του συστήματος, τη στιγμή που σχηματίζεται ο αρχικός δίσκος παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης. Στο δεξί κομμάτι του σχήματος απεικονίζεται το προφίλ ταχύτητας της σταγόνας και στο αριστερό κομμάτι το προφίλ ταχύτητας της περιβάλλουσας φάσης. Αν μεγεθυνθεί το σχήμα κοντά στη γραμμή επαφής

της σταγόνας, φαίνεται καθαρά ο σχηματισμός του δίσκου περιβάλλουσας φάσης. Παρατηρείται ότι μια ποσότητα περιβάλλουσας φάσης αποκτά μεγάλη ταχύτητα και εκτοπίζεται προς τα έξω καθώς τις ασκούνται τεράστιες δυνάμεις από την πτώση της σταγόνας, ενώ η περιβάλλουσα φάση κάτω από το δίσκο έχει μικρή ταχύτητα και μετακινείται προς τον άξονα συμμετρίας της σταγόνας. Τέλος, ο δίσκος έχει μια αρχική ακτίνα που απεικονίζεται στο σχήμα ως  $r_{init}$ .

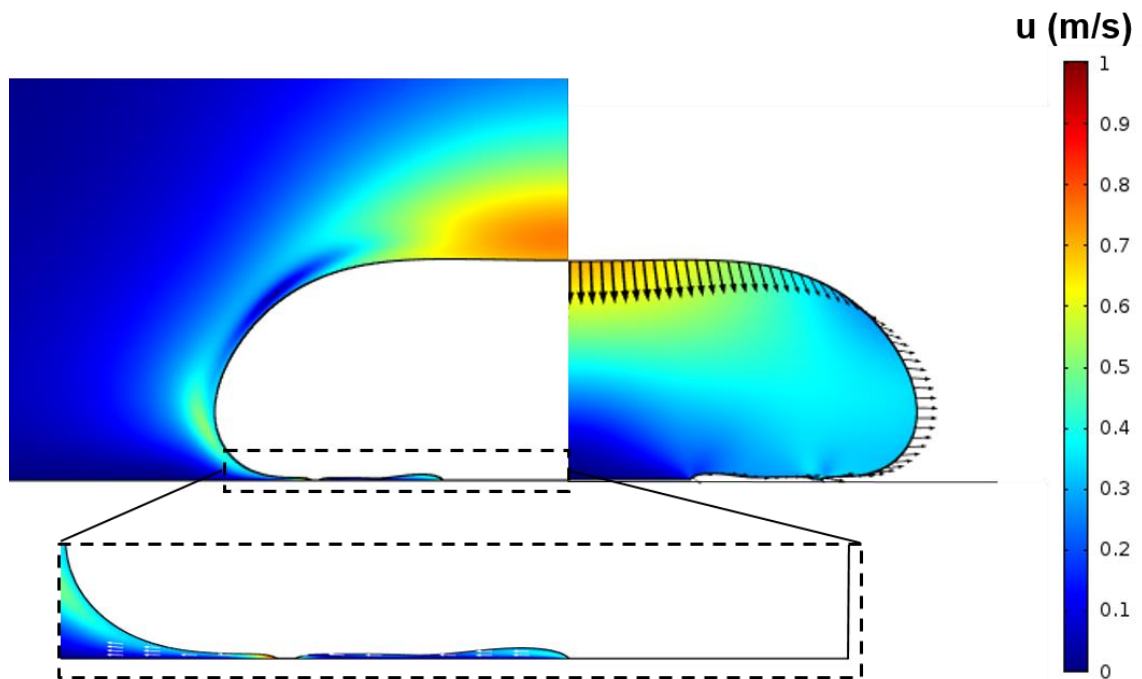


Σχήμα 4.7: Προφίλ ταχύτητας του συστήματος κατά το σχηματισμό της κεντρικής φυσαλίδας

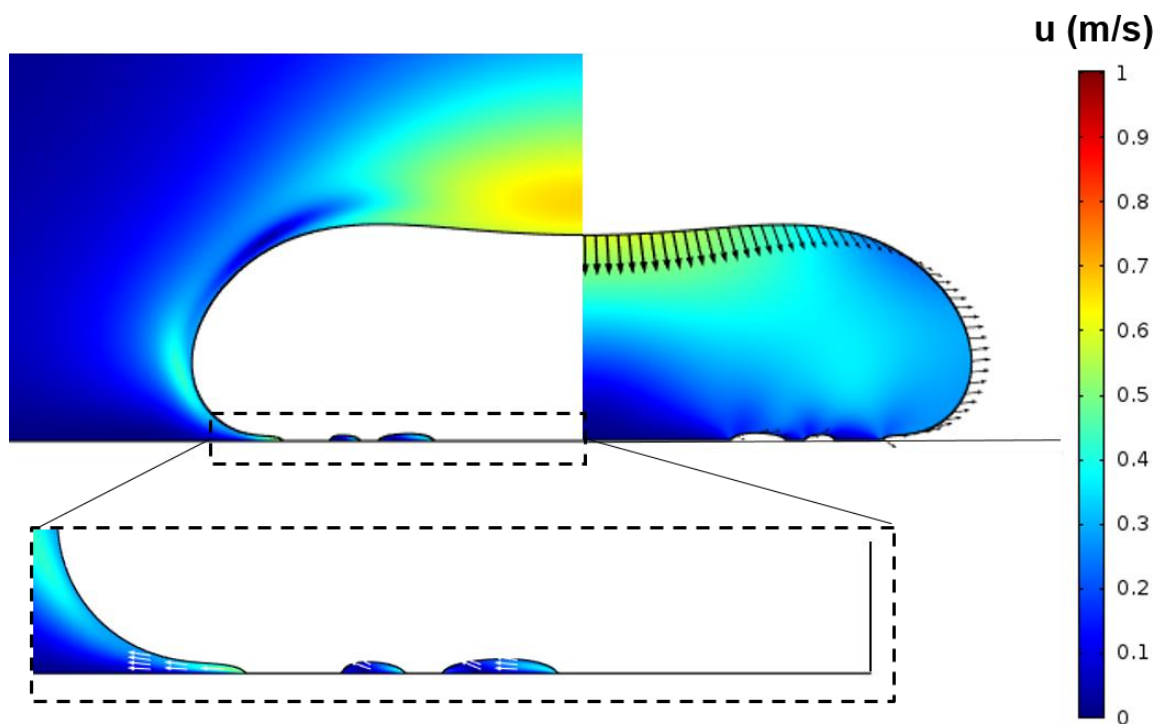
Στο σχήμα 4.7 απεικονίζεται με τον ίδιο τρόπο όπως και παραπάνω το προφίλ ταχύτητας του συστήματος, κατά το σχηματισμό της κεντρικής φυσαλίδας περιβάλλουσας φάσης. Όπως φαίνεται και στο σχήμα, η σταγόνα έχει απλώσει λίγο περισσότερο στην στερεή επιφάνεια και αν μεγεθυνθεί το σχήμα κοντά στη γραμμή επαφής της σταγόνας, παρατηρείται ότι καθώς η σταγόνα απλώνει εκτοπίζει με μεγάλη ταχύτητα περιβάλλουσα φάση. Παράλληλα, κοντά στον άξονα συμμετρίας της σταγόνας, η περιβάλλουσα φάση εγκλωβίζεται, έχοντας μικρότερη ταχύτητα, δημιουργώντας μια φυσαλίδα.

Παρακάτω παρουσιάζονται κάποια αποτελέσματα που αφορούν το δεύτερο είδος παγίδευσης της περιβάλλουσας φάσης, την παγίδευση κατά το άπλωμα της σταγόνας. Στα σχήματα 4.8 και 4.9 εξετάζεται το σύστημα με  $We \approx 48.4$  και  $\mu_{amb} / \mu_{droplet} \approx 8 \cdot 10^{-3}$ . Στο σχήμα 4.8 φαίνεται το προφίλ ταχύτητας του συστήματος τη στιγμή που έχει σχηματιστεί

ο δίσκος της περιβάλλουσας φάσης και στο σχήμα 4.9 το προφίλ ταχύτητας τη στιγμή της κατάρρευσης του δίσκου σε φυσαλίδες.



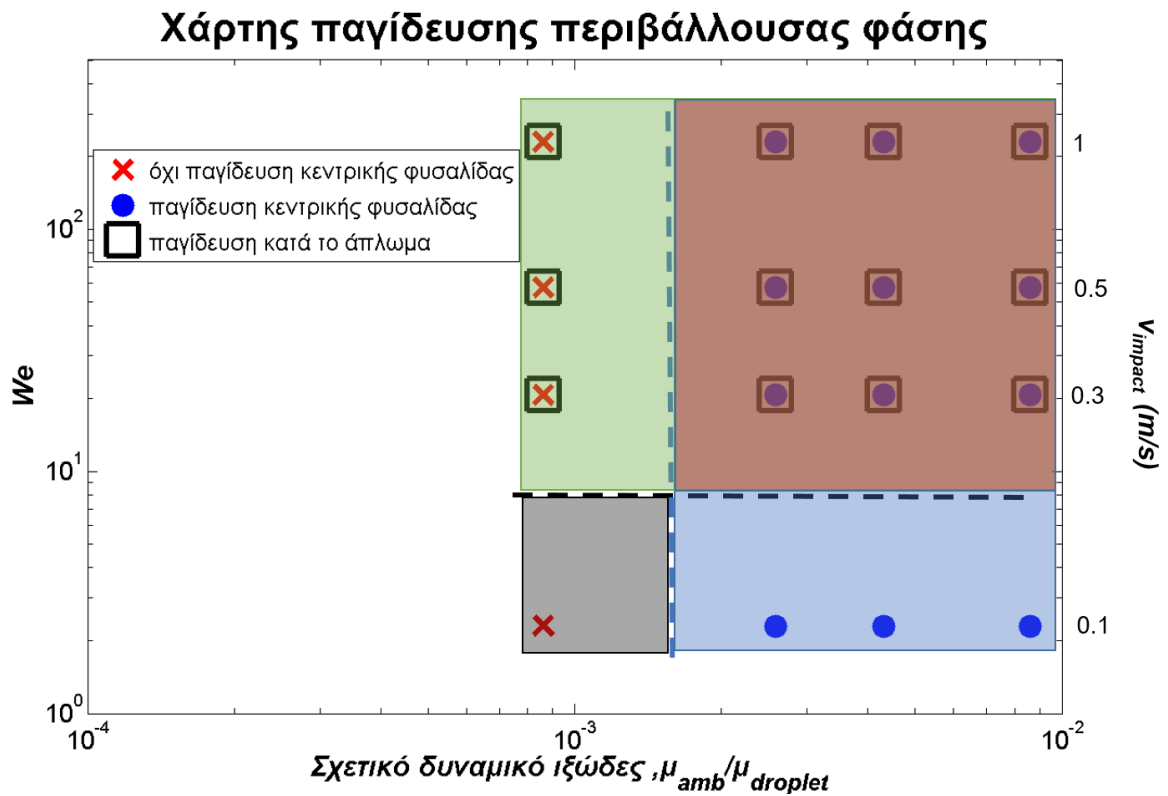
Σχήμα 4.8: Προφίλ ταχύτητας του συστήματος τη στιγμή παγίδευσης δίσκου περιβάλλουσας φάσης



Σχήμα 4.9: Προφίλ ταχύτητας του συστήματος τη στιγμή κατάρρευσης του δίσκου περιβάλλουσας φάσης σε φυσαλίδες.

#### 4.2.2. Περίπτωση χαμηλής επιφανειακής τάσης

Αφού εξετάστηκε η επίδραση της ταχύτητας πρόσκρουσης και του δυναμικού ιξώδους της περιβάλλουσας φάσης στα φαινόμενα παγίδευσης της περιβάλλουσας φάσης, επαναλήφθηκε ακριβώς η ίδια υπολογιστική μελέτη, για τις ίδιες ταχύτητες πρόσκρουσης και τα ίδια δυναμικά ιξώδη περιβάλλουσας φάσης, αυτή τη φορά μειώνοντας την διεπιφανειακή τάση σταγόνας/περιβάλλουσας φάσης σε  $\gamma = 13 \text{ mN/m}$  από  $63 \text{ mN/m}$ . Κάτι τέτοιο στην πραγματικότητα είναι απολύτως εφικτό και πραγματοποιείται προσθέτοντας στο μίγμα γλυκερόλης/νερού μια μικρή ποσότητα επιφανειοδραστικής ουσίας (π.χ υγρό σαπούνι). Στο σχήμα 4.10 φαίνεται ο νέος χάρτης παγίδευσης που προκύπτει μετά από αυτήν την αλλαγή.



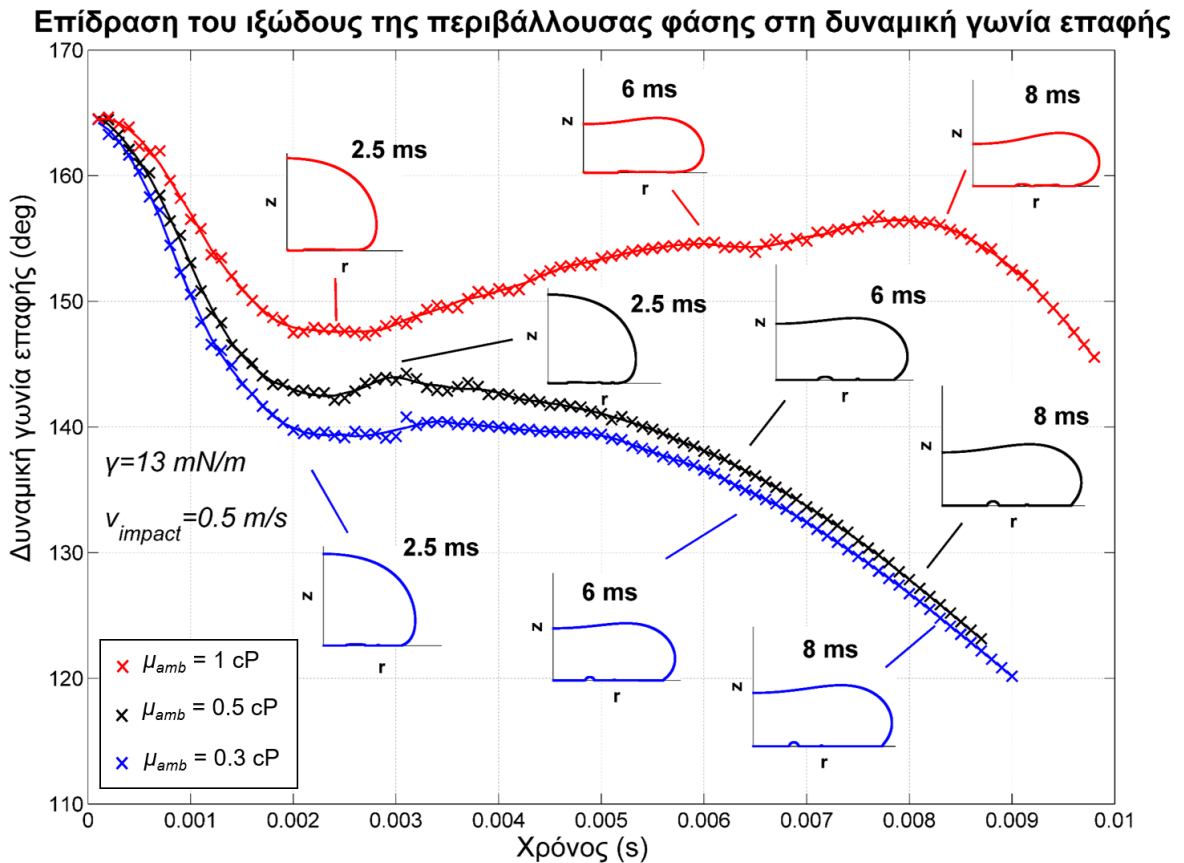
Αρχικά, παρατηρείται ότι ενώ οι ταχύτητες πρόσκρουσης είναι οι ίδιες, ο αριστερός  $y$ -άξονας έχει αλλάξει. Αυτό συμβαίνει γιατί έχει μειωθεί η διεπιφανειακή τάση,  $\gamma$ , και συνεπώς για τις ίδιες ταχύτητες πρόσκρουσης ο αριθμός Weber είναι πλέον μεγαλύτερος, σύμφωνα με την εξίσωση (4-1). Παρόλαυτα, είναι σημαντικό να υπογραμμισθεί ότι για συνδυασμούς ταχυτήτων πρόσκρουσης και δυναμικού ιξώδους περιβάλλουσας φάσης που

στην προηγούμενη μελέτη δεν υπήρχε παγίδευση, πλέον εμφανίζονται φαινόμενα παγίδευσης. Η μαύρη διακεκομμένη γραμμή που προηγουμένως όριζε από ποια ταχύτητα πρόσκρουσης και πάνω υπάρχουν φαινόμενα παγίδευσης κατά το άπλωμα της σταγόνας έχει μετακινηθεί χαμηλότερα, υποδηλώνοντας ότι τα φαινόμενα παγίδευσης αυτού του είδους γίνονται πλέον και για χαμηλότερες ταχύτητες πρόσκρουσης. Επίσης, η μπλέ διακεκομμένη γραμμή έχει μετακινηθεί αριστερότερα δείχνοντας ότι τα φαινόμενα παγίδευσης κεντρικής φυσαλίδας συμβαίνουν πλέον και σε χαμηλότερα σχετικά δυναμικά ιξώδη σε σχέση με προηγουμένως. Τέλος, αξίζει να σημειωθεί ότι η περιοχή που υποδηλώνει την επικάλυψη των δύο φαινομένων (περιοχή σκιασμένη με κόκκινο χρώμα), είναι πολύ πιο εκτενής σε σχέση με πριν, γεγονός που δείχνει την τεράστια μεταβολή του χάρτη λόγω της μείωσης της διεπιφανειακής τάσης.

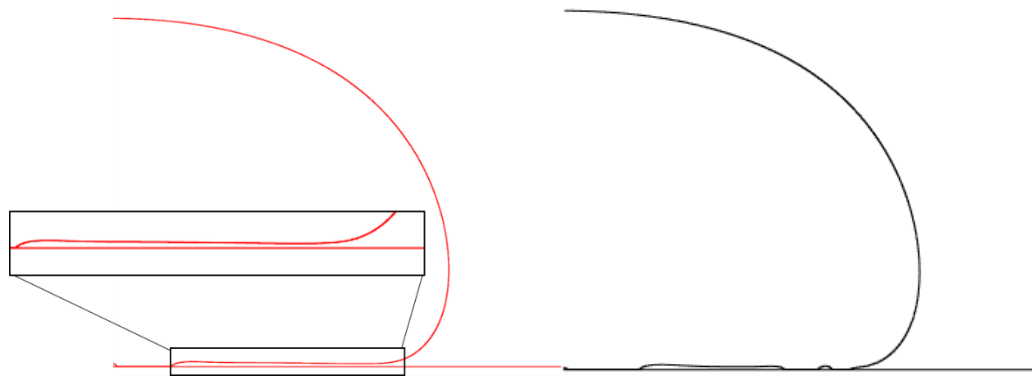
### **4.3. Επίδραση του ιξώδους της περιβάλλουσας φάσης στη δυναμική γωνία επαφής**

Παρακάτω παρουσιάζονται αποτελέσματα με περισσότερες λεπτομέρειες για το δυναμικό σχήμα της σταγόνας. Συγκεκριμένα, εξετάζεται η επίδραση που έχει το δυναμικό ιξώδες της περιβάλλουσας φάσης στο σχήμα της σταγόνας. Έτσι, στο Σχήμα 4.11 απεικονίζεται η χρονική εξέλιξη της δυναμικής γωνίας επαφής για διαφορετικά δυναμικά ιξώδη περιβάλλουσας φάσης. Οι σταγόνες έχουν επιφανειακή τάση  $\gamma = 13 \text{ mN/m}$  και προσκρούουν στο στερεό με ταχύτητα  $v_{\text{impact}} = 0.5 \text{ m/s}$ . Ενώ τα σχήματα των σταγόνων για ίδιους χρόνους (2.5 ms, 6 ms και 8 ms) φαίνονται ίδια, παρατηρείται ότι στην περίπτωση του υψηλότερου δυναμικού ιξώδους ( $\mu_{\text{amb}} = 1 \text{ cP}$ , κόκκινη καμπύλη) η συμπεριφορά της δυναμικής γωνίας επαφής είναι αρκετά διαφορετική από αυτή της μαύρης καμπύλης ( $\mu_{\text{amb}} = 0.5 \text{ cP}$ ) και της μπλε καμπύλης ( $\mu_{\text{amb}} = 0.3 \text{ cP}$ ). Αυτό συμβαίνει γιατί το λεπτό φιλμ περιβάλλουσας φάσης που δημιουργείται ανάμεσα στη σταγόνα και την στερεή επιφάνεια (το οποίο αργότερα καταρρέει και παγιδεύεται), αργεί να καταρρεύσει όσο αυξάνεται το ιξώδες της περιβάλλουσας φάσης. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα, το μέτωπο της σταγόνας να «ταξιδεύει» πάνω στο λεπτό φιλμ για αρκετό χρόνο και ως αποτέλεσμα να διατηρείται σχεδόν σταθερή για μεγάλο χρονικό διάστημα. Αντιθέτως, στις περιπτώσεις των χαμηλότερων δυναμικών ιξωδών περιβάλλουσας φάσης ( $\mu_{\text{amb}} = 0.5 \text{ cP}$  και  $\mu_{\text{amb}} = 0.3 \text{ cP}$ ), η δυναμική γωνία επαφής μειώνεται αρκετά γρήγορα και τείνει προς την ισορροπία. Σημειώνεται ότι η δυναμική γωνία επαφής υπολογίζεται με την προσαρμογή ενός πολυωνύμου στην περιοχή κοντά στη γραμμή επαφής της σταγόνας.

Στο σχήμα 4.12 φαίνεται το σχήμα της σταγόνας για  $\mu_{amb} = 1$  cP (κόκκινη καμπύλη) και για  $\mu_{amb} = 0.5$  cP (μαύρη καμπύλη), όπου φαίνεται καθαρά η παρουσία του λεπτού φιλμ στην περίπτωση του υψηλότερου δυναμικού ιξώδους περιβάλλουσας φάσης.



**Σχήμα 4.11:** Χρονική εξέλιξη της δυναμικής γωνίας επαφής για διαφορετικά δυναμικά ιξώδη περιβάλλουσας φάσης



**Σχήμα 4.12:** Σχήματα σταγόνων στα 2.5 ms, για  $\mu_{amb} = 1$  cP (κόκκινη καμπύλη) και  $\mu_{amb} = 0.5$  cP (μαύρη καμπύλη). Παρουσία φίλμ στη περίπτωση του υψηλότερου δυναμικού ιξώδους.



Για μεγαλύτερους χρόνους το λεπτό φιλμ καταρρέει ακόμα και στην περίπτωση του υψηλότερου δυναμικού ιξώδους περιβάλλουσας φάσης, αλλά η φαινόμενη γραμμή επαφής δεν βρίσκεται σε πλήρη επαφή με το στερεό ακόμα (Σχήμα 4.13). Έτσι, δικαιολογείται και η μεγάλη διαφορά στη δυναμική γωνία επαφής για τον ίδιο χρόνο.



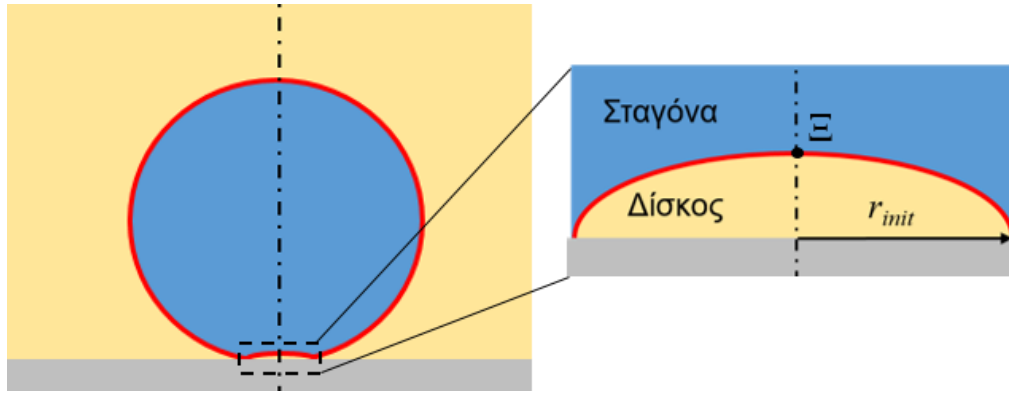
**Σχήμα 4.13:** Σχήματα σταγόνων στα 8 ms, για  $\mu_{amb} = 1$  cP (κόκκινη καμπύλη) και  $\mu_{amb} = 0.5$  cP (μαύρη καμπύλη). Στο υψηλότερο δυναμικό ιξώδες περιβάλλουσας φάσης η γραμμή επαφής δε βρίσκεται σε πλήρη επαφή με το στερεό.

#### 4.4. Εξέλιξη του σχήματος της παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης

Μέχρι τώρα, μελετήθηκαν οι συνθήκες στις οποίες συμβαίνουν ή όχι φαινόμενα παγίδευσης της περιβάλλουσας φάσης και εξετάστηκαν μακροσκοπικά μεγέθη, όπως η θέση της γραμμής επαφής της σταγόνας και η δυναμική γωνία επαφής της σταγόνας. Σε αυτή την παράγραφο παρουσιάζονται αποτελέσματα που αφορούν την δυναμική εξέλιξη του σχήματος της παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης. Συγκεκριμένα, θα μας απασχολήσει το σχήμα της παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης στην περίπτωση παγίδευσης της κεντρικής φυσαλίδας.

##### 4.4.1. Αρχική ακτίνα δίσκου

Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή, στην περίπτωση της παγίδευσης κεντρικής φυσαλίδας, η παγιδευμένη περιβάλλουσα φάση σχηματίζει αρχικά έναν δίσκο (βλ. Κεφ.1, Παρ.7). Ο δίσκος έχει αρχική ακτίνα  $r_{init}$ , η οποία ελαττώνεται με την πάροδο του χρόνου καθώς ο δίσκος συστέλλεται σε σχήμα φυσαλίδας. Σημειώνεται ότι, ο άξονας συμμετρίας της σταγόνας είναι ταυτόχρονα και άξονας συμμετρίας του δίσκου (σχήμα 4.14).



Σχήμα 4.14: Ο άξονας συμμετρίας της σταγόνας συμπίπτει με αυτόν του δίσκου

Οι Hicks et al (Hicks et al, *J. Fluid. Mech*, 2010), μετά από μια σειρά υπολογιστικών προσομοιώσεων για σταγόνες νερού που προσκρούουν σε επίπεδη στερεή επιφάνεια σε περιβάλλον αέρα, πρότειναν την παρακάτω θεωρητική σχέση<sup>31</sup> (εξίσωση 4-2), που υπολογίζει την αρχική ακτίνα αυτού του δίσκου:

$$r_{init} = K \left( \frac{4\mu_{amb}}{\rho_L \cdot v_{impact}} \right)^{1/3} R_{bc}^{2/3} \quad (4-2)$$

όπου  $\mu_{amb}$ : δυναμικό ιξώδες της περιβάλλουσας φάσης,

$\rho_L$ : πυκνότητα της σταγόνας,

$v_{impact}$ : ταχύτητα πρόσκρουσης της σταγόνας,

$K$ : αδιάστατη παράμετρος,

$R_{bc}$ : το αντίστροφο της καμπυλότητας του κάτω μέρους της σταγόνας τη στιγμή της δημιουργίας του δίσκου (υπολογίζεται στο σημείο Ξ, σχήμα 4.14).

Για περιβάλλον αέρα, οι Hicks et al υπολόγισαν το  $K = 3.8$ .

Επιχειρήθηκε μια σύγκριση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης με την θεωρητική σχέση (4-2), για την αρχική ακτίνα του δίσκου συναρτήσει της ταχύτητας πρόσκρουσης της σταγόνας. Το σύστημα που μελετήθηκε είναι πάλι μια σταγόνα μίγματος γλυκερόλης (85%) / νερού (15%) (ακτίνα  $R_0 = 1.225$  mm, πυκνότητα  $\rho_{droplet} = 1220$  kg/m<sup>3</sup>, δυναμικό ιξώδες  $\mu_{droplet} = 116$  cP, επιφανειακή τάση  $\gamma = 63$  mN/m) αλλά αυτή τη φορά το ιξώδες της περιβάλλουσας φάσης ήταν σταθερό και ίσο με  $\mu_{amb} = 0.5$  cP. Επίσης, υπολογίστηκε το  $R_{bc}$  κάθε σταγόνας και εξάχθηκε ο μέσος όρος των  $R_{bc}$ . Για την χάραξη της θεωρητικής

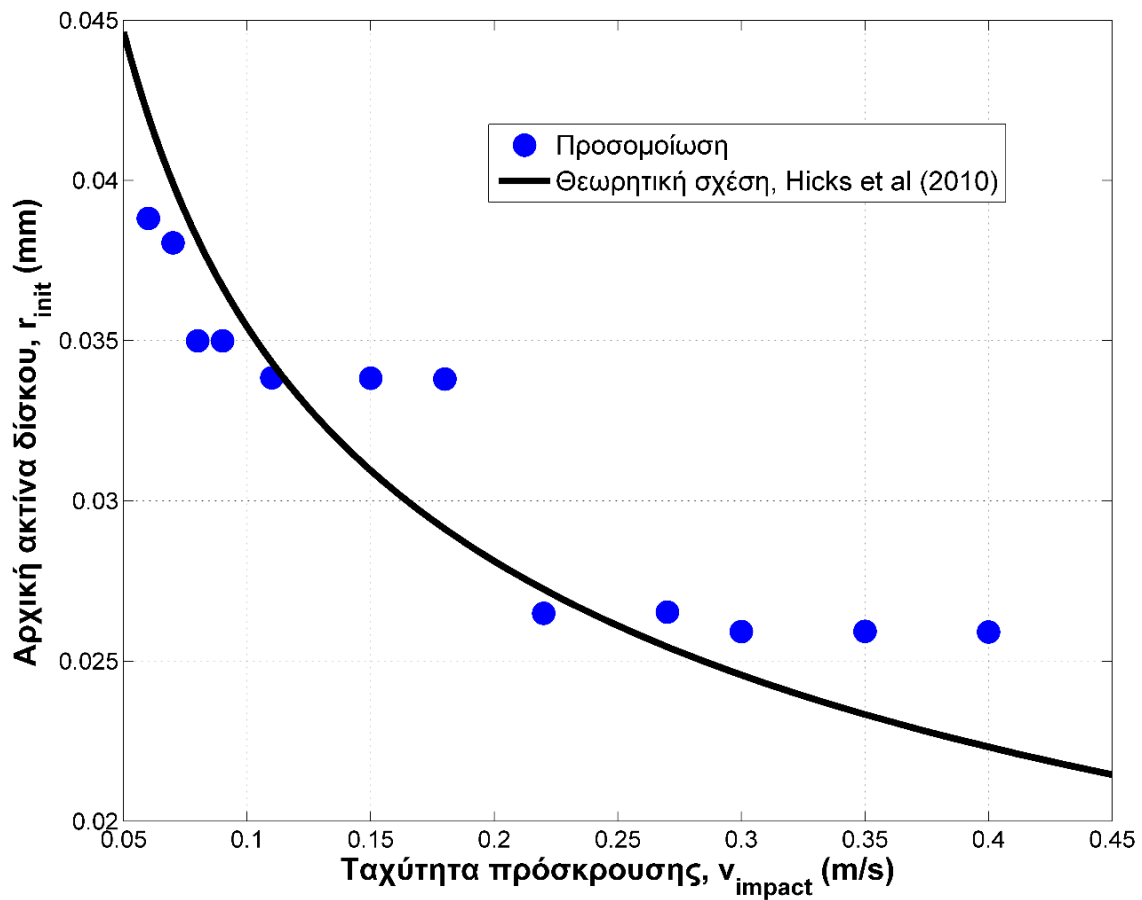
σχέσης (4-2) (μαύρη καμπύλη), χρησιμοποιήθηκε ο μέσος όρος των  $R_{bc}$ . Τέλος, υπολογίστηκε η αδιάστατη παράμετρος  $K$  ως εξής:

$$r_{init} = K \left( \frac{4\mu_{amb}}{\rho_L \cdot v_{impact}} \right)^{1/3} R_{bc}^{2/3} \xrightarrow{A = \left( \frac{4\mu_{amb}}{\rho_L} \right)^{1/3} R_{bc}^{2/3}}$$

$$r_{init} = K \left( \frac{1}{v_{impact}} \right)^{1/3} A \xrightarrow{\div A \log} \log \left( \frac{r_{init}}{A} \right) = \log(K) + \frac{1}{3} \log \left( \frac{1}{v_{impact}} \right) \quad (4-3)$$

Πλέον το  $r_{init}$  και το  $v_{impact}$  τα συνδέει μια γραμμική σχέση, με  $\log(K)$  να είναι σταθερός όρος. Η εξίσωση (4-3) ισχύει για κάθε ένα αποτέλεσμα προσομοίωσης. Για δώδεκα ζεύγη τιμών  $r_{init} - v_{impact}$  επιλύεται το σύστημα και υπολογίζεται  $K=107.8$ .

Στο σχήμα 4.15 φαίνεται η εξάρτηση της αρχικής ακτίνας του δίσκου από την ταχύτητα πρόσκρουσης.

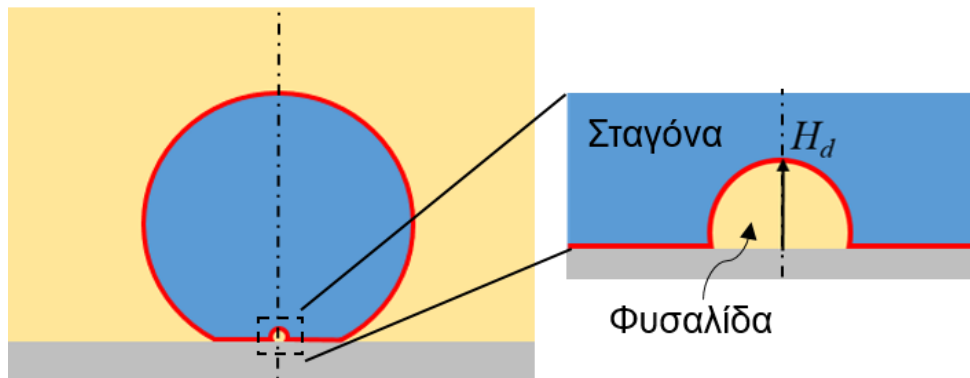


Σχήμα 4.15: Εξάρτηση της αρχικής ακτίνας του δίσκου για αποτελέσματα προσομοίωσης (μπλε κύκλοι) και για τη θεωρητική σχέση (4-2) (μαύρη καμπύλη).

Παρατηρείται ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης προσεγγίζουν ικανοποιητικά την τάση που υπαγορεύει η θεωρητική σχέση (4-2). Όσο η ταχύτητα πρόσκρουσης αυξάνεται τόσο μειώνεται η αρχική ακτίνα του δίσκου της παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης.

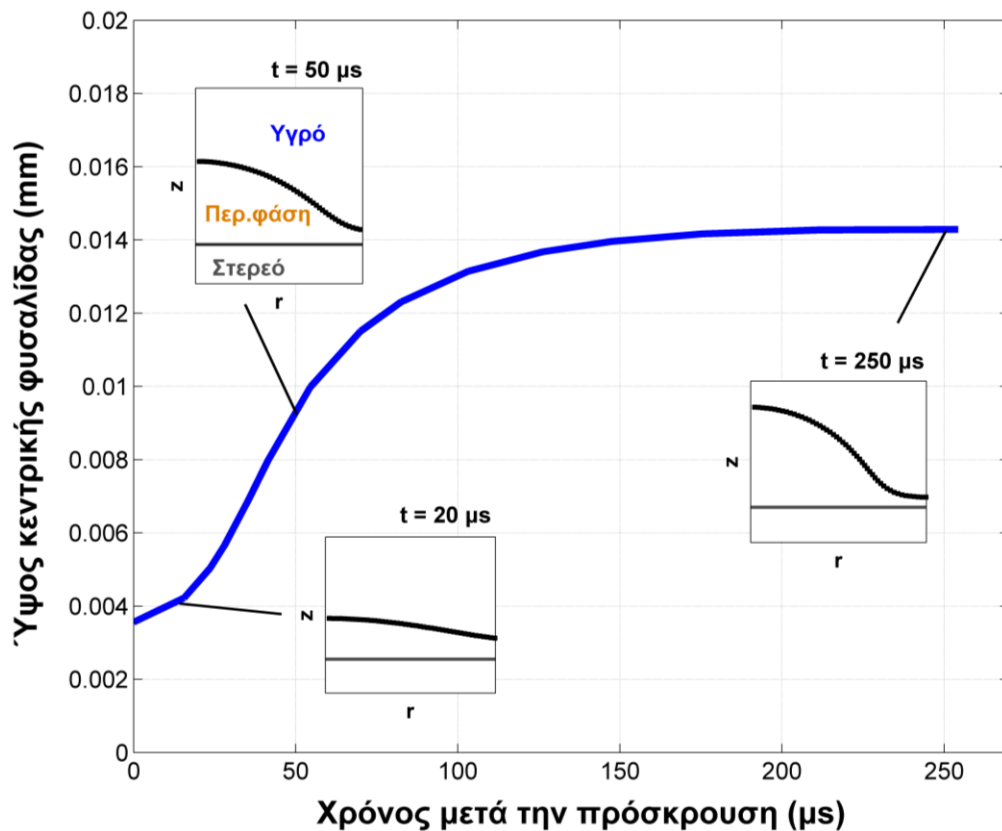
#### 4.4.2. Μέγιστο ύψος φυσαλίδας

Όπως αναφέρθηκε και στην εισαγωγή (βλ. Κεφ.1, Παρ.7), ο δίσκος αφού σχηματιστεί, συστέλλεται σε σχήμα φυσαλίδας για να ελαχιστοποιήσει την επιφανειακή του ενέργεια. Το ύψος της σχηματιζόμενης φυσαλίδας αυξάνει με τον χρόνο, μέχρι να φτάσει σε ένα μέγιστο ύψος,  $H_d$ . Το μέγιστο ύψος  $H_d$ , βρίσκεται και μετριέται πάνω στον άξονα συμμετρίας της σταγόνας, που συμπίπτει με τον άξονα συμμετρίας της φυσαλίδας (σχήμα 4.16).



Σχήμα 4.16 : Μέγιστο ύψος φυσαλίδας  $H_d$

Στο σχήμα 4.17 απεικονίζεται η χρονική εξέλιξη του ύψους της κεντρικής φυσαλίδας, μέχρι να φτάσει στο μέγιστο ύψος  $H_d$ .



Σχήμα 4.17 : Χρονική εξέλιξη του ύψους της κεντρικής φυσαλίδας

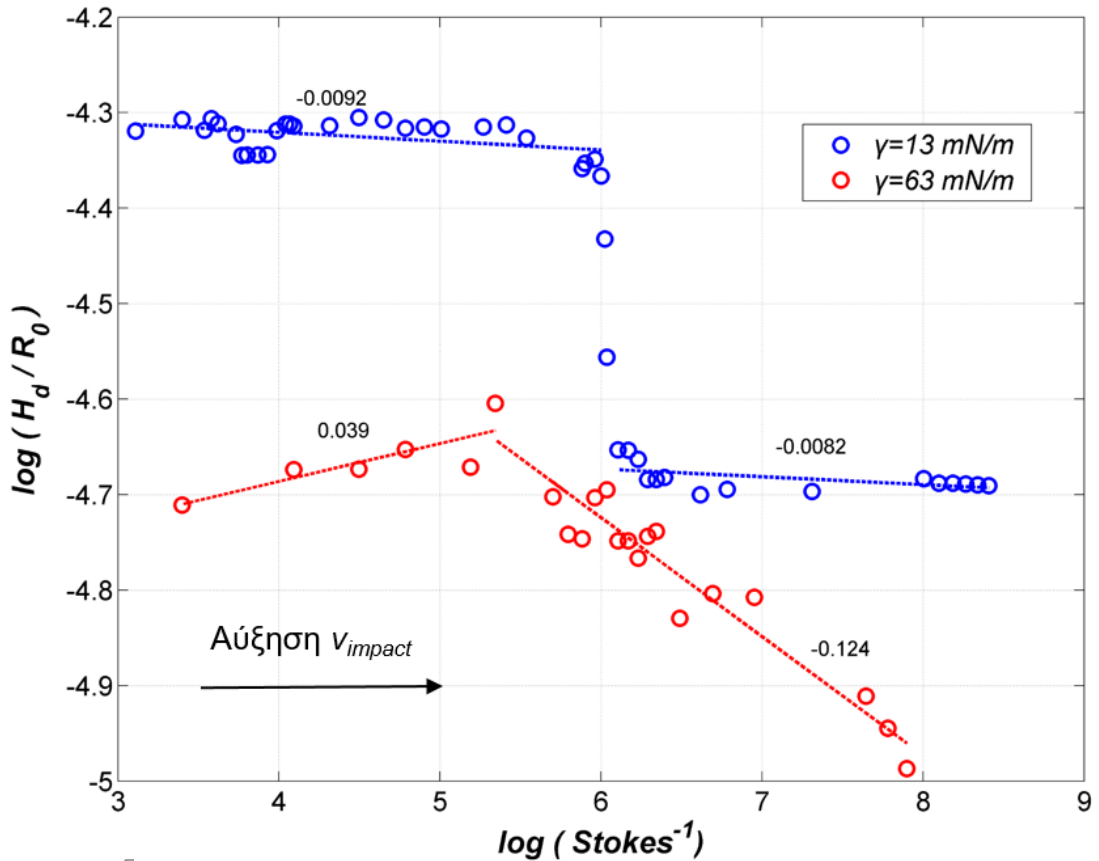
Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η εξάρτηση του μέγιστου ύψους της κεντρικής φυσαλίδας συναρτήσει της ταχύτητας πρόσκρουσης της σταγόνας,  $v_{impact}$ , στη στερεή επιφάνεια.

Για αυτό το λόγο, στο σύστημα που εξετάστηκε και παραπάνω (βλ. Κεφ.4, Παρ.2, σχήμα 4.4), για δυναμικό ιξώδες περιβάλλουσας φάσης  $\mu_{amb} = 0.5$  cP, πραγματοποιήθηκαν δύο σειρές υπολογιστικών προσομοιώσεων μεταβάλλοντας την ταχύτητα πρόσκρουσης της σταγόνας στη στερεή επιφάνεια. Η πρώτη σειρά προσομοιώσεων πραγματοποιήθηκε για επιφανειακή τάση  $\gamma = 13$  mN/m και η δεύτερη για  $\gamma = 63$  mN/m. Έπειτα, κατασκευάστηκε το σχήμα 4.18, που απεικονίζει την εξάρτηση του μέγιστου ύψους  $H_d$  από την ταχύτητα πρόσκρουσης  $v_{impact}$ . Στον  $y$ -άξονα του σχήματος απεικονίζεται ο λογάριθμος του μέγιστου ύψους της φυσαλίδας  $H_d$ , ως προς την αρχική ακτίνα της σταγόνας  $R_0$  και στον  $x$ -άξονα απεικονίζεται ο λογάριθμος του αντίστροφου αδιάστατου αριθμού Stokes. Στον

Ο αριθμός Stokes μετράει τον λόγο των ιξωδών δυνάμεων προς τις δυνάμεις αδράνειας που ασκούνται στη σταγόνα και δίνεται από τη εξίσωση (4-4):

$$Stokes = \frac{\mu_{amb}}{\rho_L \cdot v_{impact} \cdot R_0} \quad (4-4)$$

Σημειώνεται ότι η ταχύτητα πρόσκρουσης της σταγόνας αυξάνεται προς τα δεξιά του x-άξονα.



Σχήμα 4.18: Μέγιστο ύψος συναρτήσει της ταχύτητας πρόσκρουσης για  $\gamma = 13 \text{ mN/m}$  και  $\gamma = 63 \text{ mN/m}$

Για την μεγαλύτερη διεπιφανειακή τάση ( $\gamma = 63 \text{ mN/m}$ ), παρατηρείται ότι το μέγιστο ύψος της κεντρικής φυσαλίδας αυξάνεται με την αύξηση της ταχύτητας πρόσκρουσης, μέχρι να φθάσει σε μια μέγιστη τιμή. Από εκεί και έπειτα, το μέγιστο ύψος της κεντρικής φυσαλίδας μειώνεται με την αύξηση της ταχύτητας πρόσκρουσης. Το αποτέλεσμα αυτό παρουσιάζει μια ποιοτική συμφωνία με θεωρητικές σχέσεις της βιβλιογραφίας, που έχουν προκύψει από την μελέτη αναλόγων φαινομένων<sup>7,32</sup>

Αν μειωθεί η διεπιφανειακή τάση ( $\gamma = 13 \text{ mN/m}$ ), τα αποτελέσματα διαφοροποιούνται σημαντικά από την προηγούμενη περίπτωση. Πλέον, δεν παρατηρείται κάποιο ευδιάκριτο μέγιστο αλλά αντιθέτως παρατηρούνται δύο διακριτές «περιοχές» μεγίστων υψών που διαχωρίζονται απότομα από μια κρίσιμη περιοχή ταχυτήτων πρόσκρουσης. Παράλληλα, φαίνεται ότι για τις ίδιες ταχύτητες πρόσκρουσης, στην περίπτωση της χαμηλότερης διεπιφανειακής τάσης, οι σχηματιζόμενες φυσαλίδες έχουν μεγαλύτερο ύψος.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Από τους υπολογισμούς που έγιναν για διαβροχή σε ισορροπία προκύπτουν τα εξής συμπεράσματα:

- Στην περίπτωση της επαυξημένης Young-Laplace, οι διαβρεκτικές ιδιότητες της στερεής επιφάνειας μπορούν να καθορισθούν από την παράμετρο διαβροχής  $w^{LS}$ . Η συσχέτιση της παραμέτρου  $w^{LS}$  με την γωνία επαφής  $\theta_Y$  μπορεί να γίνει ασφαλώς χρησιμοποιώντας την θεωρητική σχέση (1-13).
- Τα σχήματα των σταγόνων όπως προκύπτουν από την επίλυση της επαυξημένης Young-Laplace, προσεγγίζουν με πολύ καλή ακρίβεια τα σχήματα των σταγόνων που προκύπτουν από την επίλυση της συμβατικής Young-Laplace. Συνεπώς η χρήση της επαυξημένης Young-Laplace για την μοντελοποίηση της ισορροπίας σταγόνων σε στερεές επιφάνειες κρίνεται ορθή.

Από τους υπολογισμούς που έγιναν για διαβροχή εκτός ισορροπίας προκύπτουν τα εξής συμπεράσματα:

- Τα αποτελέσματα των υπολογισμών για περιβάλλουσα φάση αέρα προσεγγίζουν ικανοποιητικά τα πειραματικά αποτελέσματα για την θέση της γραμμής επαφής και την δυναμική γωνία επαφής της σταγόνας. Συνεπώς, η μοντελοποίηση όπως διατυπώθηκε στο Κεφάλαιο 2, Παράγραφο 2 κρίνεται ορθή.
- Εντοπίστηκαν τέσσερις χαρακτηριστικές περιοχές σχετικού δυναμικού ιξώδους – ταχύτητας πρόσκρουσης, που εμφανίζουν διαφορετική συμπεριφορά όσον αφορά στην παγίδευση περιβάλλουσας φάσης. Στην περίπτωση υψηλής επιφανειακής τάσης ( $\gamma = 63 \text{ mN/m}$ ), στην περιοχή με χαμηλά σχετικά δυναμικά ιξώδη και μεγάλο εύρος ταχυτήτων πρόσκρουσης δεν παρουσιάζεται κανένα από τα δύο είδη φαινόμενων παγίδευσης (βλ. Σχήμα 3.12, μαύρη σκιασμένη περιοχή). Τα φαινόμενα παγίδευσης κεντρικής φυσαλίδας (περίπτωση παγίδευσης I) φαίνεται να συμβαίνουν στην περιοχή με υψηλό σχετικό δυναμικό ιξώδες, σε όλο το εύρος ταχυτήτων πρόσκρουσης (βλ. Σχήμα 3.12, μπλε σκιασμένη περιοχή). Από την άλλη πλευρά, τα φαινόμενα παγίδευσης περιβάλλουσας φάσης κατά το άπλωμα της σταγόνας (περίπτωση παγίδευσης II), εκδηλώνονται για υψηλότερες ταχύτητες πρόσκρουσης, σε όλο το εύρος του σχετικού δυναμικού ιξώδους που εξετάστηκε (βλ. Σχήμα 3.12, πράσινη



σκιασμένη περιοχή). Τέλος, υπάρχει μια περιοχή (βλ. Σχήμα 3.12, κόκκινη σκιασμένη περιοχή) υψηλών ταχυτήτων πρόσκρουσης και υψηλού σχετικού δυναμικού ιξώδους, στην οποία τα δύο είδη παγίδευσης συμβαίνουν ταυτόχρονα.

Στην περίπτωση που μειωθεί η επιφανειακή τάση ( $\gamma = 13 \text{ mN/m}$ ), ο χάρτης της παγίδευσης περιβάλλουσας φάσης αλλάζει δραστικά. Η μείωση της επιφανειακής τάσης φαίνεται να ευνοεί την παγίδευση της περιβάλλουσας φάσης, αφού για συνδυασμούς σχετικών δυναμικών ιξωδών – ταχυτήτων πρόσκρουσης που η περιβάλλουσα φάση δεν παγιδευόταν στην περίπτωση της υψηλής επιφανειακής τάσης, πλέον παγιδεύεται. Αυτό πιθανώς να συμβαίνει γιατί η σταγόνα παραμορφώνεται ευκολότερα λόγω χαμηλότερης επιφανειακής τάσης και επιτρέπει στην περιβάλλουσα φάση να εγκλωβιστεί. Έτσι, στην περίπτωση κάποιας εφαρμογής που η παγίδευση της περιβάλλουσας φάσης είναι ανεπιθύμητη (π.χ επιστρώσεις επιφανειών), πρέπει να χρησιμοποιηθεί υγρό με υψηλή επιφανειακή τάση (π.χ νερό με  $\gamma = 72 \text{ mN/m}$ ), περιβάλλουσα φάση με χαμηλό δυναμικό ιξώδες και η πρόσκρουση της σταγόνας να γίνει σε χαμηλή ταχύτητα.

- Στην περίπτωση της υψηλής επιφανειακής τάσης, το μέγιστο ύψος της κεντρικής φυσαλίδας παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης αυξάνεται με την αύξηση της ταχύτητας πρόσκρουσης της σταγόνας έως ότου λάβει μια μέγιστη τιμή. Ύστερα από αυτό το σημείο, μειώνεται με την αύξηση της ταχύτητας πρόσκρουσης. Τα αποτελέσματα των υπολογισμών παρουσιάζουν ποιοτική συμφωνία με πειραματικά αποτελέσματα όπου έχει παρατηρηθεί το ίδιο φαινόμενο.
- Το μέγεθος που επηρεάζεται περισσότερο από την φύση της περιβάλλουσας φάσης είναι η δυναμική γωνία επαφής κατά το άπλωμα της σταγόνας. Για ίδια ταχύτητα πρόσκρουσης, η δυναμική γωνία παραμένει σταθερή για μεγαλύτερο χρονικό διάστημα στην περίπτωση υψηλότερου δυναμικού ιξώδους περιβάλλουσας φάσης, γιατί η σταγόνα καθυστερεί να έρθει σε επαφή με το στερεό. Αυτό συμβαίνει λόγω της ανάπτυξης ενός λεπτού φιλμ ανάμεσα στη σταγόνα και στο στερεό, πάνω στο οποίο «πατάει» η σταγόνα και παραμένει πιο κοντά στο αρχικό σφαιρικό της σχήμα.
- Το είδος της γεωμετρίας της στερεής επιφάνειας επηρεάζει σημαντικά την παγίδευση κεντρικής φυσαλίδας. Συγκεκριμένα, στην περίπτωση ημιτονοειδούς γεωμετρίας, όσο λιγότερο απέχουν μεταξύ τους οι στερεές προεξοχές τόσο μεγαλύτερη ποσότητα

περιβάλλουσας φάση παγιδεύεται. Συνεπώς, στην περίπτωση κάποιας εφαρμογής που η περιβάλλουσα φάση είναι ανεπιθύμητη, πρέπει να χρησιμοποιηθεί γεωμετρία στερεής επιφάνειας με μεγάλη απόσταση μεταξύ των στερεών προεξοχών.

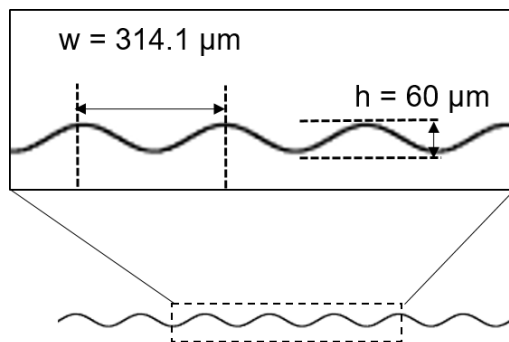
Μέρος των αποτελεσμάτων αυτής της εργασίας παρουσιάσθηκε στο 11<sup>ο</sup> Διεθνές Συνέδριο Μηχανικής της Ελληνικής Εταιρίας Θεωρητικής και Εφαρμοσμένης Μηχανικής (Ε.Ε.Θ.Ε.Μ). (βλ. Παράρτημα Β)

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: ΤΡΕΧΟΥΣΑ ΕΡΕΥΝΑ – ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ

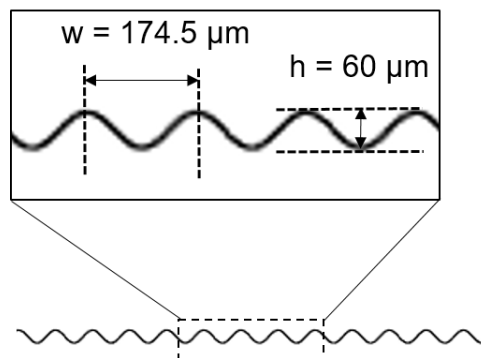
Μέχρι τώρα εξετάστηκαν φαινόμενα πρόσκρουσης σταγόνων σε επίπεδες επιφάνειες, που δε παρουσίαζαν μικροδομή και συνεπώς τραχύτητα. Ενδιαφέρον όμως παρουσιάζουν και οι προσκρούσεις σταγόνων σε επιφάνειες με μικροδομή. Έτσι, σε αυτό το κεφάλαιο εξετάζεται η επίδραση των χαρακτηριστικών της γεωμετρίας της στερεής επιφάνειας, στο φαινόμενο της παγίδευσης της περιβάλλουσας φάσης.

### 6.1. Παγίδευση περιβάλλουσας φάσης σε τραχιές επιφάνειες

Το σύστημα που εξετάζεται είναι το ίδιο με παραπάνω (βλ. Κεφ.4, Παρ.2, σχήμα 4.4), δηλαδή μια σταγόνα ακτίνας  $R_0 = 1.225 \text{ mm}$ , μίγματος γλυκερόλης (85%) / νερού (15%), πυκνότητας  $\rho_{droplet} = 1220 \text{ kg/m}^3$ , δυναμικού ιξώδους  $\mu_{droplet} = 116 \text{ cP}$ , επιφανειακής τάσης  $\gamma = 63 \text{ mN/m}$ , που προσκρούει με ταχύτητα  $v_{impact} = 0.5 \text{ m/s}$  στη στερεή επιφάνεια με γωνία επαφής  $\theta_Y = 93.5^\circ$ , σε περιβάλλουσα φάση λαδιού σιλικόνης με πυκνότητα  $\rho_{amb} = 950 \text{ kg/m}^3$  και δυναμικό ιξώδες  $\mu_{amb} = 0.5 \text{ cP}$ . Οι διαστάσεις της αραιότερης γεωμετρίας φαίνονται στο σχήμα 6.1 και της πυκνότερης στο σχήμα 6.2.



Σχήμα 6.1: Ημιτονοειδής γεωμετρία με αραιότερη μικροδομή

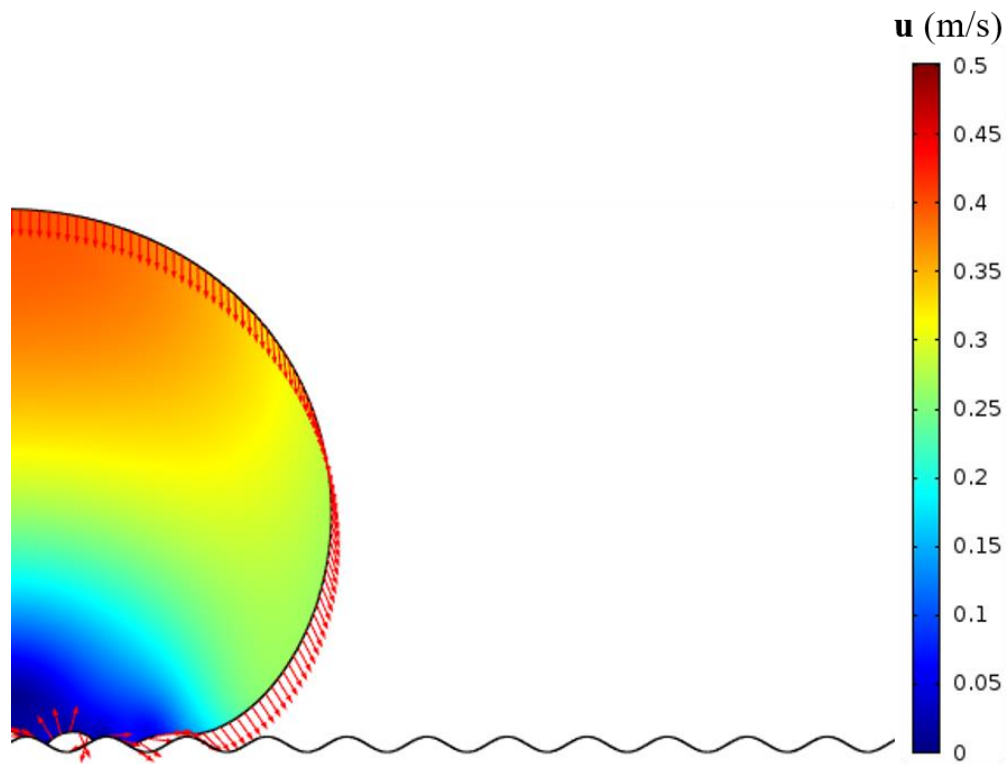


Σχήμα 6.2: Ημιτονοειδής γεωμετρία με πυκνότερη μικροδομή

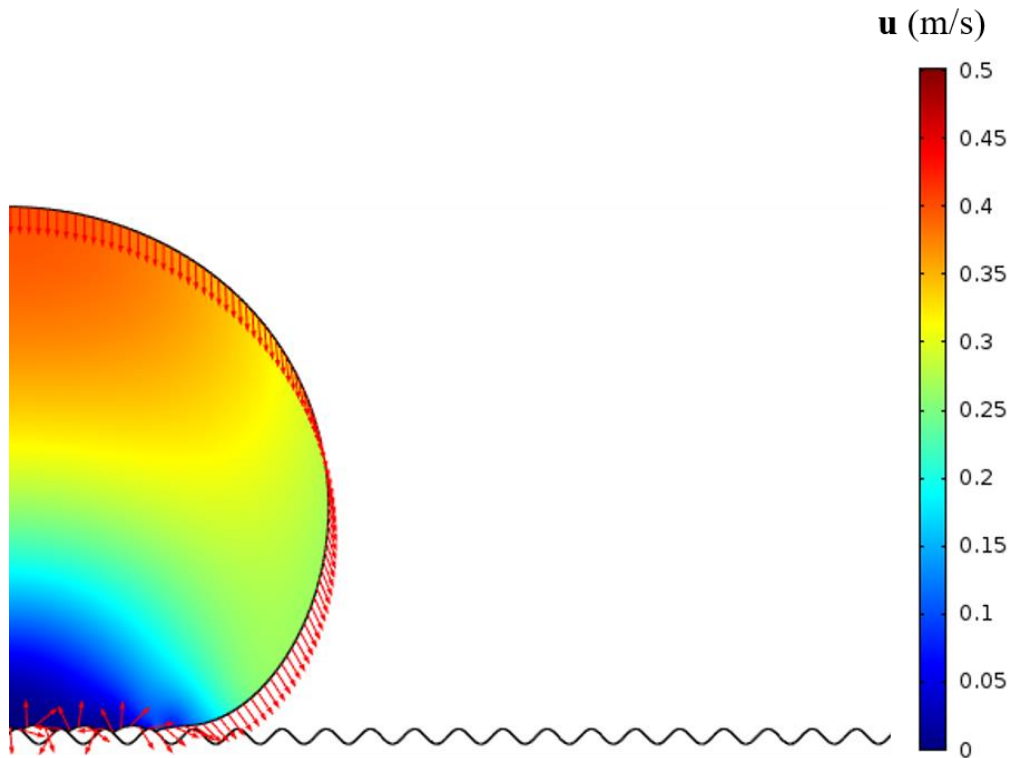
Το χαρακτηριστικό μέγεθος που διαχωρίζει τις δύο γεωμετρίες είναι η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών κορυφών του ημιτόνου. Όπως είναι φυσικό, στην περίπτωση της αραιότερης γεωμετρίας η απόσταση αυτή είναι πολύ μεγαλύτερη από την αντίστοιχη της πυκνότερης γεωμετρίας.

### 6.1.1. Δυναμική συμπεριφορά σταγόνων για αρχικούς και τελικούς χρόνους

Μετά την πρόσκρουση, και στις δύο περιπτώσεις οι σταγόνες αρχίζουν να απλώνουν πάνω στη στερεή επιφάνεια παγιδεύοντας μια ποσότητα περιβάλλουσας φάσης ανάμεσα στις προεξοχές του στερεού. Στα σχήματα 6.3 και 6.4 απεικονίζεται το προφίλ ταχύτητας της σταγόνας για αρχικούς χρόνους ( $t = 1$  ms), για τις δύο περιπτώσεις γεωμετρίας. Σημειώνεται ότι τα σχήματα απεικονίζουν το προφίλ της ταχύτητας για την ίδια χρονική στιγμή. Παρατηρείται ότι στην αραιή γεωμετρία, η σταγόνα βρίσκεται σε επαφή με τρεις προεξοχές του στερεού ενώ στην πυκνή γεωμετρία με τέσσερις. Παρόλαυτα, τόσο το προφίλ ταχύτητας όσο και η θέση της γραμμής επαφής των σταγόνων δεν φαίνεται να έχουν σημαντική διαφορά.

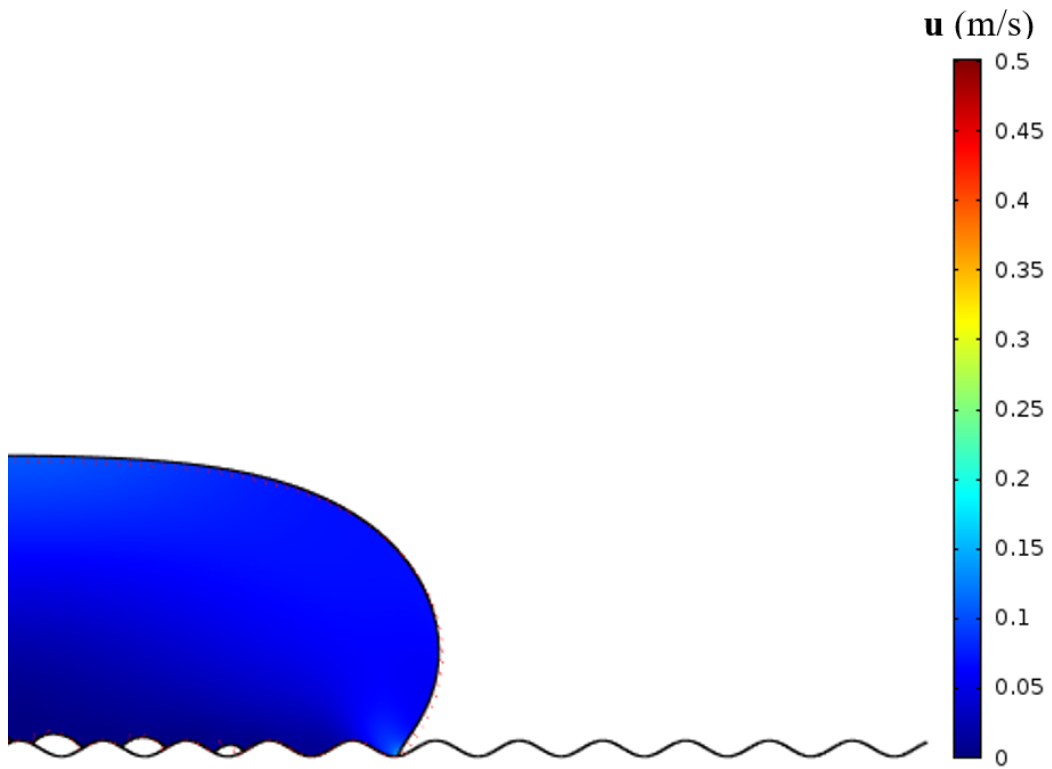


Σχήμα 6.3: Προφίλ ταχύτητας της σταγόνας για αρχικούς χρόνους ( $t = 1$  ms), σε αραιή γεωμετρία. Παρατηρείται παγίδευση περιβάλλουσας φάσης μεταξύ των προεξοχών του στερεού.

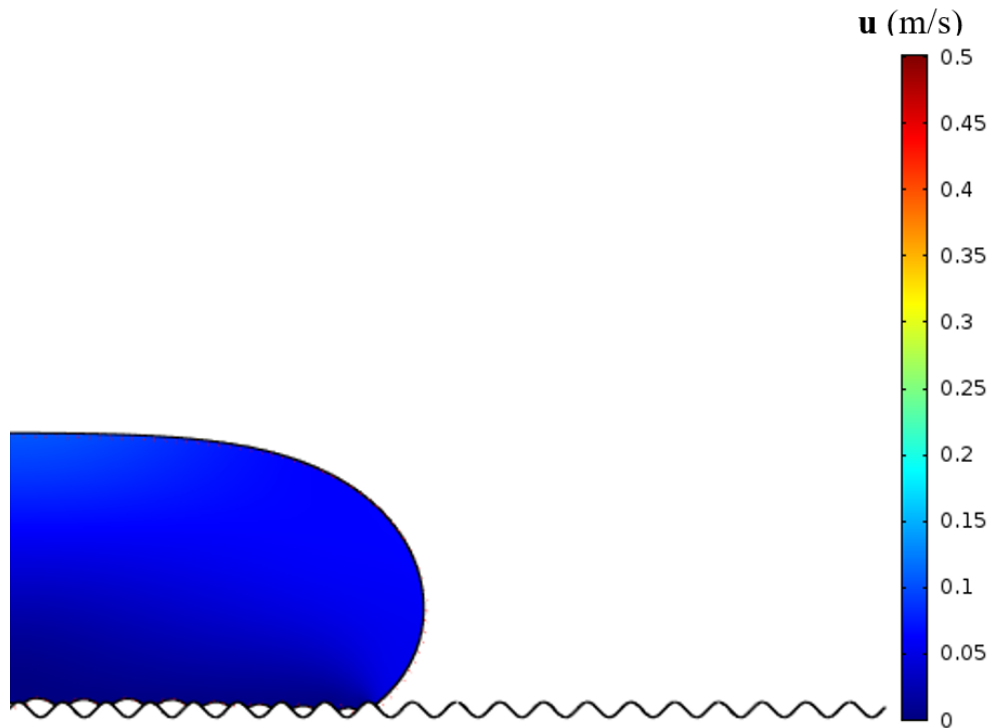


**Σχήμα 6.4:** Προφίλ ταχύτητας της σταγόνας για αρχικούς χρόνους ( $t = 1$  ms), σε πυκνή γεωμετρία. Παρατηρείται παγίδευση περιβάλλουσας φάσης μεταξύ των προεξοχών του στερεού.

Για μεγαλύτερους χρόνους ( $t = 4.5$  ms), παρατηρείται διαφοροποίηση στη δυναμική συμπεριφορά της σταγόνας. Στην περίπτωση της αραιότερης γεωμετρίας, ένα κομμάτι της σταγόνας καταρρέει εντός της στερεής δομής και σαν αποτέλεσμα δεν παγιδεύει πλέον περιβάλλουσα φάση (σχήμα 6.5). Αντιθέτως, στην περίπτωση της πυκνότερης γεωμετρίας, η σταγόνα ισορροπεί πάνω στις προεξοχές της στερεής επιφάνειας χωρίς να καταρρέει εντός της στερεής δομής, με αποτέλεσμα να παγιδεύει περιβάλλουσα φάση. (σχήμα 6.6).



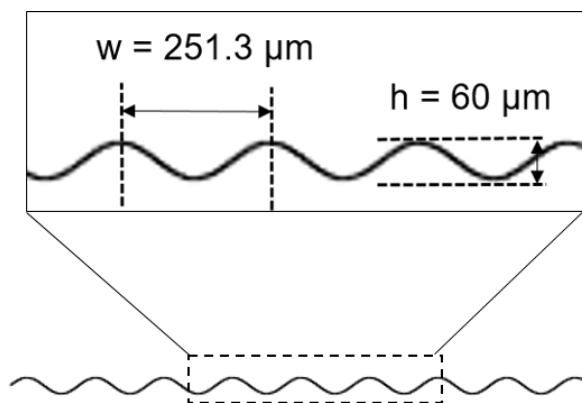
**Σχήμα 6.5:** Προφίλ ταχύτητας της σταγόνας για αργότερους χρόνους ( $t = 4.5$  ms), σε αραιή γεωμετρία. Παρατηρείται μερική κατάρρευση της σταγόνας ανάμεσα στις προεξοχές της στερεής επιφάνειας.



**Σχήμα 6.6:** Προφίλ ταχύτητας της σταγόνας για αργότερους χρόνους ( $t = 4.5$  ms), σε πυκνή γεωμετρία. Παρατηρείται ισορροπία της σταγόνας πάνω στις προεξοχές της στερεής επιφάνειας

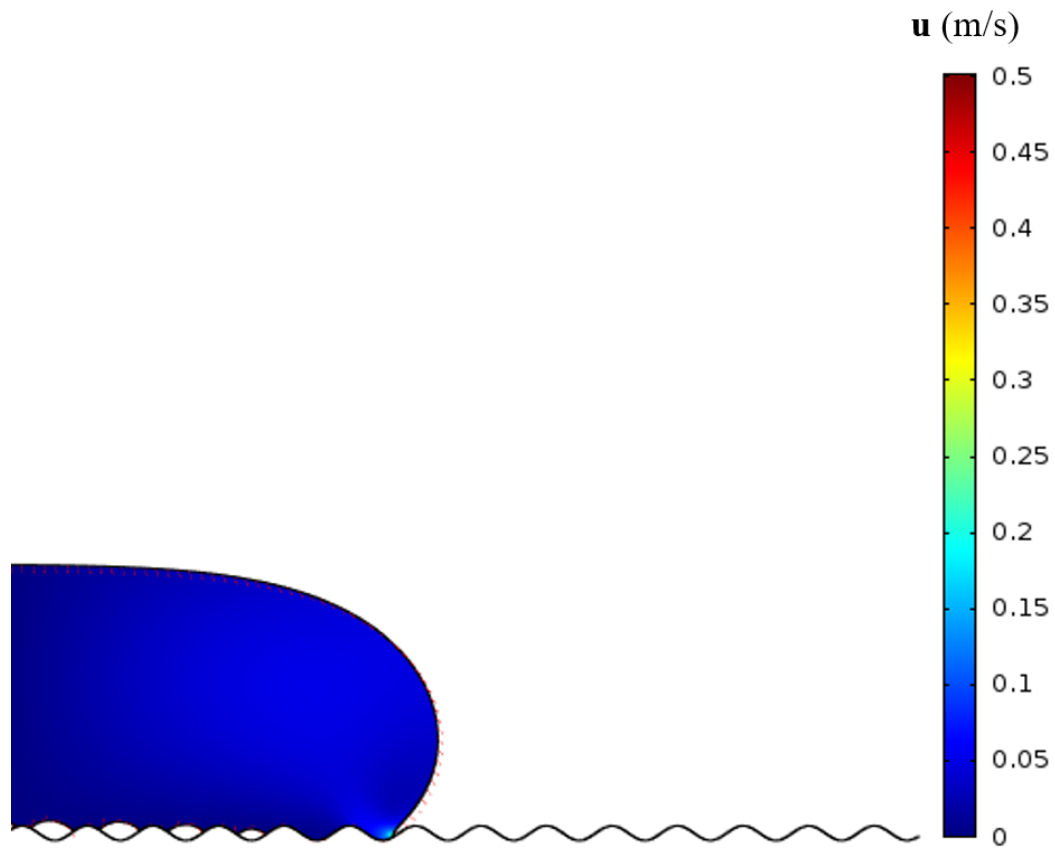
### 6.2.2. Ποσότητα παγιδευμένης φάσης συναρτήσει της απόστασης των στερεών προεξοχών

Σε αυτήν την παράγραφο εξετάζεται η εξάρτηση της ποσότητας της παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης από το σχήμα των μικροδομών του στερεού και συγκεκριμένα από την απόσταση δύο διαδοχικών προεξοχών του στερεού. Πιο συγκεκριμένα, υπολογίστηκε η επιφάνεια της παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης για τις παραπάνω γεωμετρίες (σχήμα 6.1 και σχήμα 6.2) και για μια γεωμετρία με ενδιάμεση απόσταση στερεών μικροδομών (σχήμα 6.7). Η επιφάνεια της παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης υπολογίζεται για την ίδια χρονική στιγμή, για τις τρεις περιπτώσεις γεωμετρίας.



Σχήμα 6.7: Γεωμετρία με ενδιάμεση απόσταση στερεών προεξοχών

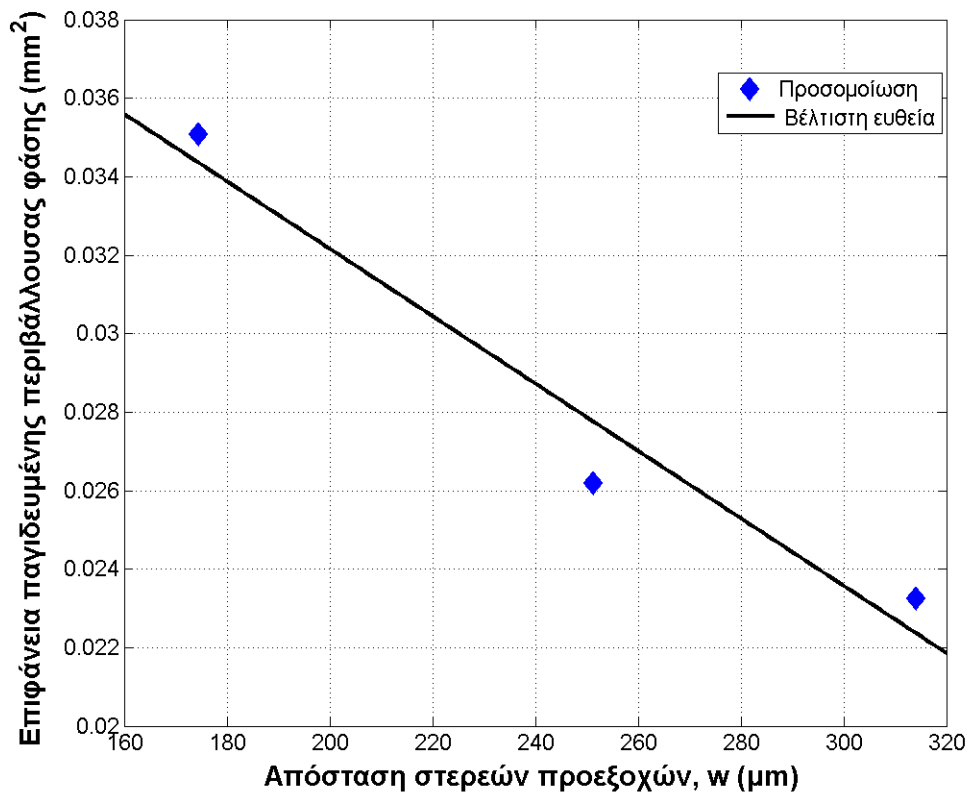
Στο σχήμα 6.8 απεικονίζεται το προφίλ ταχύτητας της σταγόνας για αργότερους χρόνους ( $t = 4.5 \text{ ms}$ ), στην ενδιάμεση γεωμετρία. Όπως και στην περίπτωση της πυκνότερης γεωμετρίας (βλ. Σχήμα 6.5) και εδώ η σταγόνα έχει καταρρεύσει ανάμεσα στις προεξοχές της στερεής επιφάνειας. Η διαφορά των δύο περιπτώσεων είναι ότι στην ενδιάμεση γεωμετρία η σταγόνα έχει παγιδεύσει τέσσερις φυσαλίδες περιβάλλοντος ρευστού ενώ στην πυκνότερη γεωμετρία έχει παγιδεύσει τρεις.



**Σχήμα 6.8:** Προφίλ ταχύτητας της σταγόνας για αργότερους χρόνους ( $t = 4.5$  ms), σε ενδιάμεση γεωμετρία. Παρατηρείται μερική κατάρρευση της σταγόνας ανάμεσα στις προεξοχές της στερεής επιφάνειας.



Στο σχήμα 6.9 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της μελέτης για την επίδραση της απόστασης των στερεών προεξοχών στην ποσότητα παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης.



Σχήμα 6.9: Επιφάνεια παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης συναρτήσει της απόστασης των στερεών προεξοχών

Παρατηρείται ότι όσο η απόσταση των στερεών προεξοχών μειώνεται, δηλαδή η γεωμετρία γίνεται αραιότερη, η ποσότητα της παγιδευμένης περιβάλλουσας φάσης μειώνεται. Αυτό συμβαίνει λόγω της κατάρρευσης της σταγόνας εντός των στερεών προεξοχών, κάτι που εξηγήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Έτσι, για τις δύο περιπτώσεις αραιής γεωμετρίας ( $w = 174.5 \mu\text{m}$  και  $w = 251.3 \mu\text{m}$ ), όπου παρατηρείται κατάρρευση της σταγόνας εντός της μικροδομής, η ποσότητα που παγιδεύεται είναι σαφώς μειωμένη σε σχέση με την πυκνότερη γεωμετρία ( $w = 314.1 \mu\text{m}$ ) όπου η σταγόνα παγιδεύει περισσότερη ποσότητα λόγω της ισορροπίας της πάνω στις στερεές προεξοχές.

## ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α: ΕΠΙΛΥΣΗ ΤΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ ΕΙΚΟΝΑΛ

Ο όρος αλληλεπίδρασης υγρού/στερεού (πίεσης αποσύνδεσης,  $p^{L\delta}$ ) είναι συνάρτηση της Ευκλείδειας απόστασης,  $\delta$ , από το σύνορο της στερεής επιφάνειας. Στην περίπτωση που η στερεή επιφάνεια έχει τραχύτητα, το  $\delta$  υπολογίζεται από την επίλυση της εξίσωσης Eikonal. Η εξίσωση αυτή γράφεται:

$$|\nabla\delta(x, y)| = 1, \quad x, y \in \Phi, \quad (\text{A-1})$$

$$\delta(x, y) = 0, \quad x, y \in \partial S, \quad (\text{A-2})$$

Όπου το  $\Phi$  αντιστοιχεί στο δισδιάστατο υπολογιστικό χωρίο όπου γίνεται η επίλυση της εξίσωσης και το  $\partial S$  στο σύνορο της στερεής επιφάνειας.

Η εξίσωση Eikonal αποτελεί ένα μη-γραμμικό πρόβλημα, το οποίο διακριτοποιείται και επιλύεται με τη βοήθεια του υπολογιστικού λογισμικού COMSOL Multiphysics®. Το COMSOL Multiphysics® μετασχηματίζει ελαφρώς την εξίσωση (A-1), για λόγους ευκολίας της σύγκλισης κατά την επίλυση της εξίσωσης Eikonal. Πιο συγκεκριμένα, η εξίσωση που επιλύεται στο COMSOL Multiphysics® είναι:

$$\nabla D \cdot \nabla D + \beta D (\nabla \cdot \nabla D) = (1 + 2\beta) D^4,$$

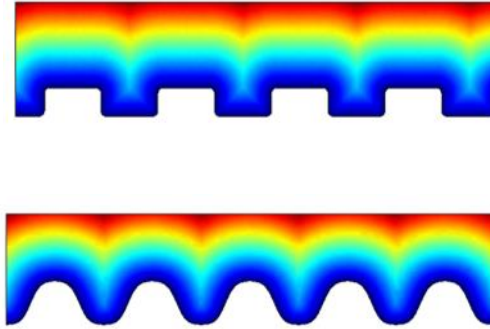
όπου  $D = 1/\delta$  και  $\beta$  ένας όρος διάχυσης που ενισχύει την ελλειπτική συμπεριφορά της εξίσωσης. Η επίλυση της παραπάνω εξίσωσης γίνεται πιο ακριβής όσο ο όρος διάχυσης  $\beta$  προσεγγίζει το μηδέν.

Εφόσον η αντίστροφη απόσταση  $D$  τείνει στο άπειρο στην επιφάνεια του στερεού, χρησιμοποιείται η συνοριακή συνθήκη (B-3):

$$D = \frac{C}{l_{ref}}, \quad (\text{A-3})$$

όπου η παράμετρος  $C = 2$  και η παράμετρος  $l_{ref}$  εξαρτάται από το είδος της γεωμετρίας του υπολογιστικού χωρίου (ισούται με το μισό της ελάχιστης πλευράς του χωρίου).

Στο σχήμα A.1 παρουσιάζονται οι ισοϋψείς καμπύλες της απόστασης  $\delta$  για την περίπτωση στερεών επιφανειών με τραχύτητα.



**Σχήμα Α.1:** Ισοψείς γραμμές σταθερής απόστασης,  $\delta$ , από τραχιές στερεές επιφάνειες, όπως προκύπτουν από την επίλυση της εξίσωσης Eikonal.  $\beta = 5 \cdot 10^{-3}$ .

Η απόσταση  $\delta$ , ενός σημείου στην επιφάνεια της σταγόνας από τη στερεή επιφάνεια, υπολογίζεται με μεθόδους παρεμβολής στη λύση της Eikonal. Συνεπώς, απαιτείται μονάχα μία επίλυση της Eikonal για κάθε στερεή επιφάνεια. Αυτό συνεπάγεται μηδαμινό επιπλέον υπολογιστικό κόστος στο πρόβλημα.

# ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β: 11<sup>th</sup> HSTAM INTERNATIONAL CONGRESS ON MECHANICS

Η παρακάτω εργασία παρουσιάστηκε στο 11<sup>ο</sup> Διεθνές Συνέδριο Μηχανικής της Ελληνικής Εταιρίας Θεωρητικής και Εφαρμοσμένης Μηχανικής (Ε.Ε.Θ.Ε.Μ).

## DROPLET MOBILITY ON ROUGH SUBSTRATES: EFFECT OF THE AMBIENT PHASE

Vasileios C. Charitatos<sup>1</sup>, Nikolaos T. Chamakos<sup>2</sup>, Athanasios G. Papathanasiou<sup>3</sup>

School of Chemical Engineering  
National Technical University of Athens  
Athens, 15780, Greece

Email: <sup>1</sup>[vcharitatos@gmail.com](mailto:vcharitatos@gmail.com), <sup>2</sup>[nhamakos@mail.ntua.gr](mailto:nhamakos@mail.ntua.gr), <sup>3</sup>[pathan@chemeng.ntua.gr](mailto:pathan@chemeng.ntua.gr)

**Keywords:** Droplet spreading, wetting, structured surfaces

We study the dynamics of a droplet spreading or sliding on a geometrically patterned solid surface. In particular, we investigate the effect of: a) the ambient phase properties (viscosity, density) and, b) the droplet initial velocity on the dynamics of spreading. Recent experimental findings [1] have shown that the entrapment of the ambient phase in-between the liquid and the solid surface, considerably alters the bouncing dynamics and therefore this effect should be accounted for when designing self-cleaning or anti-icing surfaces by designing their roughness features.

As opposed to the common model approaches (e.g. the conventional hydrodynamic model [2]), we treat the liquid/solid and the liquid/ambient interfaces in a unified framework. By using a recently proposed scheme [3],[4] for treating the stress balance along the droplet surface we overcome the necessity of imposing any ‘wettability related’ boundary condition at the contact line. In our approach, the contact line position dynamics as well as the dynamic contact angle derive “naturally” as a result of the interplay between a disjoining pressure term (accounting for the solid/liquid interactions) with the viscous and capillary forces in the vicinity of the solid surface. Such formulation is of great importance especially in the cases of rough superhydrophobic substrates where the number and position of the contact lines are not known *a priori*.

In our study we found critical values of initial velocity and dynamic viscosity that favor the entrapment of the ambient phase between the liquid and solid surface. Our next step is the design, through systematic computation, of surfaces that promote or inhibit the air entrapment.

## REFERENCES

[1] de Ruiter, J., Lagraauw, R., van den Ende, D., & Mugele, F. (2014), “Wettability-independent bouncing on flat surfaces mediated by thin air films”, *Nature Physics*, **11**, pp.48–53.

- [2] Ren, W., Hu, D., Weinan, E., (2010), “Continuum models for the contact line problem,” *Physics of Fluids* **22**, 102103.
- [3] Chamakos, N., Kavousanakis, M., Boudouvis, A., Papathanasiou, A. (2016), “Droplet spreading on rough surfaces: tackling the contact line boundary condition.”, *Physics of Fluids*, **28**, 022105.
- [4] Karapetsas, G., Chamakos, N., Papathanasiou, A. (2016), “Efficient modelling of droplet dynamics on complex surfaces”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **28**(8), 085101.

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. de Gennes, P.-G., Brochard-Wyart, F. & Quere, D. *Capillarity and Wetting Phenomena*. (Springer, 2004).
2. Farris, S. *et al.* Wetting of biopolymer coatings: contact angle kinetics and image analysis investigation. *Langmuir* **27**, 7563–7574 (2011).
3. Blossey, R. Self-cleaning surfaces—virtual realities. *Nat. Mater.* **2**, 301–306 (2003).
4. Verplanck, N., Coffinier, Y., Thomy, V. & Boukherroub, R. Wettability switching techniques on superhydrophobic surfaces. *Nanoscale Res. Lett.* **2**, 577–596 (2007).
5. Krupenkin, T. & Taylor, J. A. Reverse electrowetting as a new approach to high-power energy harvesting. *Nat. Commun.* **2**, 448 (2011).
6. Butt, H.-J., Graf, K. & Kappl, M. *Physics and chemistry of interfaces*. (John Wiley & Sons, 2006).
7. Bouwhuis, W. *et al.* Maximal air bubble entrainment at liquid-drop impact. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 2–5 (2012).
8. Chamakos, N. T., Kavousanakis, M. E. & Papathanasiou, A. G. Enabling efficient energy barrier computations of wetting transitions on geometrically patterned surfaces. *Soft Matter* **9**, 9624 (2013).
9. Lagaly, G. BV Derjaguin, NV Churaev, VM Müller: Surface Forces, Consultants Bureau, New York, London 1987. 440 Seiten. *Berichte der Bunsengesellschaft für Phys. Chemie* **92**, 1058 (1988).
10. Starov, V. M. Surface forces action in a vicinity of three phase contact line and other current problems in kinetics of wetting and spreading. *Adv. Colloid Interface Sci.* **161**, 139–152 (2010).
11. Chamakos, N. T., Kavousanakis, M. E. & Papathanasiou, A. G. Neither Lippmann nor Young: Enabling Electrowetting Modeling on Structured Dielectric Surfaces. *Langmuir* **30**, 4662–4670 (2014).

12. Kavousanakis, M. E., Chamakos, N. T. & Papathanasiou, A. G. Connection of Intrinsic Wettability and Surface Topography with the Apparent Wetting Behavior and Adhesion Properties. *J. Phys. Chem. C* **119**, 15056–15066 (2015).
13. Huh, C. & Scriven, L. E. Hydrodynamic model of steady movement of a solid/liquid/fluid contact line. *J. Colloid Interface Sci.* **35**, 85–101 (1971).
14. Cox, R. G. The dynamics of the spreading of liquids on a solid surface. Part 1. Viscous flow. *J. Fluid Mech.* **168**, 169–194 (1986).
15. Voinov, O. V. Hydrodynamics of wetting. *Fluid Dyn.* **11**, 714–721 (1976).
16. De Gennes, P.-G. Wetting: statics and dynamics. *Rev. Mod. Phys.* **57**, 827 (1985).
17. Inamuro, T., Ogata, T., Tajima, S. & Konishi, N. A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences. *J. Comput. Phys.* **198**, 628–644 (2004).
18. Wang, F.-C. & Zhao, Y.-P. Contact angle hysteresis at the nanoscale: a molecular dynamics simulation study. *Colloid Polym. Sci.* **291**, 307–315 (2013).
19. Briant, A. J., Wagner, A. J. & Yeomans, J. M. Lattice Boltzmann simulations of contact line motion. I. Liquid-gas systems. *Phys. Rev. E* **69**, 31602 (2004).
20. Chandra, S. & Avedisian, C. T. On the collision of a droplet with a solid surface. in *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **432**, 13–41 (The Royal Society, 1991).
21. Pasandideh-Fard, M., Qiao, Y. M., Chandra, S. & Mostaghimi, J. Capillary effects during droplet impact on a solid surface. *Phys. Fluids* **8**, 650–659 (1996).
22. Thoroddsen, S. T. & Sakakibara, J. Evolution of the fingering pattern of an impacting drop. *Phys. Fluids* **10**, 1359–1374 (1998).
23. Fujimoto, H., Shiraishi, H. & Hatta, N. Evolution of liquid/solid contact area of a drop impinging on a solid surface. *Int. J. Heat Mass Transf.* **43**, 1673–1677 (2000).
24. Mehdi-Nejad, V., Mostaghimi, J. & Chandra, S. Air bubble entrapment under an impacting droplet. *Phys. Fluids* **15**, 173–183 (2003).
25. Huang, J. J., Shu, C. & Chew, Y. T. Lattice Boltzmann study of bubble entrapment during droplet impact. *Int. J. Numer. Methods Fluids* **65**, 655–682 (2011).

26. Χαμάκος, Ν. Υπολογιστική ανάλυση διαβροχής στερεών επιφανειών από σταγόνες. 124 (2011).
27. Kavousanakis, M. E., Colosqui, C. E., Kevrekidis, I. G. & Papathanasiou, A. G. Mechanisms of wetting transitions on patterned surfaces: continuum and mesoscopic analysis. *Soft Matter* **8**, 7928–7936 (2012).
28. Chamakos, N. T., Kavousanakis, M. E., Boudouvis, A. G. & Papathanasiou, A. G. Droplet spreading on rough surfaces: Tackling the contact line boundary condition. *Phys. Fluids* **28**, 22105 (2016).
29. Karapetsas, G., Chamakos, N. T. & Papathanasiou, A. G. Efficient modelling of droplet dynamics on complex surfaces. *J. Phys. Condens. Matter* **28**, 085101 (2016).
30. Šikalo, Š., Tropea, C. & Ganić, E. N. Dynamic wetting angle of a spreading droplet. *Exp. Therm. Fluid Sci.* **29**, 795–802 (2005).
31. Hicks, P. D. & Purvis, R. Air cushioning and bubble entrapment in three-dimensional droplet impacts. *J. Fluid Mech.* **649**, 135–163 (2010).
32. de Ruiter, J., van den Ende, D. & Mugele, F. Air cushioning in droplet impact. II. Experimental characterization of the air film evolution. *Phys. Fluids* **27**, (2015).