



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΙΙ: ΑΝΑΛΥΣΗΣ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΚΑΙ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ
ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΤΟΥ **ΝΙΚΟΛΑΟΥ Θ. ΘΕΟΔΩΡΟΥ**

Αναπήδηση και Αποκόλληση Επικαθήμενων Σταγόνων από Στερεές Επιφάνειες

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: **Α. ΠΑΠΑΘΑΝΑΣΙΟΥ**

ΑΘΗΝΑ

ΣΕΠΤΕΜΒΡΙΟΣ 2021

Στους γονείς μου,

Δώρο και Φανή

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της διπλωματικής μου εργασίας, Αναπληρωτή Καθηγητή Αθανάσιο Παπαθανασίου, που μου ανέθεσε ένα ενδιαφέρον θέμα και, με τη συνεχή καθοδήγησή του, μου προσέφερε την ευκαιρία να ασχοληθώ λεπτομερώς με αυτό και να συμμετάσχω στην αξιολογη ερευνητική προσπάθεια που γίνεται στην ομάδα του.

Ευχαριστώ θερμά τον Υποψήφιο Διδάκτορα Αλέξανδρο Σουραή για την πολύτιμη υποστήριξή του καθ' όλη τη διάρκεια της ενασχόλησής μου με το αντικείμενο αυτής της εργασίας. Χάρη στις γνώσεις και τη μεταδοτικότητά του, με μύησε στο αντικείμενο της προσομοίωσης σταγόνων και με εξοικείωσε με το λογισμικό που χρησιμοποιήθηκε για την εκτέλεση και ανάλυση των προσομοιώσεων. Επίσης, με ειλικρινές ενδιαφέρον και πρωτοβουλία, παρακολούθησε ενδελεχώς την εξέλιξη αυτής της εργασίας, βελτιώνοντάς την και κατευθύνοντάς με κατάλληλα. Η συνεισφορά του αποτέλεσε καθοριστικό παράγοντα για την πραγματοποίηση και ολοκλήρωση της παρούσας εργασίας.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους γονείς μου για την πολύτιμη στήριξη που μου προσφέρουν διαρκώς.

Περιεχόμενα

Περίληψη	6
Abstract	7
Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή	8
1.1 Ηλεκτροδιαβροχή	8
1.2 Πλεονεκτήματα της ηλεκτροδιαβροχής έναντι εναλλακτικών ενεργητικών μεθόδων χειρισμού σταγόνων	8
1.3 Εφαρμογές χειρισμού σταγόνων με ηλεκτροδιαβροχή	9
1.3.1 Αυτοκαθαριζόμενα παράθυρα αυτοκινήτων	9
1.3.2 Απομάκρυνση Σταγόνων Νερού από Εναλλάκτες Θερμότητας	10
1.3.3 Χειρισμός των σταγόνων σε συστήματα μικρορευστονικής (microfluidics).....	11
1.3.3.1 Κατασκευή μικροσυστοιχιών γονιδίων	12
1.4 Αναγκαιότητα μοντελοποίησης για ποσοτικό σχεδιασμό	14
1.5 Στόχοι της παρούσας εργασίας	15
1.6 Διάρθρωση της εργασίας.....	15
Κεφάλαιο 2: Θεωρητικό Μέρος	16
2.1 Στοιχεία Φυσικοχημείας Διεπιφανειών.....	16
2.1.1 Επιφανειακή Τάση	16
2.1.2 Γωνία Επαφής Σταγόνας και Εξίσωση Young	18
2.1.3 Διαβροχή Επιφανειών και Υστέρηση Γωνίας Επαφής.....	19
2.1.4 Εξάπλωση Σταγόνας σε Στερεή Επιφάνεια.....	19
2.1.5 Εξίσωση Young – Laplace.....	20
2.2 Το Φαινόμενο της Ηλεκτροδιαβροχής	22
2.2.1 Πειραματική Διάταξη και Διαδικασία Ηλεκτροδιαβροχής.....	22
2.2.1.1 Διάταξη και Διαδικασία Εφαρμογής Απλών Τετραγωνικών Ηλεκτρικών Παλμών	22
2.2.1.2 Διάταξη και Διαδικασία Εφαρμογής Διπλών Τετραγωνικών Ηλεκτρικών Παλμών	23
2.2.2 Εξίσωση Lippmann και Αριθμός Ηλεκτροδιαβροχής.....	24
2.3 Μαθηματική Μοντελοποίηση του Προβλήματος	26
2.3.1 Διατήρηση Ορμής και Μάζας	26
2.3.2 Τροποποίηση της Εξίσωσης Young – Laplace	26
2.3.2.1 Εισαγωγή Αλληλεπίδρασης Υγρού – Στερεού και Μοντέλο Πίεσης Αποσύνδεσης	26
2.3.2.2 Εισαγωγή Τάσεων Αλληλεπίδρασης Υγρού – Περιβάλλοντος Ρευστού.....	28
2.3.3 Μοντελοποίηση Τριβής Μεταξύ Σταγόνας και Στερεού Υποστρώματος.....	29

2.4 Υπολογιστική Ανάλυση	31
Κεφάλαιο 3: Προσομοίωση Αναπήδησης και Απεικόνιση Σταγόνας Όγκου 5 μL.....	33
3.1 Εφαρμογή απλού ηλεκτρικού παλμού τάσης 135V και διάρκειας 7ms.....	33
3.2 Εφαρμογή απλών ηλεκτρικών παλμών αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.79	38
3.2.1 Παλμός διάρκειας 3.5 ms	38
3.2.2 Παλμός διάρκειας 10.5 ms	40
3.3 Εφαρμογή Διπλού ηλεκτρικού παλμού τάσης 240V, διάρκειας 7ms και περιόδου 16ms	42
Κεφάλαιο 4: Προσομοίωση Οριακών Σεναρίων Αποκόλλησης Σταγόνων Νερού	45
4.1 Περιγραφή των σεναρίων προς προσομοίωση.....	45
4.2 Αποτελέσματα των προσομοιώσεων και αποκλίσεις από τη βιβλιογραφία	46
4.3 Εύρεση νέων οριακών σεναρίων στις περιπτώσεις μεγάλης απόκλισης.....	48
Κεφάλαιο 5: Σύγκριση Επίδρασης της Εφαρμογής Απλού και Διπλού Παλμού	53
5.1 Εφαρμογή απλού παλμού	53
5.2 Εφαρμογή διπλού παλμού	55
Συμπεράσματα και Προτάσεις για Μελλοντική Έρευνα	57
Βιβλιογραφία	58

Περίληψη

Η ανάγκη αποκόλλησης σταγόνων από στερεές επιφάνειες εμφανίζεται σε πολυάριθμες συσκευές και διατάξεις, όπως παράθυρα αυτοκινήτων, εναλλάκτες θερμότητας κ.ά. . Η αποκόλληση των σταγόνων μπορεί να πραγματοποιηθεί με ποικίλες μεθόδους, με αυτήν της ηλεκτροδιαβροχής να εμφανίζει υψηλότερη αποδοτικότητα και ακρίβεια στον έλεγχο των σταγόνων έναντι των υπολοίπων. Η ηλεκτροδιαβροχή αποτελεί τεχνική εφαρμογής ηλεκτρικής τάσης σε ηλεκτρόδια πάνω στα οποία βρίσκονται ηλεκτρικά μονωμένα τοποθετημένες σταγόνες. Η εφαρμογή της ηλεκτρικής τάσης οδηγεί σε έλξη της σταγόνας από το στερεό υπόστρωμα στο οποίο βρίσκεται και άρα σε μείωση της γωνίας επαφής της. Η ηλεκτροδιαβροχή είναι μία μέθοδος που χρησιμοποιείται γενικά για το χειρισμό και τη μετακίνηση των σταγόνων και όχι μόνο στην απομάκρυνσή τους από επιφάνειες. Μέσω αυτής μπορούν να κατασκευαστούν συστήματα ψηφιακής μικρορευστονικής με πολυάριθμα ηλεκτρόδια, τα οποία ελεγχόμενα από ηλεκτρονικούς υπολογιστές είναι ικανά να μετατοπίσουν επακριβώς μία σταγόνα πάνω σε μία επίπεδη επιφάνεια, να τη χωρίσουν σε μικρότερες, ή να ενώσουν δύο σταγόνες σε μία. Τέτοια συστήματα έχουν ποικίλες εφαρμογές, ιδίως βιολογικού χαρακτήρα.

Για το σωστό σχεδιασμό των διατάξεων ελέγχου σταγόνων είναι σημαντικό να υπάρχει η ικανότητα προσομοίωσης και πρόβλεψης της συμπεριφοράς των σταγόνων, καθώς με αυτόν τον τρόπο μπορεί να καταστεί γρηγορότερη και οικονομικότερη η κατασκευή λειτουργικών συσκευών. Η ερευνητική ομάδα υποστήριξης της διπλωματικής εργασίας έχει αναπτύξει ένα μοντέλο προσομοίωσης σταγόνων πάνω από στερεές επιφάνειες, στο οποίο η αλληλεπίδραση των σταγόνων με τις επιφάνειες περιγράφεται από έναν επιπλέον όρο πίεσης που εισέρχεται στην εξίσωση Young – Laplace, για την έκφραση ενός ολοκληρωμένου ισοζυγίου μηχανικής ισορροπίας της σταγόνας. Αυτή η επιπλέον πίεση που εισάγεται, ονομάζεται πίεση αποσύνδεσης (disjoining pressure).

Σε αυτήν την εργασία, ενσωματώνοντας το παραπάνω μοντέλο στο λογισμικό COMSOL Multiphysics®, πραγματοποιήθηκε προσομοίωση της αποκόλλησης σταγόνων από ένα στερεό υπόστρωμα μέσω ηλεκτροδιαβροχής. Η διαδικασία απομάκρυνσης σταγόνων μέσω ηλεκτροδιαβροχής αποτελείται από ένα αρχικό στάδιο στο οποίο εφαρμόζεται ηλεκτρική τάση στα ηλεκτρόδια του υποστρώματος, απλώνοντας τις σταγόνες πάνω στο υπόστρωμα, και ένα δεύτερο στάδιο, κατά το οποίο η εφαρμοζόμενη τάση αναιρείται, οι σταγόνες αρχίζουν να ανακτούν το αρχικό σχήμα τους και αποκολλώνται από το υπόστρωμα, εφόσον η επιφανειακή ενέργεια που τους έχει δοθεί μέσω της παραμόρφωσης είναι αρκετή. Οι προσομοιώσεις που εκτελέστηκαν περιλαμβάνουν την εφαρμογή απλών και διπλών τετραγωνικών παλμών συνεχούς ηλεκτρικής τάσης. Προσομοιώθηκαν διαφορετικά σενάρια εφαρμοζόμενης διαφοράς δυναμικού και όγκου σταγόνας, των οποίων τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με τα αντίστοιχα πειραματικά που αναγράφονται στο άρθρο των Lee et al.¹ Στόχος της εργασίας ήταν η εξέταση της ικανότητας του μοντέλου πίεσης αποσύνδεσης να περιγράψει την αποκόλληση σταγόνων από επιφάνειες μέσω ηλεκτροδιαβροχής.

Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων έδειξαν ότι το μοντέλο μπορεί να περιγράψει πολύ καλά τα σχήματα που εμφανίζουν οι σταγόνες, δίνοντας πολύ καλή συμφωνία με τα πειράματα. Εμφανίστηκαν, όμως και αποκλίσεις ως προς το μέγιστο ύψος που προσλαμβάνουν η σταγόνες μετά την αποκόλλησή τους, οι οποίες ενδέχεται να οφείλονται και σε διαταραχή των πειραματικών αποτελεσμάτων από τα ηλεκτρόδια, που αλληλεπιδρούν με τις σταγόνες μέσω δυνάμεων συνάφειας στην πειραματική διάταξη. Επίσης, επιβεβαιώθηκε ότι η εφαρμογή διπλών παλμών επιτρέπει αποκόλληση των σταγόνων με χαμηλότερη εφαρμοζόμενη τάση σε σύγκριση με την εφαρμογή απλών παλμών.

Abstract

The need to detach liquid droplets from solid surfaces arises in numerous processes and devices, e.g., in automobile windows, heat exchangers, etc. The detachment of the droplets can be accomplished with various methods, with those based on electrowetting offering higher efficiency and accuracy in controlling the droplet behavior. Electrowetting involves the application of an electric potential difference between a droplet and an electrode on top of which the droplet is deposited, with a layer of insulating material in-between that prevents direct electrical contact between the droplet and the electrode. The application of voltage leads to attraction of the droplet by the solid substrate and reduction of the contact angle between the droplet and the substrate. Electrowetting is a general and versatile method that is used to manipulate droplets on solid substrates in various ways, not necessarily involving detachment from the substrates. It forms a basis for the manufacture of digital microfluidic systems with numerous electrodes, which allow precise computer-controlled displacement of a droplet on a solid surface, division of the droplet into smaller ones, or coalescence of two droplets into a single one. Such systems find many applications, especially in bioengineering.

For the correct design of droplet control systems it is important to develop an ability to simulate and predict the behavior of droplets on solid substrates; accurate modeling and prediction save time and expense in the design and manufacture of devices with tailor-made characteristics. The research group which supports the diploma thesis has developed a model for simulating droplets on solid substrates, in which the interaction between a droplet and the substrate is described in terms of an extra pressure term, which enters the Young-Laplace equation in expressing a balance condition for the mechanical equilibrium of the droplet. This extra pressure is named disjoining pressure.

In this diploma thesis we incorporate the model mentioned above within a partial differential equation formulation for droplets on solid substrates, which we solve with the Finite Element Method using the COMSOL Multiphysics® software package. We simulate processes of detachment of droplets from a planar solid surface that take advantage of the phenomenon of electrowetting. The process of removing a droplet from the substrate comprises an initial stage, during which an electric potential difference is applied on the electrodes, causing the droplet to spread against the substrate. In a second stage, the applied potential difference is removed, the droplet starts shrinking laterally gaining vertical momentum and detaches itself from the substrate, provided the surface energy imparted to it during the field-induced deformation of the first stage is sufficiently high. The simulations executed included application of single and double square pulses of continuous voltage. Various scenarios have been investigated by varying the imposed voltage and the droplet size. Predicted results have been compared against the corresponding experimental measurements reported in the article of Lee et al.¹ An objective of the thesis was to investigate the ability of the disjoining pressure model to describe electrowetting-induced droplet detachment from the substrates.

The simulation results showed that the model can describe very well the shapes adopted by the droplets following removal of the voltage, generally leading to very good agreement with experiments. Some deviations were noted in the maximal height reached by droplets following their detachment; these deviations may be due to perturbations of the experimental measurements by adhesion forces between the droplets and counter-electrodes, which are not included in the simulations. Furthermore, it was confirmed that the application of double pulses allows detachment of the droplets at lower voltage in comparison to the application of single pulses.

Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή

Ο χειρισμός των ρευστών αποτελούσε πάντοτε σημαντικό αντικείμενο για τον άνθρωπο, λόγω της εμφάνισής τους σε πολυάριθμες εφαρμογές. Με την πρόοδο της τεχνολογίας έχει γίνει εφικτή η αλληλεπίδραση με την ύλη σε πολύ μικρές διαστάσεις και έχει αναδυθεί η επιθυμία κατασκευής μικροσκοπικών διατάξεων για την καλύτερη εκμετάλλευσή της. Ο κατάλληλος έλεγχος της συμπεριφοράς των σταγόνων σε κλίμακα μικρομέτρων (μm) μπορεί να οδηγήσει στο σχεδιασμό αποδοτικότερων διεργασιών και συσκευών που χρησιμοποιούνται σε καθημερινή βάση από τον άνθρωπο. Για το χειρισμό των σταγόνων και του τρόπου με τον οποίο αυτές διαβρέχουν μια επιφάνεια, έχουν αναπτυχθεί διάφορες μέθοδοι που χωρίζονται σε δύο κύριες κατηγορίες, τις ενεργητικές και τις παθητικές. Οι ενεργητικές μέθοδοι απαιτούν προσφορά ενέργειας (π.χ. ηλεκτρική ενέργεια – μέθοδος ηλεκτροδιαβροχής & μέθοδοι ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων, κινητική ενέργεια – μηχανικές μέθοδοι), ενώ οι παθητικές (π.χ. μικροδομές ή χημικές επιστρώσεις σε επιφάνειες για τον έλεγχο της γωνίας επαφής) δεν απαιτούν. Σε αυτήν την εργασία επιλέχθηκε ο ενεργητικός χειρισμός των σταγόνων, καθώς καθιστά δυνατή την επέμβαση στο σύστημα σταγόνας – επιφάνειας και την ελεγχόμενη μεταβολή των παραμέτρων συναρτήσει του χρόνου. Από τις διαθέσιμες ενεργητικές μεθόδους χρησιμοποιήθηκε αυτή της ηλεκτροδιαβροχής (electrowetting), η οποία, εμφανίζοντας μεγαλύτερη απόδοση από άλλες μεθόδους και καλό έλεγχο των σταγόνων, προσελκύει πολύ συχνά το ενδιαφέρον των ερευνητών.

1.1 Ηλεκτροδιαβροχή

Η ηλεκτροδιαβροχή (electrowetting) αποτελεί μια τεχνική όπου, μέσω επιβολής ηλεκτρικής τάσης, αναπτύσσονται ελκτικές δυνάμεις ανάμεσα στη γραμμή επαφής μιας σταγόνας και το υπόστρωμα (substrate) στο οποίο αυτή είναι τοποθετημένη, ελαττώνοντας τη μεταξύ τους γωνία επαφής. Η ηλεκτρική τάση επιβάλλεται μέσω ηλεκτροδίων στο υπόστρωμα (ή και στη σταγόνα), ενώ μεταξύ της σταγόνας και των ηλεκτροδίων του υποστρώματος παρεμβάλλεται ένα διηλεκτρικό υλικό. Με αυτόν τον τρόπο τα αναπτυσσόμενα φορτία παραμένουν στις θέσεις τους, ώστε να διατηρείται η βαθμίδα ηλεκτρικού δυναμικού ανάμεσα στη σταγόνα και το υπόστρωμα και να ασκούνται οι ελκτικές δυνάμεις μεταξύ τους. Όπως μπορεί να συμπεράνει κανείς, η διάταξη σταγόνας – υποστρώματος θυμίζει πυκνωτή, στις πλάκες του οποίου αποθηκεύεται ορισμένη ποσότητα ηλεκτρικού φορτίου, με κάποιο μονωτικό υλικό να εμποδίζει την ηλεκτρική επαφή μεταξύ των πλακών.

1.2 Πλεονεκτήματα της ηλεκτροδιαβροχής έναντι εναλλακτικών ενεργητικών μεθόδων χειρισμού σταγόνων

Εκτός από την ηλεκτροδιαβροχή, έχουν αναπτυχθεί και άλλες ενεργητικές μέθοδοι για τον έλεγχο και την απομάκρυνση των σταγόνων από στερεές επιφάνειες. Η κυριότερη εξ αυτών είναι η επιβολή κίνησης σε σταγόνες μέσω μηχανικών ταλαντώσεων, όπου οι σταγόνες συντονίζονται με τις δονήσεις του υποστρώματος στο οποίο είναι τοποθετημένες. Επιταχύνοντας τις σταγόνες πολύ γρήγορα και σε υψηλές συχνότητες (400g, 1kHz) λαμβάνει χώρα το φαινόμενο της ατομοποίησης (atomization), όπου οι σταγόνες του νερού χωρίζονται σε πολύ μικρότερες και απομακρύνονται από τις επιφάνειες.¹ Ερευνητικά έχει προταθεί η χρήση αυτής της μεθόδου για την απομάκρυνση συσσωρευόμενων σταγόνων νερού από τα ηλεκτρόδια εντός των στοιχείων καυσίμου (fuel cells).² Το κύριο μειονέκτημα που εμφανίζει η

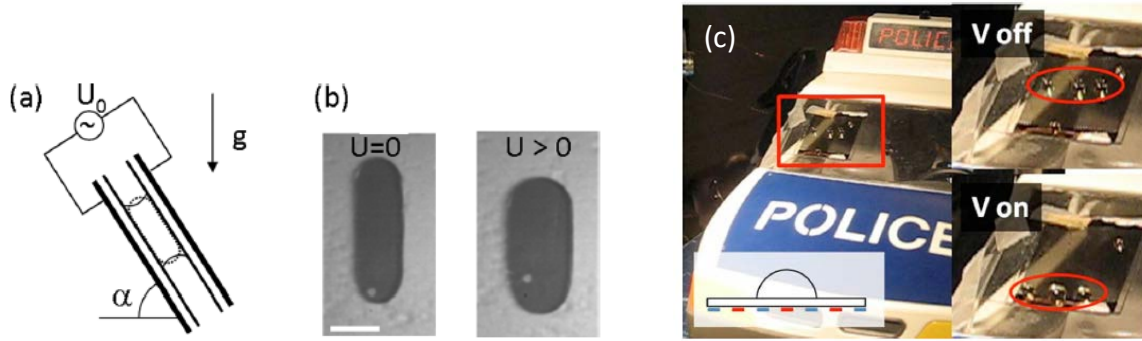
συγκεκριμένη μέθοδος είναι ότι τα μηχανικά τμήματα που απαιτούνται για την εφαρμογή της δημιουργούν έντονο θόρυβο καθώς και δυσκολίες στην ενσωμάτωσή τους στο εκάστοτε σύστημα, λόγω του όγκου που καταλαμβάνουν.¹ Μία άλλη μέθοδος που χρησιμοποιείται για την απομάκρυνση των σταγόνων από στερεές επιφάνειες είναι αυτή των ηλεκτροστατικών δυνάμεων. Σε αυτήν τη μέθοδο, φορτίζοντας ηλεκτρικά μία παράλληλη επιφάνεια με αυτή του υποστρώματος στο οποίο είναι τοποθετημένη η σταγόνα, επιτυγχάνεται έλξη της σταγόνας από τη συγκεκριμένη επιφάνεια, λόγω των ηλεκτροστατικών δυνάμεων, και τελικά η σταγόνα αποκολλάται από το υπόστρωμα στο οποίο βρίσκεται. Όμως για να γίνει κάτι τέτοιο απαιτείται η χρήση αρκετά υψηλής ηλεκτρικής τάσης (της τάξεως των kV).¹ Είναι φανερό λοιπόν ότι η ηλεκτροδιαβροχή έχει προσελκύσει ερευνητές και επιστήμονες λόγω των χαμηλότερων ενεργειακών της απαιτήσεων, αλλά και της αποφυγής – μέσω αυτής – των μειονεκτημάτων που εμφανίζουν οι εναλλακτικές μέθοδοι απομάκρυνσης σταγόνων από στερεές επιφάνειες. Επίσης, η ηλεκτροδιαβροχή έχει την ικανότητα ελεγχόμενης μετακίνησης και μορφοποίησης των σταγόνων, σε αντίθεση π.χ. με τη μέθοδο της ατομοποίησης σταγόνων μέσω μηχανικών ταλαντώσεων.

1.3 Εφαρμογές χειρισμού σταγόνων με ηλεκτροδιαβροχή

Ο χειρισμός των σταγόνων μέσω της ηλεκτροδιαβροχής έχει μελετηθεί από πολυάριθμους ερευνητές, οι οποίοι, κατασκευάζοντας πρωτότυπες συσκευές, έχουν προτείνει εφαρμογές όπου αυτός μπορεί να αξιοποιηθεί.^{1,3-9} Παρακάτω περιγράφονται μερικές από αυτές.

1.3.1 Αυτοκαθαριζόμενα παράθυρα αυτοκινήτων

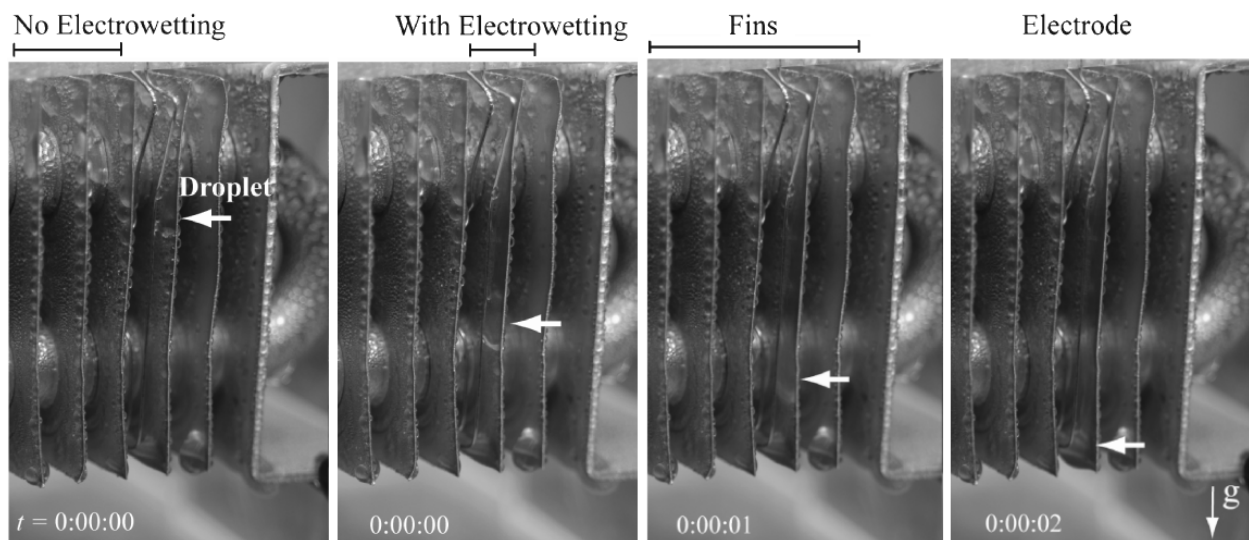
Οι *t' Marnette et al.* έχουν κατορθώσει, μέσω της ηλεκτροδιαβροχής, να υπερνικήσουν τις διεπιφανειακές δυνάμεις (στερεού – υγρού – αερίου), που ακινητοποιούν τις σταγόνες πάνω σε μεγάλες στερεές επιφάνειες.³ Σε μία διάταξη που αποτελείται από δύο παράλληλες γυάλινες πλάκες, οι οποίες διατρέχονται από ηλεκτρόδια και είναι επικαλυμμένες με πολυμερικά στρώματα (HDPE, PTFE, Teflon), τοποθετείται μεταξύ των πλακών σταγόνα υδατικού διαλύματος KCl και για διάφορες τιμές της κλίσης των πλακών σε σχέση με τον ορίζοντα, διατηρώντας σταθερή τη μεταξύ τους απόσταση, εφαρμόζεται εναλλασσόμενη ηλεκτρική τάση μεταξύ των δύο πλακών, που οδηγεί στην αποκόλληση της σταγόνας, τη μείωση των διεπιφανειακών δυνάμεων και στην επιτάχυνσή της λόγω της βαρύτητας. Έτσι επιτυγχάνεται απομάκρυνση της ακινητοποιημένης σταγόνας από τις επιφάνειες των πλακών. Με την ίδια λογική εφαρμόζεται η παραπάνω διαδικασία σε μία μόνο στερεή επιφάνεια. Στο τζάμι ενός παιχνιδιού αυτοκινήτου τοποθετούνται σταγόνες του υδατικού διαλύματος, ενώ από την άλλη μεριά τοποθετούνται εναλλάξ παράλληλα ηλεκτρόδια που συνδέονται με αντίθετους πόλους της ηλεκτρικής πηγής. Μετά από εφαρμογή της τάσης επιτυγχάνεται η απομάκρυνση των προσκολλημένων σταγόνων από την επιφάνεια του τζαμιού. Προτείνεται από τους συγγραφείς η εφαρμογή παρόμοιας διάταξης για την κατασκευή αυτοκαθαριζόμενων παμπρίζ αυτοκινήτων.



Σχήμα 1. Οι εικόνες των πειραματικών διατάξεων απομάκρυνσης σταγόνας από κεκλιμένες επιφάνειες, όπως αυτές παρουσιάζονται στη βιβλιογραφία: (a) η διάταξη των 2 παράλληλων γυάλινων πλακών, (b) η σταγόνα εντός των παράλληλων πλακών πριν και μετά την επιβολή ηλεκτρικής τάσης (άσπρη γραμμή: 5μm), (c) η διάταξη απομάκρυνσης σταγόνων από παμπρίζ παιχνιδιού αυτοκινήτου.³

1.3.2 Απομάκρυνση Σταγόνων Νερού από Εναλλάκτες Θερμότητας

Πολλές φορές στους εναλλάκτες θερμότητας των ψυκτικών συσκευών (καταψυκτών, κλιματιστικών κ.α.), λόγω της χαμηλής θερμοκρασίας του προς θέρμανση ρευστού και της ύπαρξης υγρασίας στην εξωτερική ατμόσφαιρα, συμπυκνώνονται σταγόνες νερού και επικαθονται στα πτερύγια εναλλαγής θερμότητας. Το γεγονός αυτό εμποδίζει τη μεταφορά της θερμότητας και μειώνει την απόδοση του εναλλάκτη θερμότητας. Για την αντιμετώπιση του παραπάνω φαινομένου, μεταξύ άλλων μεθόδων, έχει δοκιμαστεί και η ηλεκτροδιαβροχή των σταγόνων, όπου, μέσω δύο ηλεκτροδίων (ενός κάτω από τη σταγόνα – στο επίπεδο των πτερυγίων και ενός πάνω από τη σταγόνα), παραμορφώνεται το σχήμα της σταγόνας και με τη βοήθεια της βαρύτητας υπερνικάται η δύναμη της τριβής που συγκρατεί τις σταγόνες στον εναλλάκτη, οδηγώντας στην ταχεία απομάκρυνσή τους από αυτόν.⁴ Στους παραπάνω εναλλάκτες θερμότητας, η ηλεκτροδιαβροχή εφαρμόζεται σε συνδυασμό με την υδρόφοβη επικάλυψη των πτερυγίων εναλλαγής θερμότητας και αυξάνει σημαντικά το ρυθμό απομάκρυνσης των σταγόνων.



Σχήμα 2. Εικόνες της πειραματικής διάταξης απομάκρυνσης σταγόνων από εναλλάκτη θερμότητας μέσω ηλεκτροδιαβροχής, όπως παρουσιάζονται στη βιβλιογραφία.⁴ Στα πτερύγια του εναλλάκτη αρχικά υπάρχουν σταγόνες νερού, μία εκ των οποίων επισημαίνεται με λευκό βέλος. Μετά από εφαρμογή ηλεκτροδιαβροχής στην επιφάνεια του τέταρτου από αριστερά προς τα δεξιά πτερυγίου, είναι ορατό ότι εντός 2 δευτερολέπτων η μαρκαρισμένη σταγόνα κατακυλά και φτάνει στο κατώτατο άκρο του πτερυγίου, σε αντίθεση με τις σταγόνες στα υπόλοιπα πτερύγια οι οποίες δεν φαίνεται να μετατοπίζονται.

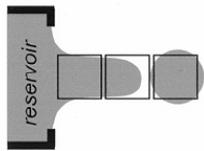
1.3.3 Χειρισμός των σταγόνων σε συστήματα μικρορρευστονικής (microfluidics)

Η ηλεκτροδιαβροχή μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως μέθοδος μετατόπισης, υποδιαίρεσης και συνένωσης σταγόνων μικροσκοπικών διαστάσεων σε συστήματα μικρορρευστονικής με ποικίλες εφαρμογές. Ο όρος «μικρορρευστονική» περιγράφει τον έλεγχο και επακριβή χειρισμό ρευστών, γεωμετρικά περιορισμένων σε μικρές διαστάσεις (κάτω του ενός χιλιοστού), όπου οι επιφανειακές δυνάμεις επηρεάζουν σημαντικότερα τη συμπεριφορά τους, σε σχέση με τις σωματικές δυνάμεις (body forces).

Η χρήση της ηλεκτροδιαβροχής σε αυτά τα συστήματα έχει μελετηθεί από αρκετούς επιστήμονες, λόγω της υψηλότερης απόδοσης και του χαμηλότερου κόστους που μπορεί να προσφέρει έναντι άλλων μεθόδων. Έχουν κατασκευαστεί ειδικές διατάξεις μικρορρευστονικής με πολυάριθμα ηλεκτρόδια υπό μορφή πλακών κάτω από διηλεκτρικές επιφάνειες, τα οποία ενεργοποιούνται επιλεκτικά και για συγκεκριμένα χρονικά διαστήματα μέσω υπολογιστών, προκειμένου να πραγματοποιείται ελεγχόμενος χειρισμός των σταγόνων.⁵⁻⁷ Σε μία σταγόνα που βρίσκεται πάνω από δύο πλακόμορφα ηλεκτρόδια, αν ενεργοποιηθεί μόνο το ένα από αυτά, η γωνία επαφής στην περιοχή που βρίσκεται πάνω από το ενεργοποιούμενο ηλεκτρόδιο μειώνεται, σε αντίθεση με τη γωνία επαφής της πάνω από το ανενεργό ηλεκτρόδιο, η οποία παραμένει σταθερή. Αυτή η ασυμμετρία που σχηματίζεται στη γωνία επαφής της σταγόνας δημιουργεί διαφορά πίεσης και κινεί τη σταγόνα προς το μέρος του ενεργού ηλεκτροδίου. Με αυτόν τον τρόπο μπορεί να γίνει άντληση και μεταφορά μιας σταγόνας από κάποιο ρεζερβουάρ, διαχωρισμός μιας σταγόνας σε δύο μικρότερες αλλά και συνένωση δύο σταγόνων σε μία.⁶

(a)

1. Create droplets from reservoir



2. Cut



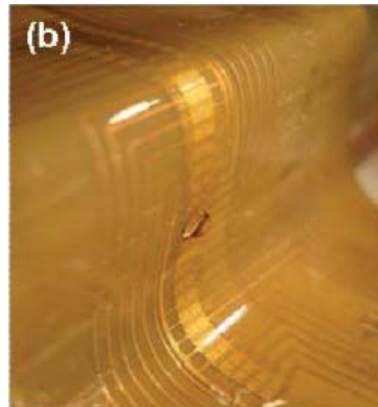
3. Merge



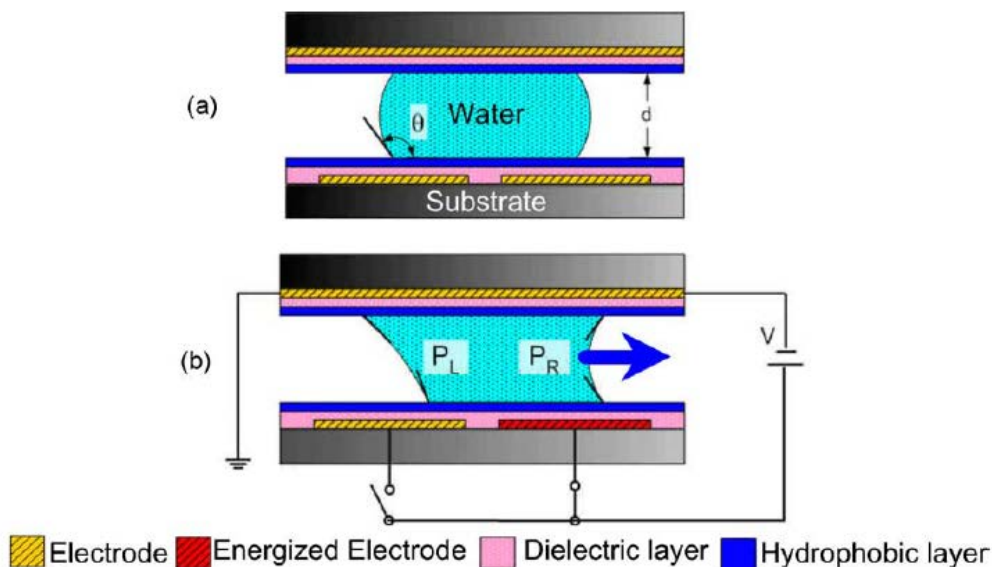
4. Transport



(b)



Σχήμα 3. Εικόνες σχετικές με την εφαρμογή της ηλεκτροδιαβροχής σε διηλεκτρική επιφάνεια στα πλαίσια της μικρορρευστονικής, όπως αυτές παρουσιάζονται στη βιβλιογραφία. (α) Οι βασικές μέθοδοι χειρισμού των σταγόνων μέσω της ηλεκτροδιαβροχής σε συστήματα μικρορρευστονικής.⁶ (β) Χρήση της ηλεκτροδιαβροχής για χειρισμό των σταγόνων και σε μη επίπεδες διατάξεις: Αναρρίχηση σταγόνας σε τοίχο ύψους 15 μm .⁷

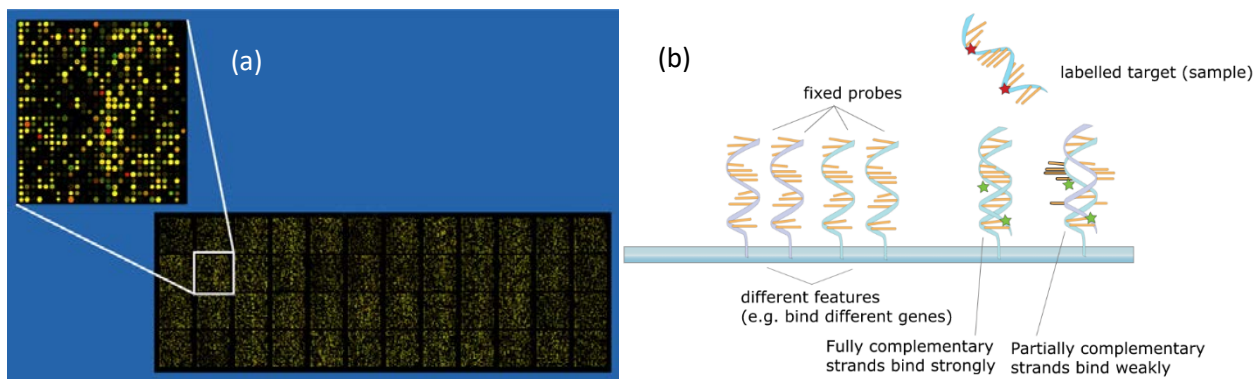


Σχήμα 4. Απεικόνιση του τρόπου χειρισμού και μεταφοράς των σταγόνων μέσω ηλεκτροδιαβροχής σε διηλεκτρική επιφάνεια, όπως αυτή παρουσιάζεται στη βιβλιογραφία.⁹ Συμπεριφορά της σταγόνας: (a) Πριν την εφαρμογή, (b) Μετά την εφαρμογή της ηλεκτρικής τάσης. Η ηλεκτρική τάση εφαρμόζεται επιλεκτικά σε 1 από τα 2 ηλεκτρόδια της κάτω επιφάνειας.

Οι παραπάνω διατάξεις έχουν σχηματίσει έναν ειδικό κλάδο της μικρορευστονικής, την ψηφιακή μικρορευστονική («Digital Microfluidics»), η οποία έχει πολυάριθμες εφαρμογές, κυρίως βιολογικής φύσεως.^{7,8} Οι διατάξεις αυτές μπορούν να χρησιμοποιηθούν οι ίδιες ως φορητές συσκευές (lab-on-a-chip devices) για την ανίχνευση και ανάλυση χημικών ουσιών ή ως μέθοδοι για την κατασκευή άλλων συσκευών ανάλυσης, όπως οι μικροσυστοιχίες γονιδίων που παρουσιάζονται παρακάτω. Ακόμη, τέτοια συστήματα μικρορευστονικής έχουν χρησιμοποιηθεί και για την κατασκευή οθονών LCD.¹⁰

1.3.3.1 Κατασκευή μικροσυστοιχιών γονιδίων

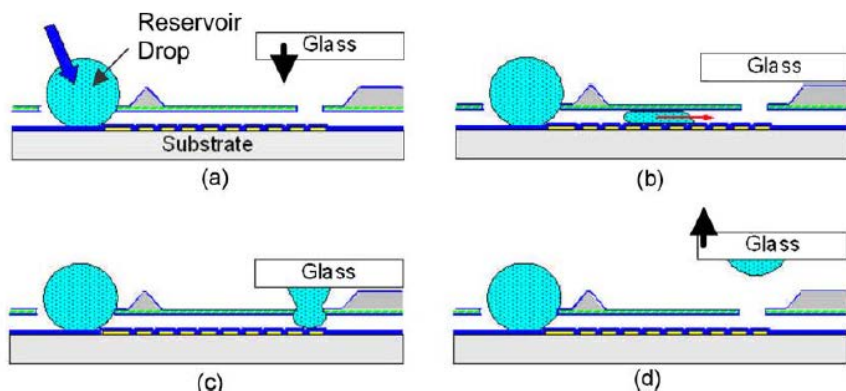
Οι μικροσυστοιχίες γονιδίων (DNA microarrays – DNA chips) είναι συσκευές που χρησιμοποιούνται για την ανίχνευση ύπαρξης συγκεκριμένων γονιδίων σε δείγματα. Αποτελούνται από πολυάριθμα διατεταγμένα μικροσκοπικά σημεία πάνω σε μία στερεή επιφάνεια, κατά κανόνα γυάλινη, καθένα από τα οποία περιέχει κάποια ποσότητα ενός συγκεκριμένου γονιδίου (αλληλουχίας DNA). Τοποθετώντας στη συστοιχία ένα δείγμα γενετικού υλικού, εάν αυτό περιλαμβάνει τα κατάλληλα συμπληρωματικά γονίδια, θα αναπτύξει δεσμούς υδρογόνου με τους κατάλληλους υποδοχείς της μικροσυστοιχίας, βάσει της συμπληρωματικότητας των αζωτούχων βάσεων. Με την τοποθέτηση φθορίζουσών ουσιών στο εξεταζόμενο δείγμα, μπορούν να εντοπιστούν οι υποδοχείς της μικροσυστοιχίας στους οποίους αυτό ενσωματώνεται και άρα να προσδιοριστούν τα γονίδια της επιφάνειας της μικροσυστοιχίας που περιέχονται σε αυτό.



Σχήμα 5. Μικροσυστοιχίες γονιδίων: (α) Απεικόνιση μικροσυστοιχίας DNA με 37,500 περίπου υποδοχές γονιδίων.¹¹ Οι χρωματισμένες κουκίδες αντιστοιχούν σε συγκεκριμένα γονίδια, που περιέχονται στα εξεταζόμενα δείγματα. (β) Γραφική αναπαράσταση της επιφάνειας μιας συστοιχίας DNA, όπου πάνω στο στερεό υπόστρωμα βρίσκονται τοποθετημένα διάφορα γονίδια (μονόκλωνα μόρια DNA), τα οποία κατά την τοποθέτηση ενός δείγματος συγκρατούν τις συμπληρωματικές τους αλυσίδες, εφ' όσον αυτές περιέχονται στο εξεταζόμενο δείγμα.¹² Τα μόρια γενετικού υλικού του δείγματος, πριν τοποθετηθούν στη μικροσυστοιχία, επισημαίνονται με φθορίζουσες ουσίες ((β) - αστεράκια), ώστε μετά να εντοπίζονται στα σημεία της μικροσυστοιχίας με τα οποία ταιριάζουν ((α) - χρωματισμένες κουκίδες).

Στη βιβλιογραφία μελετήθηκε και κατασκευάστηκε μία συσκευή που, μέσω ηλεκτροδιαβροχής, κατευθύνει και τοποθετεί σταγόνες με γονίδια πάνω σε ειδικές στερεές πλάκες, κατασκευάζοντας μικροσυστοιχίες DNA.⁹ Η συσκευή αυτή περιλαμβάνει δύο παράλληλες πλάκες που η μεταξύ τους απόσταση είναι πολύ μικρή, σχηματίζοντας ένα λεπτό κανάλι μικρής διατομής (microchannel), μέσα στο οποίο μπορούν να κινηθούν οι προς τοποθέτηση σταγόνες με τα γονίδια και ένα ρεζερβουάρ από το οποίο αυτές αντλούνται. Το εσωτερικό του καναλιού είναι επιστρωμένο με υδρόφοβο υλικό, κάτω από το οποίο βρίσκεται ένα σύστημα με πολυάριθμα ηλεκτρόδια ελεγχόμενα από υπολογιστή. Ενεργοποιώντας κατάλληλα τα ηλεκτρόδια, σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, σχηματίζεται ασυμμετρία στη γωνία επαφής των σταγόνων, που οδηγεί στην άντλησή τους, μιας – μιας, από το ρεζερβουάρ και τη μετακίνησή τους προς την άκρη του καναλιού. Έπειτα, οι σταγόνες εξέρχονται από μία οπή, με τη βοήθεια της υψηλότερης, σε σχέση με το περιβάλλον, πίεσης που επικρατεί εντός του καναλιού. Η αυξημένη αυτή πίεση οφείλεται στο γεγονός ότι το ύψος του καναλιού είναι σημαντικά μικρότερο από τη διάμετρο της οπής εξόδου. Αφού οι σταγόνες εξέλθουν, συγκρατούνται από το υδρόφοβο υπόστρωμα της μικροσυστοιχίας γονιδίων, με το οποίο έρχονται σε επαφή. Επειδή η μέθοδος χειρισμού των σταγόνων με αυτόν τον τρόπο θυμίζει διαδικασία συμβατικής εκτύπωσης (inkjet printing), αλλά ελέγχει πολύ προσεγγμένα τις σταγόνες, έχει δοθεί σε αυτήν ο όρος «soft-printing». Η διαδικασία του «soft-printing» μπορεί να σχηματίσει αρκετά καλές μικροσυστοιχίες DNA με σχετικά μικρό κόστος, εμφανίζοντας πλεονεκτήματα έναντι των συμβατικών μεθόδων κατασκευής τους. Όμως βρίσκεται σε πολύ πρώιμο στάδιο και εμφανίζει ορισμένα προβλήματα (π.χ. παραμένουν μικρές ποσότητες σταγόνων στο στόμιο της οπής της διάταξης, οι οποίες δεν προσκολλώνται στο γυάλινο υπόστρωμα).

Σημειώνεται ότι μία από τις συμβατικές μεθόδους που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή μικροσυστοιχιών γονιδίων είναι αυτή της εκτύπωσης ψεκασμού (inkjet printing), η οποία, αν και είναι σχετικά φθηνή, απλώνει άτσαλα τις σταγόνες με τα γονίδια πάνω στις στερεές πλάκες, λόγω του κενού που υπάρχει μεταξύ της συσκευής εκτύπωσης και των πλακών, επιτρέποντας στις σταγόνες να επιταχυνθούν.



Σχήμα 6. Απεικόνιση των σταδίων λειτουργίας της πειραματικής συσκευής «soft printing», όπως αυτή παρουσιάζεται στη βιβλιογραφία.⁹ Τοποθέτηση της σταγόνας σε γυάλινο υπόστρωμα: (a) Τοποθέτηση του ρεζερβουάρ εντός της συσκευής και της γυάλινης πλάκας δίπλα στη συσκευή, (b) Σχηματισμός και μεταφορά των σταγόνων, (c) Προεξοχή της σταγόνας στην έξοδο της συσκευής και επαφή της με την επιφάνεια του γυάλινου υποστρώματος, (d) Απομάκρυνση της γυάλινης πλάκας.

1.4 Αναγκαιότητα μοντελοποίησης για ποσοτικό σχεδιασμό

Βλέποντας τις εφαρμογές στις οποίες μπορεί να αξιοποιηθεί η ηλεκτροδιαβροχή για το χειρισμό των ρευστών και την ερευνητική προσπάθεια που γίνεται πάνω στην υλοποίησή τους, μπορεί κάποιος να αντιληφθεί την επιθυμία για την ανάπτυξη μιας μαθηματικής μοντελοποίησης και προσομοίωσης του φαινομένου, η οποία θα βοηθούσε σημαντικά στο σχεδιασμό συσκευών βασιζόμενων στην ηλεκτροδιαβροχή. Μία τέτοια μοντελοποίηση, προβλέποντας τη συμπεριφορά των σταγόνων, μπορεί να μειώσει σημαντικά τον αριθμό των δοκιμών και πειραμάτων που χρειάζονται για το σχεδιασμό μιας λειτουργικής συσκευής, ελαττώνοντας τον απαιτούμενο χρόνο καθώς και τις οικονομικές δαπάνες που προκύπτουν (λόγω χρήσης υλικών, κατασκευής εξαρτημάτων κ.α.).

Η εργαστηριακή ομάδα του καθηγητή Α. Παπαθανασίου της Σχολής Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ έχει ασχοληθεί αρκετά με τη μελέτη της συμπεριφοράς σταγόνων ρευστών που βρίσκονται πάνω σε μικροδομημένες και νανοδομημένες επιφάνειες (επιφάνειες με προεξοχές διαστάσεων μm και nm). Ο Δρ. Ν. Χαμάκος έχει αναπτύξει ένα μοντέλο για την προσομοίωση των σταγόνων που βρίσκονται τοποθετημένες σε επιφάνειες, όπου η αλληλεπίδρασή τους με την επιφάνεια στην οποία βρίσκονται εκφράζεται από έναν όρο πίεσης (πίεση αποσύνδεσης – disjoining pressure).¹³ Το μοντέλο αυτό έχει εφαρμοστεί για την πρόβλεψη του σχήματος των σταγόνων που βρίσκονται πάνω σε επιφάνειες με μικροδομές και έχει συγκριθεί και με πειραματικές μετρήσεις.¹⁴ Επίσης έχει εξεταστεί η συμπεριφορά των σταγόνων, όταν αυτές βρίσκονται τοποθετημένες σε κεκλιμένες επιφάνειες και έχουν διεξαχθεί ορισμένες προσομοιώσεις ηλεκτροδιαβροχής σε μικροδομημένες επιφάνειες.^{15,16}

1.5 Στόχοι της παρούσας εργασίας

Σε αυτήν την εργασία πραγματοποιήθηκε προσομοίωση της αναπήδησης σταγόνων από υδρόφοβες επιφάνειες μέσω ηλεκτροδιαβροχής, χρησιμοποιώντας το μοντέλο πίεσης αποσύνδεσης σταγόνας – επιφάνειας, που αναπτύχθηκε από τον Δρ. Νικόλαο Χαμάκο στη διδακτορική του διατριβή.¹³ Οι προσομοιώσεις εκτελέστηκαν υπό τις ίδιες συνθήκες που περιγράφονται στο άρθρο των Lee et al. και πραγματοποιήθηκε σύγκριση των αποτελεσμάτων.¹ Στο άρθρο των Lee et al. μελετάται πειραματικά η αναπήδηση των σταγόνων από στερεές επιφάνειες μέσω επιβολής απλών και διπλών ηλεκτρικών παλμών στο σύστημα σταγόνας – υποστρώματος, για διαφορετικά σενάρια όγκου σταγόνας, εφαρμοζόμενης διαφοράς δυναμικού και χρόνου εξάπλωσης (spreading) της σταγόνας. Βασικός στόχος της εργασίας ήταν να εξεταστεί κατά πόσο καλά μπορεί το μοντέλο πίεσης αποσύνδεσης να προβλέψει τη συμπεριφορά των σταγόνων κατά την αποκόλλησή τους από υδρόφοβες επιφάνειες μέσω ηλεκτροδιαβροχής. Η αποκόλληση σταγόνων από επιφάνειες μέσω ηλεκτροδιαβροχής μπορεί να εφαρμοστεί σε αρκετά από τα παραδείγματα που προαναφέρθηκαν, όπως σε αυτοκαθαριζόμενα παράθυρα και αυτοκαθαριζόμενους εναλλάκτες θερμότητας.

1.6 Διάρθρωση της εργασίας

Η εργασία αυτή αποτελείται από τα εξής τμήματα:

- Το θεωρητικό μέρος, όπου παρουσιάζονται οι φυσικές αρχές και τα μαθηματικά μοντέλα πάνω στα οποία βασίζονται τα αποτελέσματα της εργασίας.
- Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων αναπήδησης σταγόνας όγκου 5μL, όπου συγκρίνονται τα σχήματα και οι μετατοπίσεις των σταγόνων με τα πειραματικά αποτελέσματα.
- Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων των οριακών σεναρίων αποκόλλησης σταγόνων νερού, όπου για διάφορους όγκους σταγόνας βρέθηκαν οι ελάχιστες τιμές της τάσης που απαιτούνται για την αποκόλλησή τους από το υπόστρωμα και οι αποκλίσεις του από τις πειραματικές τιμές.
- Τη σύγκριση εφαρμογής απλού και διπλού ηλεκτρικού παλμού, όπου για κάθε είδος παλμού μελετάται η συμπεριφορά μιας σταγόνας όγκου 5μL και οι απαιτήσεις στην εφαρμοζόμενη ηλεκτρική τάση για την ανύψωσή της.
- Τα συμπεράσματα, όπου συνοψίζεται η εικόνα που προέκυψε μέσω των προσομοιώσεων για την ικανότητα του υπολογιστικού μοντέλου να προβλέπει τη συμπεριφορά των σταγόνων κατά την αναπήδησή τους μέσω ηλεκτροδιαβροχής.

Κεφάλαιο 2: Θεωρητικό Μέρος

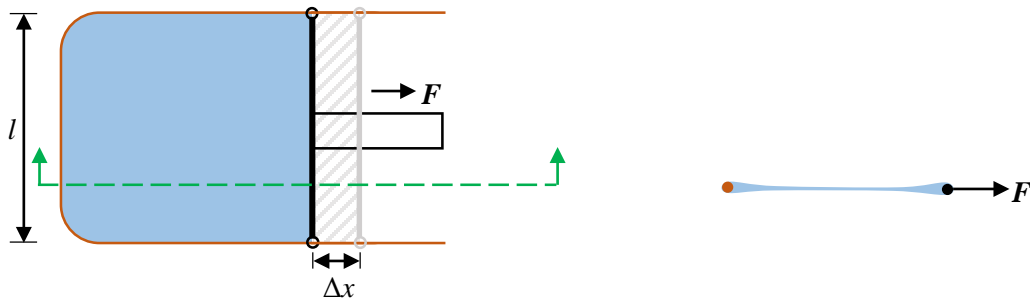
2.1 Στοιχεία Φυσικοχημείας Διεπιφανειών

2.1.1 Επιφανειακή Τάση

Κατά τη συνύπαρξη ενός υγρού με ένα αέριο σε επαφή, η μεταξύ τους διεπιφάνεια συμπεριφέρεται παρόμοια με μία τεταμένη μεμβράνη, καθώς έχει την τάση να ελαχιστοποιήσει το εμβαδόν της. Το γεγονός αυτό οφείλεται στην ανάπτυξη ελκτικών δυνάμεων συνοχής μεταξύ των μορίων των ρευστών, οι οποίες είναι σημαντικά μεγαλύτερες στην περίπτωση του υγρού σε σχέση με αυτήν του αερίου. Έτσι, σε ένα μόριο που βρίσκεται στη διεπιφάνεια μεταξύ της υγρής και αέριας φάσης, η συνισταμένη των δυνάμεων κατευθύνεται προς των κύριο όγκο του υγρού. Για τον λόγο αυτό, τα μόρια που βρίσκονται στην διεπιφάνεια είναι ενεργειακά αναβαθμισμένα.

Η επιφανειακή τάση αποτελεί ένα φυσικό μέγεθος, το οποίο εκφράζει την «επιθυμία» των ρευστών για μείωση του εμβαδού της διεπιφάνειάς τους, που περιεγράφηκε παραπάνω.

Η επιφανειακή τάση μπορεί να μετρηθεί κατ' αρχήν ως εξής.



Σχήμα 7. Πειραματική διάταξη εμβόλου που χρησιμοποιείται για τον ορισμό της επιφανειακής τάσης. Η διάταξη αποτελείται από ένα συρμάτινο πλαίσιο (καφέ χρώμα) στο οποίο μπορεί να κινηθεί ένα διδιάστατο έμβολο (μαύρο), ενώ μεταξύ του σύρματος και του εμβόλου έχει τοποθετηθεί ρευστό (μπλε), το οποίο έχει αποκτήσει τη μορφή τεταμένης μεμβράνης. Δεξιά απεικονίζεται και η εγκάρσια τομή της διάταξης, στο σημείο που επισημαίνεται από την πράσινη διακεκομμένη γραμμή. Με F συμβολίζεται η απαιτούμενη δύναμη για τη συγκράτηση του εμβόλου σε σταθερή θέση, με l το μήκος του εμβόλου και με Δx το μήκος μιας αντιστρεπτής μετατόπισης του εμβόλου. Η νέα θέση του εμβόλου απεικονίζεται με γκρι χρώμα.

Έχοντας ένα συρμάτινο πλαίσιο σχήματος U πάνω στο οποίο μπορεί να κινηθεί χωρίς τριβές ένα πολύ λεπτό αμφίπλευρα αγκιστρωμένο ευθύγραμμο σύρμα - έμβολο, εάν μεταξύ του εμβόλου και του πλαισίου έχει τοποθετηθεί και απλωθεί μία σταγόνα υγρού με τη μορφή υμενίου, αυτή θα έχει την τάση να συρρικνωθεί και θα τραβά το έμβολο προς το εσωτερικό τμήμα του πλαισίου. Για να διατηρείται το έμβολο σε σταθερή θέση, θα πρέπει να ασκηθεί σε αυτό μία δύναμη με τιμή F η οποία είναι ανάλογη του μήκους l του εμβόλου. Ο λόγος $\frac{F}{l}$ εξαρτάται από τα χαρακτηριστικά του υγρού (π.χ. σύσταση, θερμοκρασία κλπ.). Για να αυξήσουμε τη διεπιφάνεια του υγρού με τον αέρα που το περιβάλλει, μπορούμε να μετακινήσουμε αντιστρεπτά το έμβολο, προκειμένου όλη η ενέργεια που θα δώσουμε να χρησιμοποιηθεί στην αύξηση της διεπιφάνειας υγρού - αέρα. Σε μία τέτοια μεταβολή, όλες οι δυνάμεις που ασκούνται στο έμβολο θα πρέπει να είναι πρακτικά σε ισορροπία και άρα η δύναμη που θα ασκείται για τη μετατόπισή του θα έχει την τιμή F . Μετατοπίζοντας το έμβολο κατά μήκος Δx , η συνολική

διεπιφάνεια υγρού – αέρα θα αυξηθεί κατά $\Delta a = 2 \cdot l \cdot \Delta x$, καθώς η κάθε επιφάνεια (μία εμπρός και μία πίσω) θα αυξηθεί κατά $l \cdot \Delta x$. Το έργο που θα δοθεί στο υμένιο για την αύξηση της επιφανείας του υπό σταθερή θερμοκρασία και όγκο, άρα και η αύξηση ελεύθερης ενέργειας του ρευστού, θα είναι $W = F \cdot \Delta x$.

Ορίζουμε ως επιφανειακή τάση το μέγεθος:

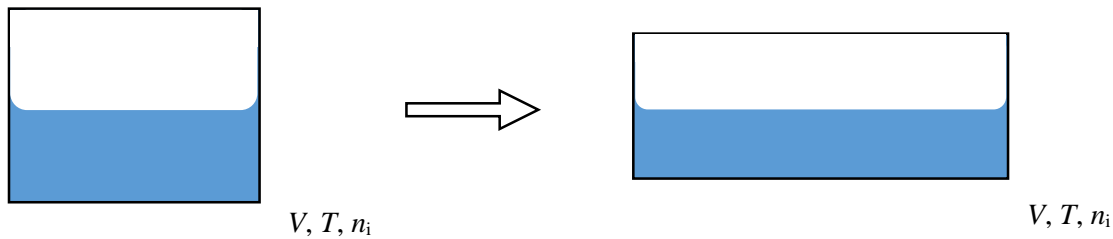
$$\gamma = \frac{F}{2l} = \frac{F \cdot \Delta x}{2l \cdot \Delta x} = \frac{W}{\Delta a} \quad (1)$$

το οποίο είναι χαρακτηριστικό του κάθε ρευστού και ανεξάρτητο της γεωμετρίας που χρησιμοποιείται.

Η επιφανειακή τάση μπορεί να οριστεί πιο αυστηρά μέσω της θερμοδυναμικής.

Συγκεκριμένα, η επιφανειακή τάση ορίζεται ως η μερική παράγωγος της ολικής ενέργειας Helmholtz ενός διφασικού συστήματος ως προς το εμβαδό της ολικής διεπιφάνειας μεταξύ των δύο φάσεων, υπό σταθερό αριθμό mol του κάθε συστατικού, σταθερό ολικό όγκο του διφασικού συστήματος, καθώς και σταθερή θερμοκρασία.

$$\text{Δηλαδή: } \gamma = \left. \frac{\partial A}{\partial a} \right)_{T, V, n_i} \quad (2)$$



Σχήμα 8. Απεικόνιση της αύξησης της διεπιφάνειας ενός διφασικού συστήματος, όπου διατηρείται σταθερή η θερμοκρασία, ο συνολικός όγκος και ο αριθμός mol κάθε συστατικού. Η αύξηση της διεπιφάνειας a συνεπάγεται αύξηση της ελεύθερης ενέργειας Helmholtz του συστήματος.

Η θεμελιώδης εξίσωση της θερμοδυναμικής, εκφρασμένη ως προς την ελεύθερη ενέργεια Helmholtz και σε διαφορική μορφή, γράφεται ως εξής:

$$dA = -SdT - PdV + \gamma da + \sum_i \mu_i dn_i \quad (3)$$

Η επιφανειακή τάση μετρείται σε $N/m = J/m^2$. Η τιμή της αντανακλά τις διαμοριακές δυνάμεις και μειώνεται αυξανόμενης της θερμοκρασίας, μέχρι το κρίσιμο σημείο T_c όπου μηδενίζεται.

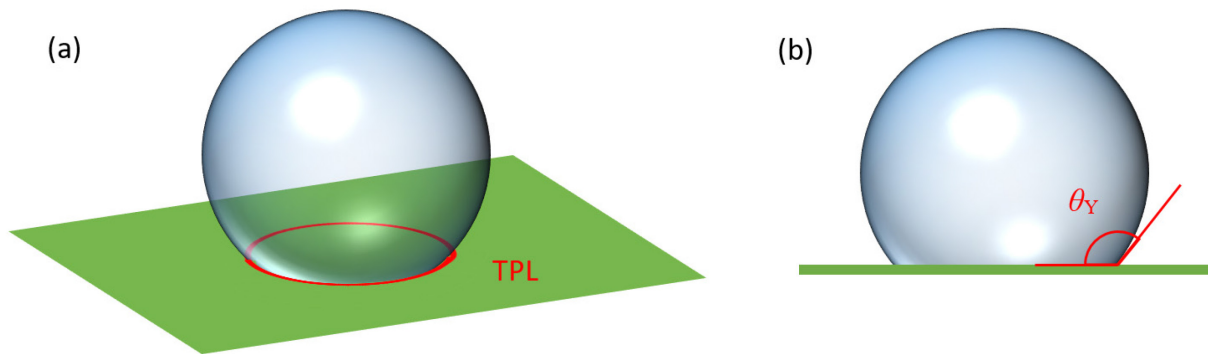
Ο όρος επιφανειακή τάση εφαρμόζεται κυρίως για να περιγράψει τη συμπεριφορά ενός υγρού που έρχεται σε επαφή ένα αέριο (π.χ. τους ατμούς του, ή τον αέρα). Σε περίπτωση όπου εξετάζονται δύο διαφορετικές συμπυκνωμένες φάσεις (υγρό – στερεό, υγρό – υγρό), χρησιμοποιείται ο όρος διεπιφανειακή τάση.

2.1.2 Γωνία Επαφής Σταγόνας και Εξίσωση Young

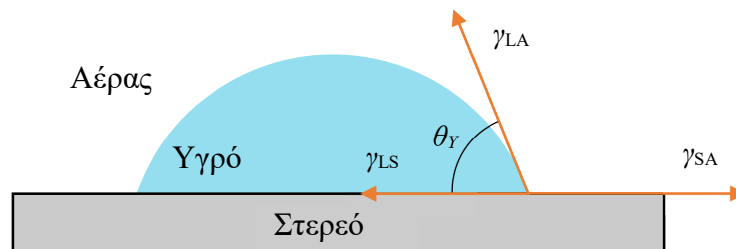
Κατά την ισορροπία μίας σταγόνας πάνω σε ένα στερεό υπόστρωμα σχηματίζεται μία γραμμή στην επιφάνειά της, όπου συναντώνται οι τρεις φάσεις του στερεού, του υγρού και του περιβάλλοντος ρευστού (ambient phase – π.χ. αέρα). Η γραμμή αυτή ονομάζεται γραμμή επαφής τριών φάσεων (Three-Phase contact Line – TPL). Επί της TPL ασκούνται πάνω στη σταγόνα τρεις επιφανειακές δυνάμεις, μία από κάθε διεπιφάνεια του συστήματος, οι οποίες τείνουν να μειώσουν το εμβαδόν της αντίστοιχης διεπιφάνειας. Ανάλογα με το σχετικό μέγεθος αυτών των αλληλεπιδράσεων, η σταγόνα σε ισορροπία σχηματίζει μία γωνία επαφής θ_Y με το στερεό υπόστρωμα (γωνία Young). Η τιμή της γωνίας αυτής εξαρτάται μόνο από τη φύση του στερεού, του υγρού, του αερίου και τη θερμοκρασία. Η γωνία Young, σε σχετικά λείες επιφάνειες, μπορεί να συσχετισθεί με τις διεπιφανειακές τάσεις στερεού-αέρα (γ_{SA}), υγρού-στερεού (γ_{LS}) και υγρού-αέρα (γ_{LA}), μέσω της εξίσωσης Young.¹⁷

$$\gamma_{SA} = \gamma_{LS} + \gamma_{LA} \cos \theta_Y \quad (4)$$

Η εξίσωση αυτή περιγράφει την ισορροπία ανάμεσα στις τρεις διεπιφανειακές δυνάμεις, οι οποίες διέπονται από τις θερμοδυναμικές ιδιότητες του τριφασικού συστήματος.



Σχήμα 9. (a) Απεικόνιση της γραμμής επαφής τριών φάσεων (TPL) σε μία σταγόνα που ισορροπεί πάνω σε ένα στερεό υπόστρωμα (κόκκινος κύκλος). (b) Απεικόνιση της γωνίας Young (θ_Y) που σχηματίζει η σταγόνα με το υπόστρωμα (κόκκινο).



Σχήμα 10. Απεικόνιση της ισορροπίας επιφανειακών δυνάμεων στην γραμμή επαφής τριών φάσεων (TPL) μιας σταγόνας.

2.1.3 Διαβροχή Επιφανειών και Υστέρηση Γωνίας Επαφής

Ο όρος της διαβροχής περιγράφει την ικανότητα μίας σταγόνας να διατηρεί επαφή με μία στερεά επιφάνεια.

Όταν η γωνία επαφής της σταγόνας με την στερεά επιφάνεια είναι οξεία ($0^\circ < \theta < 90^\circ$), λέγεται ότι το υγρό διαβρέχει το στερεό (wetting). Αν το υγρό είναι νερό, η στερεή επιφάνεια καλείται υδρόφιλη.

Όταν η γωνία επαφής της σταγόνας με την στερεά επιφάνεια είναι αμβλεία ($90^\circ < \theta < 180^\circ$), λέγεται ότι το υγρό δεν διαβρέχει το στερεό (non-wetting). Αν το υγρό είναι νερό, η στερεή επιφάνεια καλείται υδρόφοβη.

Όπως προαναφέρθηκε, η γωνία επαφής μιας σταγόνας καθορίζεται από τις χημικές ιδιότητες των υλικών που απαρτίζουν τις τρεις φάσεις. Στα συνήθη υδρόφοβα υλικά (π.χ. Teflon) η γωνία επαφής των σταγόνων νερού δεν ξεπερνά τις 120° . Η τιμή της γωνίας επαφής μιας σταγόνας με μία στερεή επιφάνεια μπορεί να αυξηθεί με την ύπαρξη πολυάριθμων γεωμετρικών μικροδομών πάνω στην επιφάνεια.¹³⁻¹⁵

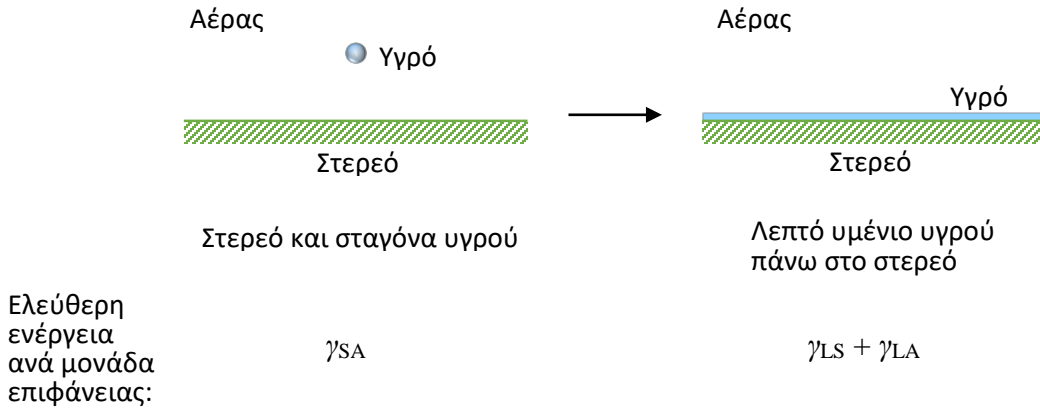
Στην περίπτωση όπου μία σταγόνα κινείται πάνω σε μία στερεά επιφάνεια, εμφανίζονται δύο γωνίες επαφής. Η γωνία που σχηματίζει το μπροστινό τμήμα της σταγόνας (advancing front) με την επιφάνεια ονομάζεται προιούσα γωνία επαφής (advancing contact angle – θ_{adv}), ενώ η γωνία που σχηματίζει το πίσω ακόλουθο μέρος της σταγόνας (receding front) με την επιφάνεια ονομάζεται οπισθοχωρούσα γωνία επαφής (receding contact angle – θ_{rec}). Το φαινόμενο αυτό καλείται υστέρηση της γωνίας επαφής και μπορεί να οφείλεται σε χημική ετερογένεια του στερεού υποστρώματος, σε επιφανειακή τραχύτητα, σε παρουσία ακαθαρσιών ή και σε ύπαρξη εξωτερικά ασκούμενων δυνάμεων, όπως η βαρύτητα (στην περίπτωση κεκλιμένων επιπέδων).

Από το 1996 και ύστερα, χρησιμοποιείται ο όρος της υπερυδροφοβικότητας για την περιγραφή επιφανειών όπου μία σταγόνα παρουσιάζει προιούσα γωνία επαφής (θ_{adv}) μεγαλύτερη ή ίση των 150° και υστέρηση στη γωνία επαφής μικρότερη από 10° ($\Delta\theta = \theta_{adv} - \theta_{rec} < 10^\circ$).¹⁸

2.1.4 Εξάπλωση Σταγόνας σε Στερεή Επιφάνεια

Όταν μία σταγόνα τοποθετείται σε στερεό υπόστρωμα, εφόσον οι αλληλεπιδράσεις των μορίων της επιφανειάς της με το στερεό και το περιβάλλον ρευστό (π.χ. αέρα) είναι ευνοϊκότερες από αυτές του στερεού με το περιβάλλον ρευστό, παρατηρείται το φαινόμενο της εξάπλωσης (spreading), όπου η σταγόνα απλώνεται πλήρως στο υπόστρωμα, σχηματίζοντας ένα πολύ λεπτό στρώμα υγρού.

Συγκεκριμένα, η εξάπλωση παρατηρείται όταν: $\gamma_{LS} + \gamma_{LA} < \gamma_{SA}$ (5)



Σχήμα 11. Απεικόνιση μίας σταγόνας πριν και μετά την εξάπλωσή της πάνω σε ένα στερεό υπόστρωμα. Αναγράφεται και η ελεύθερη ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας για κάθε περίπτωση. Όταν η σταγόνα υγρού έχει σφαιρικό σχήμα, λόγω των πολύ μικρών της διαστάσεων η επιφανειακή της ενέργεια είναι αμελητέα σε σχέση με αυτήν της διεπιφάνειας στερεού – αέρα.

Για την ευκολότερη μελέτη της εξάπλωσης των σταγόνων πάνω σε στερεές επιφάνειες έχει ορισθεί και ο συντελεστής εξάπλωσης (spreading coefficient) ως εξής: $S = \gamma_{SA} - \gamma_{LS} - \gamma_{LA}$ (6)

Όταν $S > 0$, τότε πραγματοποιείται εξάπλωση της σταγόνας στο στερεό υπόστρωμα.

Όταν $S < 0$, τότε η σταγόνα σχηματίζει πεπερασμένη γωνία επαφής με το υπόστρωμα, η τιμή της οποίας εκτιμάται μέσω της εξίσωσης Young: $\cos \theta_Y = \frac{\gamma_{SA} - \gamma_{LS}}{\gamma_{LA}} < 1$ (7)

2.1.5 Εξίσωση Young – Laplace

Η παρουσία της επιφανειακής τάσης οδηγεί στο χαρακτηριστικό σφαιρικό σχήμα των σταγόνων, όταν αυτές βρίσκονται σε κάποιο μέσο, όπως ο αέρας, καθώς με αυτόν τον τρόπο ελαχιστοποιείται το εμβαδόν της διεπιφάνειας μεταξύ της σταγόνας και του περιβάλλοντος μέσου και άρα η ελεύθερη ενέργεια της διεπιφάνειας.

Οι δυνάμεις που ασκούνται σε μία σταγόνα λόγω της επιφανειακής τάσης, εκτός από την παραμόρφωση του σχήματός της, οδηγούν και σε ανάπτυξη διαφοράς πίεσης ανάμεσα στη σταγόνα και το περιβάλλον μέσο. Η πίεση εντός της σταγόνας (από την πλευρά που η επιφάνεια φαίνεται κοίλη) είναι μεγαλύτερη από την εξωτερική.

Η διαφορά πίεσης που αναπτύσσεται μεταξύ ενός σημείου της επιφάνειας της σταγόνας και του περιβάλλοντος μπορεί να συσχετισθεί με το σχήμα της σταγόνας και να υπολογιστεί μέσω της εξίσωσης Young – Laplace:

$$\Delta P = \gamma_{LA} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = \gamma_{LA} \nabla \cdot \hat{n} = \gamma_{LA} C \quad (8)$$

Όπου ΔP είναι η διαφορά της πίεσης μεταξύ της κοίλης πλευράς (σταγόνας) μείον αυτή της κυρτής πλευράς (περιβάλλοντος), γ_{LA} είναι ο συντελεστής επιφανειακής τάσης ανάμεσα στη σταγόνα και το περιβάλλον μέσο (π.χ. αέρας), R_1 και R_2 είναι οι κύριες ακτίνες καμπυλότητας στο εξεταζόμενο σημείο της σταγόνας, \hat{n} είναι το κάθετο μοναδιαίο διάνυσμα στην επιφάνεια της σταγόνας και $C = \nabla \cdot \hat{n}$ είναι η μέση καμπυλότητα της σταγόνας.

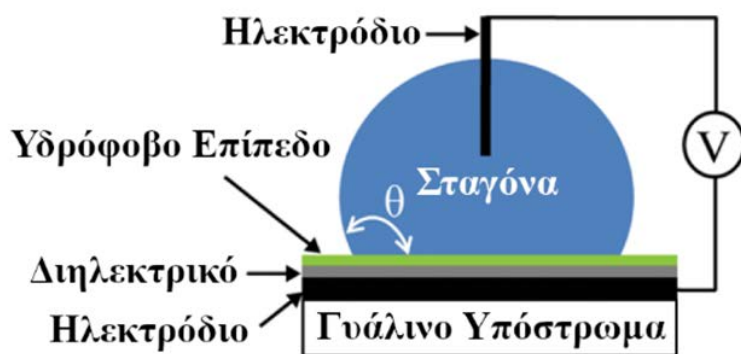
2.2 Το Φαινόμενο της Ηλεκτροδιαβροχής

Όπως προαναφέρθηκε στην εισαγωγή, όταν μία σταγόνα βρίσκεται τοποθετημένη σε ένα διηλεκτρικό υπόστρωμα και δημιουργηθεί ανάμεσα σε αυτήν και το υπόστρωμα μία διαφορά ηλεκτρικού δυναμικού, θα αναπτυχθούν ελκτικές δυνάμεις μεταξύ τους, με αποτέλεσμα η σταγόνα να απλωθεί περισσότερο στο υπόστρωμα και να μειωθεί η φαινόμενη γωνία επαφής της με αυτό. Η διαδικασία αυτή καλείται ηλεκτροδιαβροχή, καθώς μέσω της ηλεκτρικής τάσης αυξάνει τη διαβρεκτικότητα (wettability) των επιφανειών και τα αποτελέσματά της είναι εντονότερα όταν το υπόστρωμα στο οποίο βρίσκεται η σταγόνα είναι υδρόφοβο. Σε αυτήν την περίπτωση η γωνία επαφής της σταγόνας από αμβλεία γίνεται οξεία, κάτι που είναι οπτικά αντιληπτό με σχετική ευκολία. Παρακάτω παρουσιάζεται η δομή των διατάξεων ηλεκτροδιαβροχής που χρησιμοποιήθηκαν στη βιβλιογραφία, καθώς και ο τρόπος χρήσης τους.

2.2.1 Πειραματική Διάταξη και Διαδικασία Ηλεκτροδιαβροχής

2.2.1.1 Διάταξη και Διαδικασία Εφαρμογής Απλών Τετραγωνικών Ηλεκτρικών Παλμών

Η πειραματική διάταξη που χρησιμοποιήθηκε στο άρθρο της βιβλιογραφίας, με το οποίο έγινε σύγκριση των αποτελεσμάτων, αποτελείται από ένα γυάλινο υπόστρωμα από οξείδιο Ινδίου – Κασσιτέρου (ITO), πάνω στο οποίο ήταν τοποθετημένο ένα οριζόντιο ηλεκτρόδιο από βολφράμιο. Πάνω από το ηλεκτρόδιο βρισκόταν ένα διηλεκτρικό (μονωτικό) στρώμα από παρυλένιο C και στην κορυφή ένα υδρόφοβο στρώμα από Teflon. Πάνω στο υδρόφοβο στρώμα ήταν τοποθετημένη η σταγόνα (Υδατικού Διαλύματος NaCl 1mM), την οποία διέτρεχε ένα κατακόρυφο ηλεκτρόδιο (επίσης από βολφράμιο). Τα δύο ηλεκτρόδια ήταν συνδεδεμένα με τα άκρα μιας πηγής τάσης.¹



Σχήμα 12. Αναπαράσταση της πειραματικής διάταξης ηλεκτροδίων, που χρησιμοποιήθηκε για την ηλεκτροδιαβροχή σταγόνων μέσω απλών ηλεκτρικών παλμών, όπως παρουσιάζεται στη βιβλιογραφία.¹ Για την εφαρμογή ηλεκτρικής τάσης στις σταγόνες έγινε χρήση του γυάλινου (ITO) υποστρώματος (κάτω) και του κατακόρυφου βελονοειδούς ηλεκτροδίου (πάνω).

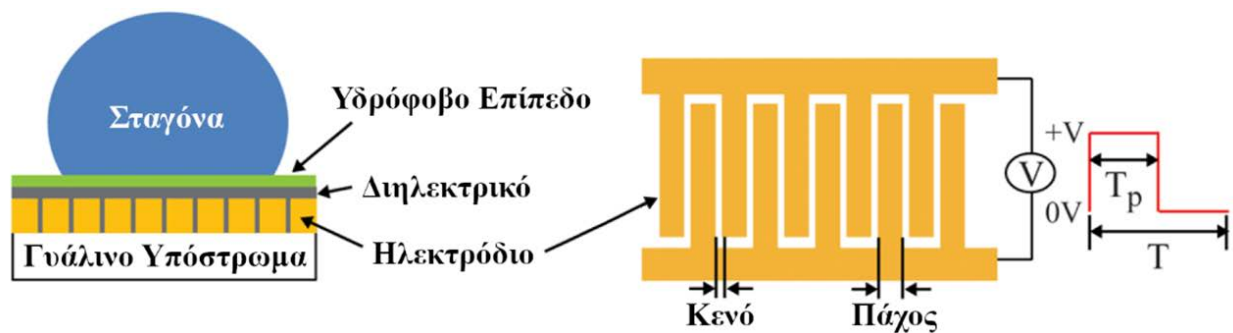
Η διάταξη αυτή χρησιμοποιήθηκε για την εφαρμογή απλών τετραγωνικών παλμών ηλεκτρικής τάσης στο σύστημα σταγόνας – υποστρώματος. Αναλυτικότερα, η πειραματική διαδικασία που ακολουθήθηκε, αρχικά περιλάμβανε την τοποθέτηση μίας σταγόνας στη διάταξη καθώς το σύστημα βρισκόταν σε ηρεμία και δεν εφαρμοζόταν σε αυτό κάποια διαφορά δυναμικού. Η σταγόνα αφηνόταν για αρκετό χρόνο σε αυτήν την κατάσταση, ώστε να ισορροπήσει πάνω στο υπόστρωμα. Ύστερα, ακολουθούσε η εφαρμογή σταθερής διαφοράς δυναμικού (εκατοντάδων V) για ένα συγκεκριμένο χρονικό διάστημα (T_p – τάξεως ms). Με αυτόν τον τρόπο προσφερόταν επιφανειακή ενέργεια στο σύστημα. Καθώς ασκείτο η ηλεκτρική

τάση, αναπτυσσόταν ηλεκτρική δύναμη στη γραμμή επαφής της σταγόνας (περιοχή συνύπαρξης 3 φάσεων), η οποία οδηγούσε σε αύξηση της διαβρεκτικότητας της επιφάνειας του υποστρώματος, άρα και σε μείωση της φαινόμενης γωνίας επαφής της σταγόνας, με αποτέλεσμα αυτή να απλώνεται ομοιόμορφα πάνω στο υπόστρωμα προς μία νέα θέση ισορροπίας. Αφού είχε απλωθεί η σταγόνα αρκετά, την κατάλληλη στιγμή – πριν αυτή προλάβει να συρρικνωθεί λόγω ταλάντωσης – η ηλεκτρική τάση αναιρείτο, με αποτέλεσμα η γωνία επαφής της να επανέρχεται στην αρχική της τιμή και η σταγόνα να επιταχύνεται προς την αρχική της θέση ισορροπίας. Μετά τη διέλευση της σταγόνας από τη θέση ισορροπίας της, αυτή συνέχιζε να κινείται μέχρι το ανώτατο σημείο ταλάντωσης της. Εφ' όσον η ενέργεια που της είχε δοθεί ήταν αρκετή, η σταγόνα αποκολλάτο από το υπόστρωμα. Η παραπάνω διαδικασία ακολουθήθηκε πολυάριθμες φορές για τη μελέτη της αναπήδησης σταγόνων διαφορετικού όγκου. Η τιμή της ασκούμενης διαφοράς δυναμικού, καθώς και του χρόνου άσκησης του ηλεκτρικού παλμού επιλέχθηκε ειδικά για κάθε σταγόνα, ώστε να οδηγεί στη βέλτιστη αναπήδηση.¹

2.2.1.2 Διάταξη και Διαδικασία Εφαρμογής Διπλών Τετραγωνικών Ηλεκτρικών Παλμών

Εκτός από την ηλεκτροδιαβροχή σταγόνων μέσω απλών τετραγωνικών ηλεκτρικών παλμών, έγινε και η χρήση διπλών τετραγωνικών ηλεκτρικών παλμών.

Για την εφαρμογή διπλών ηλεκτρικών παλμών στις σταγόνες επιστρατεύθηκε μια ελαφρώς διαφορετική διάταξη. Αντί για το κατακόρυφο ηλεκτρόδιο εντός της σταγόνας και το συμβατικό οριζόντιο στο υπόστρωμα, χρησιμοποιήθηκε ένα ζεύγος ηλεκτροδίων εντός του υποστρώματος με σχήμα τσατσάρας, κατασκευασμένων από μείγμα αλουμινίου, γυαλιού και φωτοευαίσθητων (photoresist) υλικών. Τα ηλεκτρόδια ήταν συνδεδεμένα με τους αντίθετους πόλους μιας πηγής τάσης. Αναπτύσσοντας διαφορά δυναμικού ανάμεσα στα δύο ηλεκτρόδια, η σταγόνα πολώνεται, αισθανόμενη ένα ενδιάμεσο ισοδύναμο δυναμικό μέσω χωρητικής ζεύξης, και απλώνεται στο υπόστρωμα. Με αυτόν τον τρόπο αποφεύχθηκε η χρήση του κατακόρυφου ηλεκτροδίου εντός της σταγόνας, που μπορεί να επηρεάσει το άλμα της.^{1,19}



Σχήμα 13. Απεικόνιση της πειραματικής διάταξης της βιβλιογραφίας, που χρησιμοποιήθηκε για την ηλεκτροδιαβροχή σταγόνων, μέσω διπλών ηλεκτρικών παλμών.¹ Ένα ζεύγος ηλεκτροδίων σχήματος τσατσάρας, ενσωματωμένο στο υπόστρωμα, χρησιμοποιήθηκε για την εφαρμογή διαφοράς δυναμικού στις σταγόνες, χωρίς την εισαγωγή κατακόρυφου ηλεκτροδίου. Αποτυπώνεται σχηματικά και ο τετράγωνος ηλεκτρικός παλμός με πλάτος τάσης $+V$, χρονική διάρκεια T_p και περίοδο επαναεφαρμογής T .

Στους διπλούς παλμούς, όπως και στους απλούς, εφαρμόστηκε στο σύστημα ηλεκτροδίων σταθερή ηλεκτρική τάση για ένα χρονικό διάστημα (T_p), ώστε να απλωθούν οι σταγόνες στο υπόστρωμα, η οποία μετά αναιρέθηκε προκειμένου οι σταγόνες να αρχίσουν να μαζεύονται. Όμως, μετά από ένα χρονικό διάστημα (περίοδος επαναεφαρμογής του παλμού – T) όπου οι σταγόνες βρίσκονταν στο ανώτατο σημείο ταλάντωσής τους (χωρίς να έχουν αποκολληθεί από το υπόστρωμα), ασκήθηκε ξανά σε αυτές ηλεκτρική τάση με τα ίδια χαρακτηριστικά και για ίδιο χρόνο (T_p), απλώνοντας ξανά τις σταγόνες πάνω στο υπόστρωμα, της οποίας η εφαρμογή μετά σταμάτησε, έτσι ώστε οι σταγόνες να επιταχυνθούν προς τα πάνω και να εκτελέσουν το άλμα τους.

2.2.2 Εξίσωση Lippmann και Αριθμός Ηλεκτροδιαβροχής

Η νέα φαινόμενη γωνία επαφής, που αποκτούν οι σταγόνες μετά την επιβολή ηλεκτρικής τάσης στη διάταξη ηλεκτροδιαβροχής, μπορεί να εκτιμηθεί μέσω της εξίσωσης Lippmann.²⁰ Η εξίσωση αυτή συνδέει την εφαρμοζόμενη διαφορά δυναμικού με τη μεταβολή του συνημιτόνου της γωνίας επαφής μιας σταγόνας.

$$\cos \theta_a = \cos \theta_Y + \frac{\epsilon_0 \epsilon_r V^2}{2 d \gamma_{LA}} \quad (9)$$

Όπου θ_a η φαινόμενη γωνία επαφής μεταξύ της σταγόνας και της επιφάνειας του υποστρώματος κατά την εφαρμογή του ηλεκτρικού παλμού, θ_Y η γωνία επαφής Young μεταξύ της σταγόνας και της επιφάνειας του υποστρώματος απουσία του ηλεκτρικού πεδίου (εδώ ίση προς 116°), V η εφαρμοζόμενη διαφορά δυναμικού ανάμεσα στη σταγόνα και το ηλεκτρόδιο που βρίσκεται κάτω από την επιφάνεια με την οποία έρχεται σε επαφή η σταγόνα, d το πάχος του διηλεκτρικού στρώματος που βρίσκεται κάτω από τη σταγόνα (ίσο προς $5 \mu\text{m}$), ϵ_0 η ηλεκτρική διαπερατότητα του κενού (ίση προς $8.854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$), ϵ_r η διηλεκτρική σταθερά του στερεού κάτω από τη σταγόνα (ίση προς 3.14) και γ_{LA} η επιφανειακή τάση της σταγόνας (διεπιφανειακή τάση υγρού-αερίου, ίση προς 0.072 N/m).¹

Για την ευκολότερη μελέτη του φαινομένου της ηλεκτροδιαβροχής έχει οριστεί και ο αριθμός ηλεκτροδιαβροχής (η – electowetting number), ο οποίος αποτελεί τον τελευταίο όρο της εξίσωσης Lippmann, που εξαρτάται από την ασκούμενη διαφορά δυναμικού, την επιφανειακή τάση και ορισμένα χαρακτηριστικά του υποστρώματος και αποτελεί καλό μέτρο για την επίδραση της ηλεκτροδιαβροχής στη μεταβολή της γωνίας επαφής μιας σταγόνας. Ο αριθμός ηλεκτροδιαβροχής ορίζεται ως εξής:

$$\eta = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r V^2}{2 d \gamma_{LA}} \quad (10)$$

Μέσω αυτού, η εξίσωση Lippmann παίρνει τελικά την ακόλουθη μορφή:

$$\cos \theta_a = \cos \theta_Y + \eta \quad (11)$$

Στην περίπτωση των απλών παλμών των πειραμάτων της βιβλιογραφίας, τα οποία πραγματοποιήθηκαν στη συμβατική διάταξη με το κατακόρυφο βελονοειδές ηλεκτρόδιο, μπορεί να εισαχθεί η τάση της πηγής στην εξίσωση Lirrmann και να ληφθεί η μεταβολή του συνημιτόνου της γωνίας επαφής της σταγόνας, που πραγματοποιήθηκε μέσω ηλεκτροδιαβροχής.

Δεν μπορεί όμως να ακολουθηθεί η ίδια υπολογιστική διαδικασία για τα σενάρια των διπλών παλμών, καθώς η διάταξη με τα συζευγμένα ηλεκτρόδια εντός του υποστρώματος, που χρησιμοποιήθηκε, είχε ως αποτέλεσμα η σταγόνα να «αισθάνεται» χαμηλότερη τάση από αυτήν της πηγής και να αλληλεπιδρά με το υπόστρωμα λιγότερο σε σχέση με τη διάταξη του κατακόρυφου ηλεκτροδίου (για την ίδια ασκούμενη τάση από την πηγή). Επομένως, ο αριθμός ηλεκτροδιαβροχής και κατ' επέκταση η μεταβολή στο συνημίτονο της γωνίας επαφής της σταγόνας αντιστοιχούν σε μικρότερη διαφορά δυναμικού από αυτήν που ασκούσε η πηγή.

2.3 Μαθηματική Μοντελοποίηση του Προβλήματος

2.3.1 Διατήρηση Ορμής και Μάζας

Οι σημαντικότερες εξισώσεις που χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση της ρευστομηχανικής συμπεριφοράς των σταγόνων είναι οι εξισώσεις Navier – Stokes, οι οποίες περιγράφουν τη διατήρηση της ορμής και της μάζας.^{13,16}

Οι εξισώσεις αυτές αναγράφονται ακόλουθα:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{G} \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (12)$$

Όπου ρ είναι η πυκνότητα της σταγόνας, \mathbf{u} το διάνυσμα της ταχύτητας ενός σημείου εντός της σταγόνας, t ο χρόνος, P η πίεση σε ένα σημείο της σταγόνας, μ το δυναμικό ιξώδες και \mathbf{G} το διάνυσμα της βαρύτητας ανά μονάδα όγκου της σταγόνας, που ασκείται σε κάθε σημείο της και είναι ίσο με $\mathbf{G} = \rho \mathbf{g}$, όπου \mathbf{g} το διάνυσμα επιτάχυνσης της βαρύτητας με μέτρο $|\mathbf{g}| = 9.81 \text{ m/s}^2$.

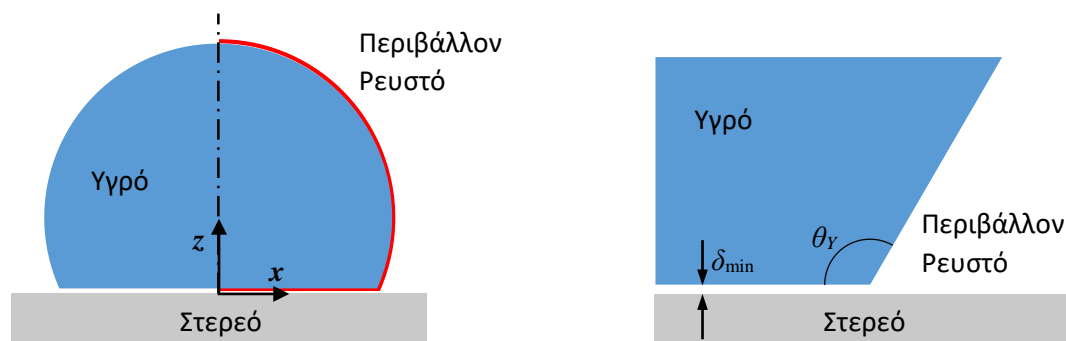
2.3.2 Τροποίηση της Εξίσωσης Young – Laplace

2.3.2.1 Εισαγωγή Αλληλεπίδρασης Υγρού – Στερεού και Μοντέλο Πίεσης Αποσύνδεσης

Χρησιμοποιώντας την εξίσωση Young – Laplace για τον υπολογισμό της διαφοράς πίεσης που αναπτύσσεται ανάμεσα σε κάποιο σημείο εντός της σταγόνας και του περιβάλλοντος μέσου, μπορούμε να εισαγάγουμε έναν επιπλέον όρο για την περιγραφή των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των σταγόνων και του στερεού υποστρώματος, η οποία επηρεάζει την αναπτυσσόμενη διαφορά πίεσης. Χρησιμοποιώντας το μοντέλο που αναπτύχθηκε από τον Δρ. Νικόλαο Χαμάκο, μπορούμε να εισαγάγουμε τον όρο αλληλεπίδρασης υγρού – στερεού ως μία επιπλέον πίεση, την λεγόμενη «πίεση αποσύνδεσης» (P_{LS} – disjoining pressure) και η εξίσωση Young-Laplace λαμβάνει την εξής μορφή:

$$\Delta P = \gamma_{LA} C + P_{LS} \quad (13)$$

Η εισαγωγή του παραπάνω όρου βασίζεται στην υπόθεση ότι αναπτύσσεται ένα λεπτό στρώμα αέρα ανάμεσα στη σταγόνα και το στερεό υπόστρωμα, επεκτείνοντας την γραμμή επαφής τριών φάσεων (TPL) σε ολόκληρη την επιφάνεια της σταγόνας.¹³



Σχήμα 14. Ισορροπία μίας σταγόνας πάνω από στερεό υπόστρωμα, σύμφωνα με την τροποποιημένη εξίσωση Young - Laplace. Η γραμμή επαφής τριών φάσεων (TPL) επισημαίνεται με κόκκινο χρώμα και εκτείνεται σε ολόκληρη την επιφάνεια της σταγόνας. Δεξιά απεικονίζεται η σταγόνα σε μεγέθυνση, όπου φαίνονται η γωνία επαφής της (θ_Y – Γωνία Young) με το στερεό και το πάχος

(δ_{\min}) του αερίου στρώματος που παρεμβάλλεται μεταξύ της σταγόνας και του στερεού υποστρώματος, υπό την επίδραση της πίεσης αποσύνδεσης (P_{LS}).

Η χρήση της πίεσης αποσύνδεσης στην εξίσωση Young – Laplace προσομοιώνει αρκετά καλά τις αλληλεπιδράσεις στερεού – υγρού, χωρίς να έχει πολύ μεγάλες υπολογιστικές απαιτήσεις, όπως οι μοριακές προσομοιώσεις ή οι μεσοσκοπικές προσομοιώσεις τύπου Lattice-Boltzmann. Επίσης, δεν εμφανίζει ορισμένους περιορισμούς άλλων μακροσκοπικών μεθόδων συνεχούς μέσου και, σε αντίθεση με αυτές, έχει τη δυνατότητα προσομοίωσης τραχειών στερεών επιφανειών με μεγάλο αριθμό περιπλοκότητας.^{13,21}

Η έννοια της πίεσης αποσύνδεσης (Disjoining Pressure) χρησιμοποιήθηκε για πρώτη φορά το 1936 από τον Derjaguin για να περιγράψει τις μοριακές αλληλεπιδράσεις μεταξύ επιφανειών. Συγκεκριμένα, ο Derjaguin, μέσω της πίεσης αποσύνδεσης P_{LS} , εξέφρασε την αύξηση της πίεσης που παρατηρείται σε ένα ρευστό ανάμεσα σε δύο πολύ κοντινές μεταξύ τους παράλληλες πλάκες από στερεό υλικό, όταν αυτές τοποθετηθούν μέσα στο ρευστό, σε σχέση με την πίεση που επικρατεί στον κύριο όγκο του ρευστού (bulk pressure). Η αυξημένη αυτή πίεση οφείλεται στις διαμοριακές αλληλεπιδράσεις μεταξύ του στερεού και του ρευστού (van der Waals, ηλεκτροστατικές δυνάμεις, δυνάμεις διασποράς).^{13,21}

Για την εκτίμηση του όρου της πίεσης αποσύνδεσης της τροποποιημένης εξίσωσης Young – Laplace χρησιμοποιήθηκε ένα μαθηματικό μοντέλο πολύ παρόμοιο με αυτό του δυναμικού Lennard – Jones, το οποίο αποτελείται από έναν μικρής εμβέλειας απωστικό όρο και έναν μεγάλης εμβέλειας ελκτικό όρο. Το μοντέλο αυτό εκφράζεται μέσω της ακόλουθης σχέσης:

$$\frac{R_0}{\gamma_{LA}} P_{LS} = w^{LS} \left[\left(\frac{\sigma}{\delta / R_0 + \varepsilon} \right)^{C_1} - \left(\frac{\sigma}{\delta / R_0 + \varepsilon} \right)^{C_2} \right] \quad (14)$$

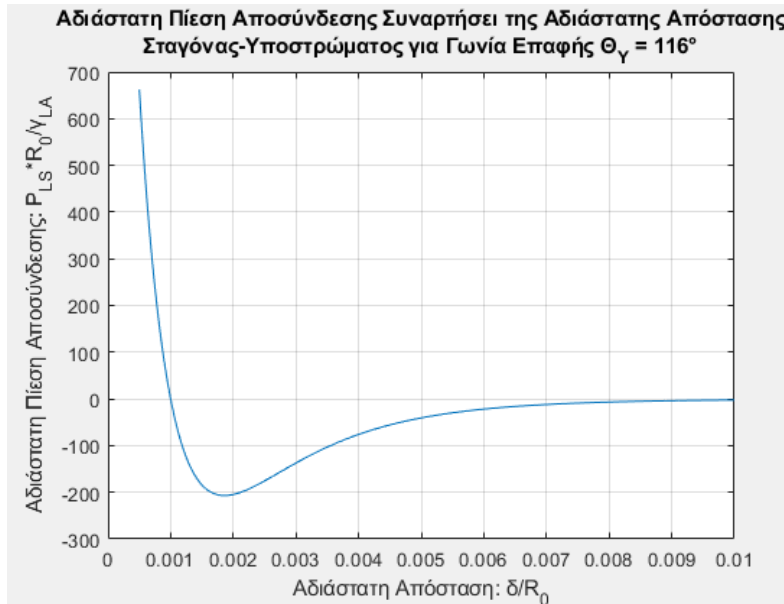
Ο όρος w^{LS} στην παραπάνω εξίσωση εκφράζει το βάθος του δυναμικού και έχει συσχετιστεί με την γωνία επαφής της σταγόνας ως εξής: $w^{LS} = \frac{(C_1 - 1)(C_2 - 1)(1 + \cos \theta_Y)}{\sigma(C_1 - C_2)}$.¹³

Με R_0 συμβολίζεται η χαρακτηριστική ακτίνα της σταγόνας. Οι εκθέτες C_1 και C_2 είναι παράμετροι που προσδιορίζουν την εμβέλεια της απωστικής και ελκτικής περιοχής του δυναμικού, το δ είναι η απόσταση ενός σημείου της σταγόνας από το στερεό υπόστρωμα (πάχος παρεμβαλλόμενου αερίου στρώματος), ενώ τα σ και ε είναι επιπλέον παράμετροι που ελέγχουν τη μορφή του δυναμικού, των οποίων η διαφορά καθορίζει την ελάχιστη δυνατή αδιάστατη απόσταση σταγόνας – υποστρώματος, που μπορεί να εμφανιστεί: $\delta_{\min} = R_0 (\sigma - \varepsilon)$.¹³

Μετά από προσαρμογή των τεσσάρων παραμέτρων (C_1 , C_2 , σ , ε) σε δεδομένα για τις σταγόνες, οι τιμές που χρησιμοποιούνται για την αλληλεπίδραση των σταγόνων με τα στερεά υποστρώματα είναι: $C_1 = 12$, $C_2 = 10$, $\sigma = 0.009$, $\varepsilon = 0.008$.²¹

Μέσω των παραπάνω εξισώσεων και για δεδομένες τις τιμές των τεσσάρων παραμέτρων ($C_1, C_2, \sigma, \varepsilon$), της διεπιφανειακής τάσης υγρού – αερίου (γ_{LA}), της μέσης ακτίνας της σταγόνας (R_0) και της γωνίας επαφής της (θ_Y), είναι δυνατός ο υπολογισμός της πίεσης αποσύνδεσης σε οποιοδήποτε σημείο της επιφάνειας της σταγόνας ως συνάρτηση της απόστασής του (δ) από το υπόστρωμα: $P_{LS} = f(\delta)$.

Ακολουθεί γραφική παράσταση της αδιάστατης πίεσης αποσύνδεσης συναρτήσει της αδιάστατης απόστασης σταγόνας – υποστρώματος.



Σχήμα 15. Γραφική παράσταση του αδιάστατου όρου πίεσης αποσύνδεσης, που εισέρχεται στην εξίσωση Young – Laplace, συναρτήσει της αδιάστατης απόστασης σταγόνας-υποστρώματος, για γωνία επαφής 116° , σύμφωνα με το μοντέλο τύπου Lennard – Jones και τις τιμές των παραμέτρων που προαναφέρθηκαν ($C_1 = 12, C_2 = 10, \sigma = 0.009, \varepsilon = 0.008$).

2.3.2.2 Εισαγωγή Τάσεων Αλληλεπίδρασης Υγρού – Περιβάλλοντος Ρευστού

Εφ’ όσον στην επιφάνεια της σταγόνας ασκούνται κάθετες τάσεις από τις φάσεις του υγρού και του περιβάλλοντος ρευστού, θα επηρεάζουν και αυτές τη διαφορά πίεσης που αναπτύσσεται ανάμεσα στην επιφάνεια της σταγόνας και το περιβάλλον. Ασκούμενες τάσεις από το εσωτερικό της σταγόνας θα σηματοδοτούν την ύπαρξη μεγαλύτερης πίεσης εντός της σταγόνας, ενώ ασκούμενες τάσεις από την αέρια φάση θα σηματοδοτούν την ύπαρξη μεγαλύτερης πίεσης στο περιβάλλον ρευστό και άρα μικρότερης αυξημένης πίεσης στη σταγόνα σε σχέση με το περιβάλλον.

Οι τάσεις αυτές μπορούν να συμπεριληφθούν στην εξίσωση Young – Laplace ως εξής:

$$\tau_{nn} \Big|_{\text{ambient}} - \tau_{nn} \Big|_{\text{liquid}} + \Delta P - \gamma_{LA} C - P_{LS} = 0 \quad (16)$$

Όπου $\tau_{nn} \Big|_{\text{liquid}}$ και $\tau_{nn} \Big|_{\text{ambient}}$ τα μέτρα των κάθετων τάσεων που ασκούνται στην επιφάνεια της σταγόνας από την υγρή και την περιβάλλουσα φάση, αντίστοιχα.^{13,16}

Η παραπάνω τροποποιημένη εξίσωση Young – Laplace, χρησιμοποιείται σαν συνοριακή συνθήκη στην επιφάνεια της σταγόνας για την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων Navier – Stokes διατήρησης μάζας και ορμής.

2.3.3 Μοντελοποίηση Τριβής Μεταξύ Σταγόνας και Στερεού Υποστρώματος

Εκτός από τις κάθετες τάσεις που ασκούνται στην επιφάνεια μίας σταγόνας και τις διαμοριακές αλληλεπιδράσεις της σταγόνας με το υπόστρωμα, οι οποίες περιγράφονται μέσω της πίεσης αποσύνδεσης, πρέπει να ληφθεί υπόψιν και η παρουσία της τριβής που αναπτύσσεται μεταξύ της σταγόνας και του υποστρώματος. Η τριβή ασκείται από το στερεό υπόστρωμα στην επιφάνεια της σταγόνας υπό τη μορφή διατμητικής τάσης και το μέγεθός της εξαρτάται από την τραχύτητα της επιφάνειας του υποστρώματος. Ακόμα και σε μία λεία επιφάνεια χωρίς ατέλειες, η τραχύτητα δεν είναι μηδενική, καθώς εμφανίζονται μικροσκοπικές ανωμαλίες διαστάσεων νανομέτρων, οι οποίες οφείλονται στη χωρική διάταξη των μορίων που απαρτίζουν την επιφάνεια.

Επειδή η προσομοίωση της γεωμετρίας του υποστρώματος σε επίπεδο νανομέτρων θα οδηγούσε σε μία πολύ χρονοβόρα και υπολογιστικά απαιτητική διαδικασία επίλυσης των προαναφερθέντων διαφορικών εξισώσεων, δεν αποτελεί καλή λύση για την μελέτη της συμπεριφοράς των σταγόνων. Άλλωστε, στη νανοκλίμακα δεν εφαρμόζεται η υπόθεση του συνεχούς μέσου. Για τον λόγο αυτό, έχει αναπτυχθεί από την ερευνητική ομάδα του καθηγητή Α. Παπαθανασίου ένα μαθηματικό μοντέλο που περιγράφει μακροσκοπικά την αναπτυσσόμενη τριβή ανάμεσα σε μία σταγόνα και το υπόστρωμα που βρίσκεται κάτω από αυτήν.^{13,15} Το μοντέλο αυτό έρχεται σε μεγάλη συμφωνία με την πραγματική συμπεριφορά των σταγόνων και καταφέρνει να περιγράψει την υστέρηση της γωνίας επαφής που μπορεί να προκύψει σε μία σταγόνα. Επομένως, έχει τη δυνατότητα να περιγράψει επιτυχώς την αναπτυσσόμενη τριβή σε σταγόνες που κινούνται πάνω σε στερεά υποστρώματα, ακόμα και όταν τα τελευταία είναι κεκλιμένα.

Σε αυτό το μοντέλο, η αναπτυσσόμενη τάση της τριβής που ασκείται από ένα στερεό υπόστρωμα σε κάποιο σημείο της επιφάνειας μιας σταγόνας, είναι ανάλογη με την παράλληλη προς την επιφάνεια της σταγόνας συνιστώσα της ταχύτητας του σημείου. Δηλαδή:

$$\tau_{nt}|_{\text{friction}} = \beta_{\text{eff}} (\mathbf{t} \cdot \mathbf{u}) \quad (17)$$

Όπου $\tau_{nt}|_{\text{friction}}$ η ασκούμενη στη σταγόνα διατμητική τάση της τριβής, β_{eff} συντελεστής αναλογίας μεταξύ τριβής και ταχύτητας, \mathbf{t} το παράλληλο προς την επιφάνεια της σταγόνας μοναδιαίο διάνυσμα και \mathbf{u} το διάνυσμα της ταχύτητας του σημείου της σταγόνας που εξετάζεται.

Ο συντελεστής τριβής β_{eff} που συσχετίζει την τριβή με την ταχύτητα της σταγόνας, εξαρτάται από την απόσταση μεταξύ του εξεταζόμενου σημείου της σταγόνας και του υποστρώματος, σύμφωνα με την ακόλουθη σχέση:

$$\beta_{\text{eff}} = \beta_{\text{SL}} \frac{\mu}{R_0} \left(1 - \tanh \left[p_{\text{trs}} \left(\frac{\delta}{\delta_{\text{min}}} - 1 \right) \right] \right) \quad (18)$$

Όπου τα β_{SL} και p_{trs} είναι παράμετροι που ελέγχουν αντίστοιχα το μέγεθος της τριβής και την ένταση της εξάρτησής της από την απόσταση σταγόνας – υποστρώματος.

Η συνάρτηση της υπερβολικής εφαπτομένης ($\tanh(x) = (e^{2x}-1)/(e^{2x}+1)$), για $x = 0$ λαμβάνει την τιμή 0, για $x > 0$ μεταβαίνει απότομα στην τιμή 1, ενώ για $x < 0$ πέφτει απότομα στην τιμή -1 . Η μορφή της μοιάζει πολύ με βηματική συνάρτηση (step function) που, στο $x = 0$, αλλάζει τιμή από -1 σε 1.

Έτσι, η παράμετρος β_{eff} για απόσταση σταγόνας – υποστρώματος ίση με $\delta \simeq \delta_{\text{min}}$ λαμβάνει την τιμή

$$\beta_{\text{eff}} = \beta_{\text{SL}} \frac{\mu}{R_0}, \text{ για } \delta < \delta_{\text{min}} \text{ μεταβαίνει στην τιμή } \beta_{\text{eff}} = 2\beta_{\text{SL}} \frac{\mu}{R_0}, \text{ ενώ για } \delta > \delta_{\text{min}} \text{ μεταβαίνει στην τιμή } \beta_{\text{eff}} = 0.$$

Οπότε, η εξίσωση για τον προσδιορισμό της τριβής μπορεί να εφαρμοστεί σαν συνοριακή συνθήκη σε ολόκληρη την επιφάνεια μιας σταγόνας. Στα σημεία που δεν έρχονται σε επαφή με το υπόστρωμα, επειδή η απόστασή τους από αυτό είναι πολύ μεγάλη, η υπολογιζόμενη τριβή λαμβάνει πρακτικά μηδενική τιμή. Με αυτόν τον τρόπο είναι δυνατή η προσομοίωση της τριβής ακόμα και όταν οι επιφάνειες της σταγόνας ή του υποστρώματος δεν είναι ομαλές, σχηματίζοντας περίπλοκες γραμμές επαφής.

Σε αυτήν την εργασία, για την προσομοίωση σταγόνων νερού χρησιμοποιήθηκαν οι τιμές παραμέτρων $\beta_{\text{SL}} = 1000$ και $p_{\text{vis}} = 5$, που, σε σύγκριση με πειραματικά δεδομένα, έχει βρεθεί ότι αναπαριστούν καλά την πραγματικότητα.^{13,15}

2.4 Υπολογιστική Ανάλυση

Για την προσομοίωση του φαινομένου αναπήδησης των σταγόνων μέσω ηλεκτροδιαβροχής και την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν η φυσική του προβλήματος χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό COMSOL Multiphysics®. Το λογισμικό αυτό επιλύει αριθμητικά διαφορικές εξισώσεις μέσω της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων. Επίσης, διαθέτει έτοιμα ορισμένα μαθηματικά μοντέλα και εξισώσεις που βοηθούν στην προσομοίωση και μελέτη ποικίλων προβλημάτων φυσικής.

Η διαδικασία που ακολουθήθηκε για τη συγκεκριμένη εργασία περιγράφεται ακόλουθα.

Αρχικά, από το μενού του προγράμματος επιλέχθηκε η χρήση κυλινδρικών συντεταγμένων, μέσω κατάστρωσης του προβλήματος στις δύο διαστάσεις με αξονική συμμετρία (2D Axisymmetric). Από τα διαθέσιμα μοντέλα φυσικής επιλέχθηκε η στρωτή ροή δύο φάσεων ρευστού με κινούμενο πλέγμα (Laminar Two-Phase Flow, Moving Mesh). Το πρόβλημα επιλέχθηκε να μελετηθεί υπό μεταβατικές συνθήκες (Time Dependent).

Στη συνέχεια έγινε εισαγωγή ως παραμέτρων, των απαιτούμενων φυσικών ιδιοτήτων του νερού, από το οποίο αποτελείτο η σταγόνα που προσομοιώθηκε. Χρησιμοποιήθηκαν οι τιμές: πυκνότητας $\rho = 998 \text{ kg/m}^3$, δυναμικού ιξώδους $\mu = 1.005 \text{ mPa}\cdot\text{s}$ και επιφανειακής τάσης $\gamma_{LA} = 0.073 \text{ N/m}$. Επίσης, εισήχθησαν οι παράμετροι $C_1 = 12$, $C_2 = 10$, $\sigma = 0.009$, $\varepsilon = 0.008$ που καθορίζουν την πίεση αποσύνδεσης και οι $\beta_{SL} = 1000$, $p_{\text{res}} = 5$ που χρησιμοποιούνται στον υπολογισμό της τριβής. Ακόμα, έγινε εισαγωγή της γωνίας επαφής Young, $\theta = 116^\circ$ που σχηματίζουν οι σταγόνες με το υλικό του υποστρώματος, της ονομαστικής ακτίνας R_0 κάθε σταγόνας καθώς και της τροποποιημένης γωνίας επαφής θ_2 που αποκτούν οι σταγόνες μετά την επιβολή της ηλεκτρικής τάσης σε κάθε προσομοιούμενο σενάριο.¹ Οι τροποποιημένες γωνίες επαφής υπολογίστηκαν με βάση τους αριθμούς ηλεκτροδιαβροχής και τις ηλεκτρικές τάσεις που αναγράφονται στη βιβλιογραφία, μέσω της εξίσωσης Lippmann και του ορισμού του αριθμού ηλεκτροδιαβροχής.¹

Ορισμένες βοηθητικές μεταβλητές, όπως ο όγκος των σταγόνων ($V = 4/3 \pi R_0^3$) ή η ελάχιστη αδιάστατη απόσταση σταγόνας – υποστρώματος ($d_{\text{min}} = \sigma - \varepsilon$) υπολογίστηκαν συναρτήσει των παραμέτρων που μόλις περιγράψαμε.

Έπειτα, όσον αφορά τη γεωμετρία του προβλήματος, η σταγόνα στην αρχική της κατάσταση σχεδιάστηκε ως ένα ημικύκλιο κατά μήκος του άξονα z με ακτίνα R_0 , που το κέντρο του βρισκόταν σε ύψος $(1+d_{\text{min}})R_0$ και άρα το κατώτατο σημείο του βρισκόταν στο ελάχιστο δυνατό ύψος. Βάσει της γεωμετρίας χτίστηκε το πλέγμα (Mesh), στο οποίο η σταγόνα χωρίστηκε σε πάρα πολλά μικρά τρίγωνα, τα οποία ρυθμίστηκαν έτσι ώστε να γίνονται πιο μικρά και πυκνά κοντά στην επιφάνεια της σταγόνας. Το λογισμικό υπολογίζει αυτόματα την ποιότητα του πλέγματος, ένα μέγεθος που περιγράφει την ομοιομορφία του πλέγματος. Η ποιότητα των στοιχείων του πλέγματος είναι μία αδιάστατη ποσότητα με τιμές μεταξύ 0 και 1, όπου το 1 αναπαριστά ένα απόλυτα κανονικό στοιχείο (π.χ. ισόπλευρο τρίγωνο) και το 0 αναπαριστά ένα εκφυλισμένο στοιχείο (π.χ. τρίγωνο που έχει εκφυλιστεί σε ευθύγραμμο τμήμα).²² Στο τμήμα της ανάλυσης των αποτελεσμάτων της εργασίας, ως κατώτερη αποδεκτή ποιότητα πλέγματος αναφέρεται η ελάχιστη ποιότητα που εμφανίζεται σε ολόκληρο το πλέγμα, δηλαδή η ποιότητα του χειρότερου στοιχείου (π.χ. τριγώνου). Μέσω της λειτουργίας του κινούμενου πλέγματος που χρησιμοποιείται (Moving Mesh), το πλέγμα έχει την ικανότητα να ακολουθεί το σχήμα της σταγόνας, καθώς αυτή

παραμορφώνεται. Στην περίπτωση που η ποιότητα του πλέγματος πέσει κάτω από ένα κατώτατο όριο, το πλέγμα ανακατασκευάζεται αυτόματα (Remeshing).

Περνώντας στο κομμάτι των εξισώσεων του προβλήματος, για την περιγραφή της συμπεριφοράς ολόκληρου του όγκου της σταγόνας (Domain), χρησιμοποιήθηκαν οι εξισώσεις Navier – Stokes, οι οποίες συνδέθηκαν με τις τιμές των παραμέτρων ιξώδους και πυκνότητας που είχαν εισαχθεί (Fluid Properties). Επίσης, εφαρμόστηκε η βαρύτητα ως σωματική δύναμη ανά μονάδα όγκου (Volume Force) και εισήχθη σαν αρχική συνθήκη (Initial Value) μηδενική ταχύτητα σε όλα τα σημεία της σταγόνας. Στην εξωτερική επιφάνεια της σταγόνας εφαρμόστηκε σαν συνοριακή συνθήκη η τροποποιημένη εξίσωση Young – Laplace (External Fluid Interface), βασιζόμενη στις τιμές της επιφανειακής τάσης και τις παραμέτρους για την πίεση αλληλεπίδρασης που είχαν εισαχθεί. Ακόμα, εφαρμόστηκε σαν συνοριακή συνθήκη η δύναμη της τριβής της σταγόνας με το υπόστρωμα (Friction).

Έχοντας εισαγάγει πλήρως όλα τα απαραίτητα στοιχεία, πραγματοποιήθηκε μία πρώτη προσομοίωση, όπου κάθε σταγόνα αφέθηκε για αρκετό χρόνο να ισορροπήσει και να ηρεμήσει πάνω στο υπόστρωμα, σχηματίζοντας με αυτό τη γωνία επαφής Young που είχε οριστεί (116°). Στη συνέχεια πραγματοποιήθηκε δεύτερη προσομοίωση, όπου αρχίζοντας από την κατάσταση των σταγόνων κατά το τέλος της πρώτης προσομοίωσης, εφαρμόστηκε στο σύστημα η τροποποιημένη γωνία επαφής, μέσω χρονικά εξαρτημένης μεταβλητής, για την προσομοίωση της ηλεκτροδιαβροχής. Μετά το πέρασμα χρονικού διαστήματος ίσου με τη διάρκεια του κάθε παλμού, η εφαρμοζόμενη γωνία επαφής έλαβε την αρχική τιμή της γωνίας Young (116°). Στις περιπτώσεις των διπλών παλμών, η χρονοεξαρτώμενη μεταβλητή έλαβε ξανά την τιμή της τροποποιημένης γωνίας επαφής, μετά τη διέλευση χρονικού διαστήματος από την αρχή της προσομοίωσης, ίσου με την περίοδο του κάθε παλμού, ενώ στο τέλος επανήλθε για άλλη μία φορά στην τιμή της αρχικής γωνίας Young.

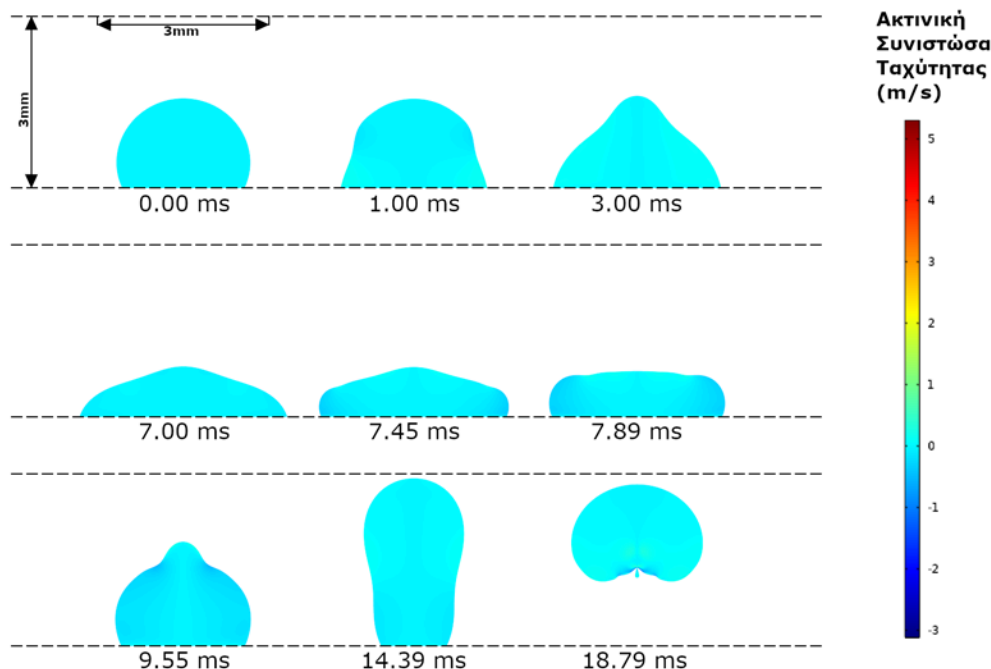
Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις εισήχθησαν στη συνέχεια στο λογισμικό MATLAB® για περαιτέρω ανάλυση και επεξεργασία.

Κεφάλαιο 3: Προσομοίωση Αναπήδησης και Απεικόνιση Σταγόνας Όγκου 5 μL

Σε πρώτο στάδιο έγινε προσομοίωση αναπήδησης σταγόνας νερού όγκου 5μL, όπου ανάμεσα στη σταγόνα και την επιφάνεια κάτω από αυτήν εφαρμόστηκε ηλεκτρικός παλμός διαφοράς δυναμικού 135V (που αντιστοιχεί σε αριθμό ηλεκτροδιαβροχής 0.704) για χρόνο 7ms. Ακολούθησαν προσομοιώσεις αναπήδησης της ίδιας σταγόνας μέσω ηλεκτρικών παλμών με αριθμό ηλεκτροδιαβροχής $\eta = 0.79$ και διάρκεια 10.5 και 3.5 ms αντίστοιχα. Τέλος, ανάμεσα στη συγκεκριμένη σταγόνα και το υπόστρωμα, προσομοιώθηκε η εφαρμογή διπλού ηλεκτρικού παλμού με αριθμό ηλεκτροδιαβροχής $\eta = 0.9$, με διάρκεια κάθε απλού παλμού 7ms και περίοδο (χρόνο ανάμεσα στην έναρξη κάθε απλού παλμού) 16ms. Τα στιγμιότυπα απεικόνισης της θέσης και του σχήματος της σταγόνας συναρτήσει του χρόνου, που προέκυψαν από την προσομοίωση, συγκρίθηκαν με τα αντίστοιχα που αναγράφονται στη βιβλιογραφία.¹ Από εκ των υστέρων επεξεργασία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης υπολογίστηκε και η θέση του κέντρου μάζας των σταγόνων συναρτήσει του χρόνου.

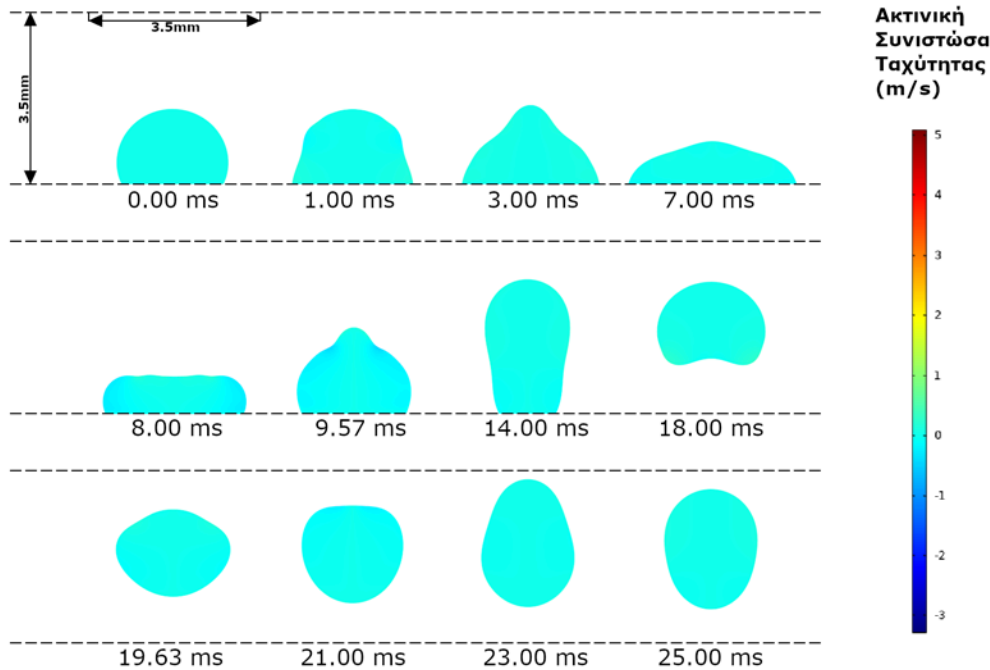
3.1 Εφαρμογή απλού ηλεκτρικού παλμού τάσης 135V και διάρκειας 7ms

Ξεκινώντας με την αναπήδηση της σταγόνας 5μL με απλό παλμό 135V για 7ms, καταγράφονται τα στιγμιότυπα του σχήματος, της ταχύτητας και της θέσης της σταγόνας, που προκύπτουν από την προσομοίωση, σε ορισμένες χρονικές στιγμές, για να πραγματοποιηθεί σύγκριση με τα σχήματα που παρουσιάζονται στη βιβλιογραφία.



Σχήμα 16. Στιγμιότυπα της σταγόνας νερού όγκου 5μL που προέκυψαν από προσομοίωση με το λογισμικό COMSOL, όπου αυτή αναπηδά υπό την επίδραση ηλεκτρικού παλμού τάσης 135V και διάρκειας 7ms. Είναι εμφανές το σχήμα και η θέση της σταγόνας σε σχέση με το υπόστρωμα κάτω από αυτήν, σε καθέναν από τους χρόνους που αναγράφονται. Η διατομή της σταγόνας είναι χρωματισμένη με τέτοιο τρόπο ώστε να καταγράφεται και η ακτινική συνιστώσα της ταχύτητας του ρευστού που την αποτελεί συναρτήσει του χώρου, σύμφωνα με την κλίμακα που φαίνεται στα δεξιά.

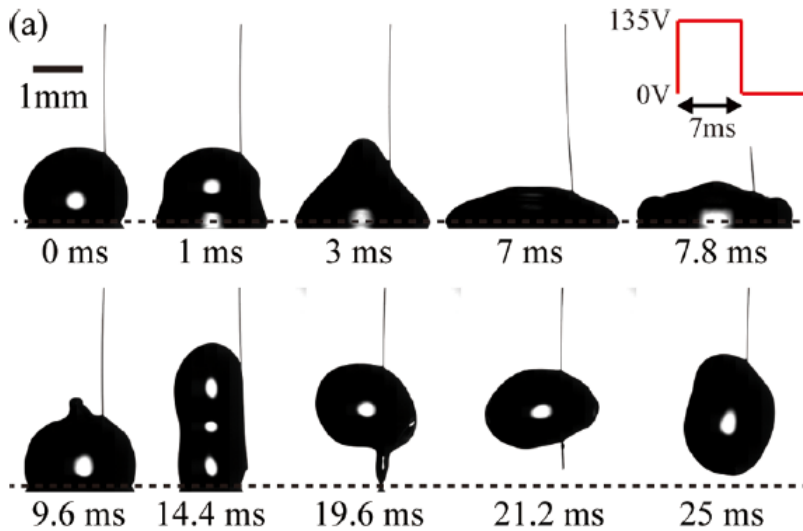
Η προσομοίωση διακόπτεται σε χρόνο $t = 18.79$ ms, καθώς με τη μέθοδο υπολογισμών που χρησιμοποιείται είναι αδύνατη η μελέτη απόσπασης μικρότερου σταγονιδίου από τον όγκο της κύριας σταγόνας, όπως συμβαίνει πειραματικά υπό αυτές τις συνθήκες. Για να ληφθεί μία εικόνα του συστήματος και σε μεγαλύτερους χρόνους μειώνουμε την κατώτερη αποδεκτή ποιότητα πλέγματος από 0.35 σε 0.15 και λαμβάνουμε μία λιγότερο πιστή αλλά πιο πλήρη εικόνα της αναπήδησης της σταγόνας.



Σχήμα 17. Στιγμιότυπα από την προσομοίωση, αναπήδησης σταγόνας νερού όγκου 5 μ L, υπό την επίδραση ηλεκτρικού παλμού τάσης 135V και χρόνου 7ms, για χαμηλή ποιότητα πλέγματος (0.15) ως συνθήκη επανακατασκευής πλέγματος – remeshing. Όπως και προηγουμένως είναι ορατό το σχήμα και η θέση της σταγόνας, καθώς και η ακτινική συνιστώσα της ταχύτητας του ρευστού.

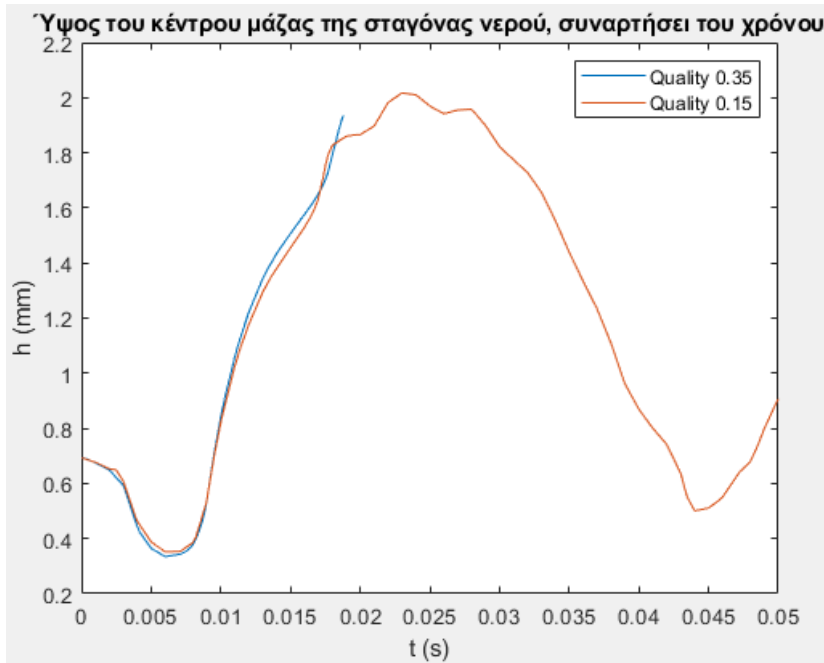
Όπως γίνεται αντιληπτό, τα σχήματα της σταγόνας που προκύπτουν από την προσομοίωση πλέγματος χαμηλότερης ποιότητας, είναι λιγότερο λεπτομερή. Ωστόσο τα αποτελέσματα και των δύο προσομοιώσεων φαίνονται να βρίσκονται αρκετά κοντά σε αυτά που παρουσιάζονται στη βιβλιογραφία.¹ Μερικές από τις αποκλίσεις μπορεί να οφείλονται και στην ύπαρξη του κατακόρυφου ηλεκτροδίου, που διέρχεται από τη σταγόνα στο πείραμα της βιβλιογραφίας. Επίσης, φαίνεται να υπάρχει και μια μικρή χρονική διαφορά στα στιγμιότυπα του πλέγματος χαμηλότερης ποιότητας.

Για σύγκριση, τα σχήματα της σταγόνας που αναγράφονται στη βιβλιογραφία είναι τα εξής.



Σχήμα 18. Εικόνες μιας σταγόνας όγκου 5µL που αποκολλάται από το στερεό υπόστρωμα στο πείραμα της βιβλιογραφίας, με τη βοήθεια απλού τετραγωνικού παλμού τάσης 135V και διάρκειας 7ms.¹ Κάτω από κάθε εικόνα αναγράφεται η χρονική στιγμή από την έναρξη εφαρμογής του ηλεκτρικού παλμού, στην οποία αντιστοιχεί.

Μετά από επιπλέον επεξεργασία των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις, μπορούμε να έχουμε μία εικόνα για τη θέση του κέντρου μάζας της σταγόνας συναρτήσει του χρόνου.



Σχήμα 19. Διάγραμμα του ύψους του κέντρου μάζας της σταγόνας νερού συναρτήσει του χρόνου, για όγκο σταγόνας 5µL και ηλεκτρικό παλμό τάσης 135V και διάρκειας 7ms. Με μπλε χρώμα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την προσομοίωση υψηλής ποιότητας πλέγματος (0.35) και με πορτοκαλί αυτά που προκύπτουν από την προσομοίωση χαμηλότερης ποιότητας πλέγματος (0.15).

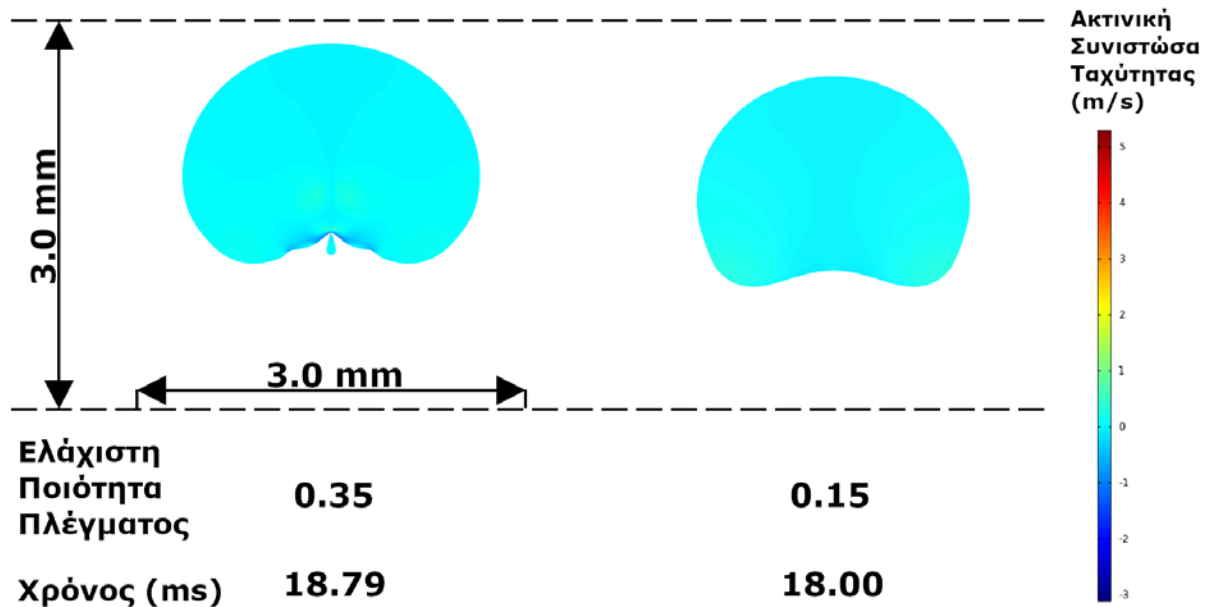
Μέσω του παραπάνω διαγράμματος, γίνεται αντιληπτή η ύπαρξη μιας πολύ μικρής διαφοράς στους χρόνους όπου τα κέντρα μάζας των δύο σταγόνων λαμβάνουν αντίστοιχες θέσεις, όπως αναφέρθηκε προηγουμένως.

Ακόμα, παρατηρώντας το διάγραμμα, βλέπουμε ότι στην περίπτωση της προσομοίωσης πλέγματος υψηλότερης ποιότητας, αν και η σταγόνα δεν ολοκληρώνει το άλμα της, το κέντρο μάζας της ανυψώνεται περισσότερο σε σχέση με τις αντίστοιχες θέσεις του κέντρου μάζας της σταγόνας χαμηλότερου πλέγματος.

Αναλυτικότερα, το κέντρο μάζας της σταγόνας υψηλής ποιότητας πλέγματος λαμβάνει τη μέγιστη τιμή ύψους $h = 1.9353 \text{ mm}$ για χρόνο $t = 18.79 \text{ ms}$, όπου σε σχέση με την κατώτατη θέση του ($h_{\min} = 0.3347 \text{ mm}$) ανυψώνεται κατά $\Delta h = 1.6006 \text{ mm}$.

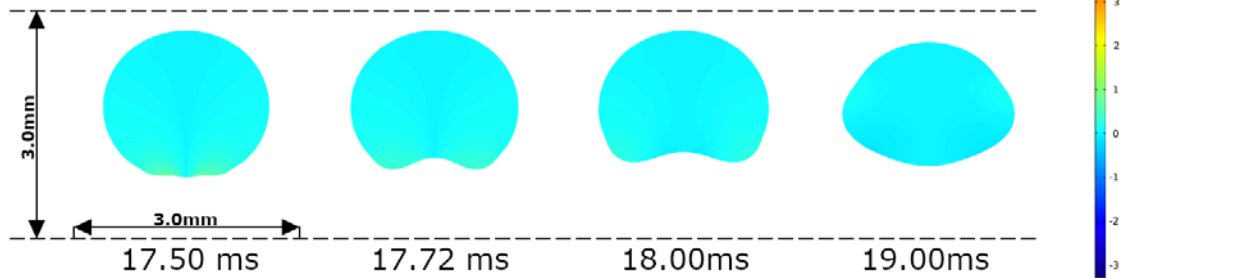
Το κέντρο μάζας της σταγόνας χαμηλής ποιότητας πλέγματος λαμβάνει το μέγιστο ύψος $h' = 2.0172 \text{ mm}$ για χρόνο $t = 23.00 \text{ ms}$, όπου η ανύψωση σε σχέση με την χαμηλότερη θέση που λαμβάνει το κέντρο μάζας ($h'_{\min} = 0.3520 \text{ mm}$) είναι $\Delta h' = 1.6652 \text{ mm}$.

Μετά από σύγκριση των σχημάτων των σταγόνων που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις χαμηλής και υψηλής ποιότητας πλέγματος, θεωρούμε ότι η κατάσταση της σταγόνας κατά τη διακοπή της προσομοίωσης υψηλής ποιότητας πλέγματος ($t = 18.79 \text{ ms}$) αντιστοιχεί στην κατάσταση της σταγόνας χαμηλής ποιότητας πλέγματος για χρόνο $t'' = 18.00 \text{ ms}$. Παρατίθενται και τα αντίστοιχα σχήματα των σταγόνων.



Σχήμα 20. Αντιστοίχιση των σχημάτων των σταγόνων όγκου 5μL μεταξύ των προσομοιώσεων υψηλής και χαμηλής ποιότητας πλέγματος. Στα αριστερά απεικονίζεται η σταγόνα υψηλής ποιότητας πλέγματος κατά τη διακοπή της προσομοίωσής της ($t = 18.79 \text{ ms}$), ενώ στα δεξιά απεικονίζεται η σταγόνα χαμηλής ποιότητας πλέγματος τη χρονική στιγμή ($t'' = 18.00 \text{ ms}$) όπου εμφανίζει τη μέγιστη ομοιότητα με αυτήν της υψηλής ποιότητας πλέγματος.

Σταγόνα 5μL - Ελάχιστη Ποιότητα πλέγματος: 0.15



Σχήμα 21. Απεικόνιση του σχήματος της σταγόνας όγκου 5μL και χαμηλής ποιότητας πλέγματος για χρόνους 17.50 - 19.00 ms. Είναι εμφανές ότι η σταγόνα στους χρόνους 17.72 ms και 18.00 ms λαμβάνει σχήμα παρόμοιο με αυτό της σταγόνας κατά τη διακοπή της προσομοίωσης υψηλής ποιότητας πλέγματος.

Αν περιορίσουμε τις μετρήσεις της προσομοίωσης χαμηλής ποιότητας πλέγματος έως τα 18.00 ms, ώστε να περιλαμβάνει τους αντίστοιχους σχηματισμούς με την προσομοίωση υψηλής ποιότητας πλέγματος, έχουμε ότι το μέγιστο ύψος του κέντρου μάζας της σταγόνας είναι $h'' = 1.8271$ mm για χρόνο $t'' = 18.00$ ms με ανύψωση $\Delta h'' = 1.4751$ mm από το χαμηλότερο σημείο ($h_{\min}' = 0.3520$ mm).

Βρίσκοντας το λόγο της μέγιστης ανύψωσης της σταγόνας προς την ανύψωση σε χρόνο $t'' = 18.00$ ms στην προσομοίωση χαμηλής ποιότητας πλέγματος και θεωρώντας ότι ο λόγος αυτός θα είναι ίσος με το λόγο της μέγιστης ανύψωσης της σταγόνας στην προσομοίωση υψηλής ποιότητας πλέγματος προς την ανύψωση κατά τη διακοπή της προσομοίωσης ($t' = 18.79$ ms), μπορούμε να πραγματοποιήσουμε προεκβολή και να εκτιμήσουμε χονδρικά, ποια θα ήταν η ανώτερη θέση και η μέγιστη ανύψωση σε μία πλήρη προσομοίωση υψηλής ποιότητας πλέγματος.

$$h_e = \Delta h_e + h_{\min} = \frac{\Delta h'}{\Delta h''} \cdot \Delta h + h_{\min} = \left(\frac{1.6652}{1.4751} \cdot 1.6006 + 0.3347 \right) \text{ mm} \Leftrightarrow h_e = 2.14 \text{ mm} \quad (19)$$

με $\Delta h_e = 1.81$ mm

Διαιρώντας την ανύψωση με την ακτίνα της σταγόνας ($R_0 = 1.061$ mm για όγκο 5μL), βρίσκουμε τη σχετική ή ανηγμένη ανύψωση του κέντρου μάζας της, $\Delta h_{er} = \frac{\Delta h_e}{R_0} \Leftrightarrow \Delta h_{er} = 1.71$ (20)

Εξ άλλου, αν λάβουμε υπ' όψη μας μόνον την προσομοίωση χαμηλότερης ποιότητας, η ανύψωση του κέντρου μάζας της σταγόνας σε σχέση με την ακτίνα της προκύπτει ίση προς $\Delta h_r = \frac{\Delta h}{R_0} \Leftrightarrow \Delta h_r = 1.57$

Οι τιμές αυτές είναι μεγαλύτερες κατά 34.6% και 23.6%, αντίστοιχα, από αυτήν της βιβλιογραφίας, που είναι ίση με 1.27.¹ Επιπλέον, στη βιβλιογραφία η μέγιστη τιμή ανύψωσης του κέντρου μάζας αντιστοιχεί σε χρόνο 21.2 ms. Η απόκλιση στην τιμή της σχετικής ανύψωσης του κέντρου μάζας πιθανότατα οφείλεται τόσο σε ανακρίβειες της μεθόδου προεκβολής των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης υψηλής ποιότητας που υιοθετήθηκε, όσο και στην παρουσία του ηλεκτροδίου εντός της σταγόνας κατά τη διεξαγωγή του φυσικού πειράματος και σε ενδεχόμενες αποκλίσεις του υπολογιστικού μοντέλου από την πραγματικότητα. Ακόμα και αν χρησιμοποιήσουμε την ανύψωση που λαμβάνουμε κατά τη διακοπή

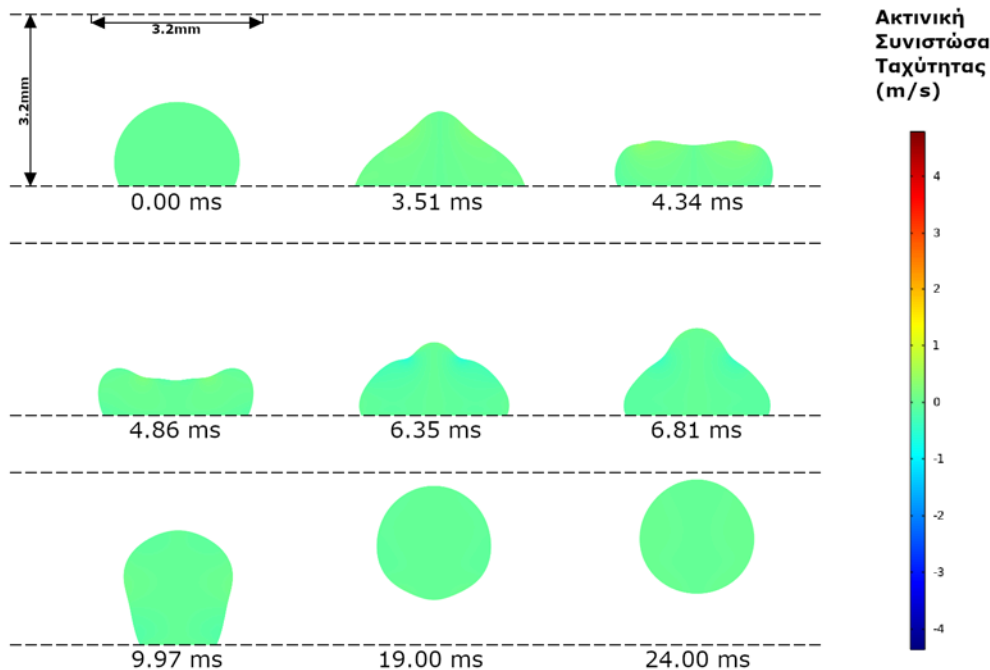
της προσομοίωσης πλέγματος υψηλής ποιότητας ($\Delta h=1.6006\text{mm}$, $t=18.79\text{ms}$) τα αποτελέσματα για την ανηγμένη ανύψωση εξακολουθούν να είναι σημαντικά μεγαλύτερα από αυτά της βιβλιογραφίας ($\Delta h_r = 1.51$, μεγαλύτερο κατά 18.9% από αυτό της βιβλιογραφίας).

3.2 Εφαρμογή απλών ηλεκτρικών παλμών αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.79

Συνεχίζοντας με τις σταγόνες 5μL, που αναπηδούν με τη βοήθεια ηλεκτρικού παλμού με αριθμό ηλεκτροδιαβροχής 0.79, για χρονικά διαστήματα εφαρμογής παλμού 3.5 και 10.5 ms, τα σχήματα των σταγόνων που προκύπτουν από την προσομοίωση συναρτήσει του χρόνου παρουσιάζονται παρακάτω.

3.2.1 Παλμός διάρκειας 3.5 ms

Τα αποτελέσματα κατά την εφαρμογή του παλμού για 3.5 ms, με ποιότητα πλέγματος 0.35 είναι τα εξής.

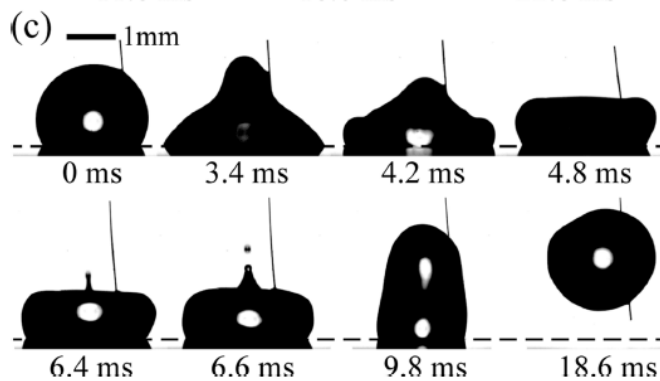


Σχήμα 22. Στιγμιότυπα αναπήδησης της σταγόνας νερού όγκου 5μL, υπό την επίδραση ηλεκτρικού παλμού τάσης 143V (αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.79) και διάρκειας 3.5ms. Η προσομοίωση μέσω του Comsol έγινε για αρκετά ψηλή ποιότητα πλέγματος, ίση με 0.35. Είναι εμφανές το σχήμα και η θέση της σταγόνας σε σχέση με την επιφάνεια κάτω από αυτήν, σε καθέναν από τους χρόνους που αναγράφονται. Η ακτινική συνιστώσα της ταχύτητας του ρευστού εντός της σταγόνας αποτυπώνεται με βάση την κλίμακα χρωμάτων στα δεξιά της εικόνας.

Συγκρίνοντας την παραπάνω εικόνα με την αντίστοιχη που απαντάται στη βιβλιογραφία¹ βλέπουμε ότι, αν και σε μερικά σημεία η ομοιότητα των σταγόνων είναι σχετικά μεγάλη, σε αρκετά σημεία η εικόνα δεν μοιάζει και τόσο πολύ, παρά την υψηλή ποιότητα πλέγματος (0.35) που χρησιμοποιήθηκε στην προσομοίωση. Ίσως να χρειαζόταν ακόμα υψηλότερη ποιότητα πλέγματος για να αποτυπωθούν οι μικρότερες σταγόνες, που αποσπώνται από την κύρια σταγόνα στα 6-7ms.

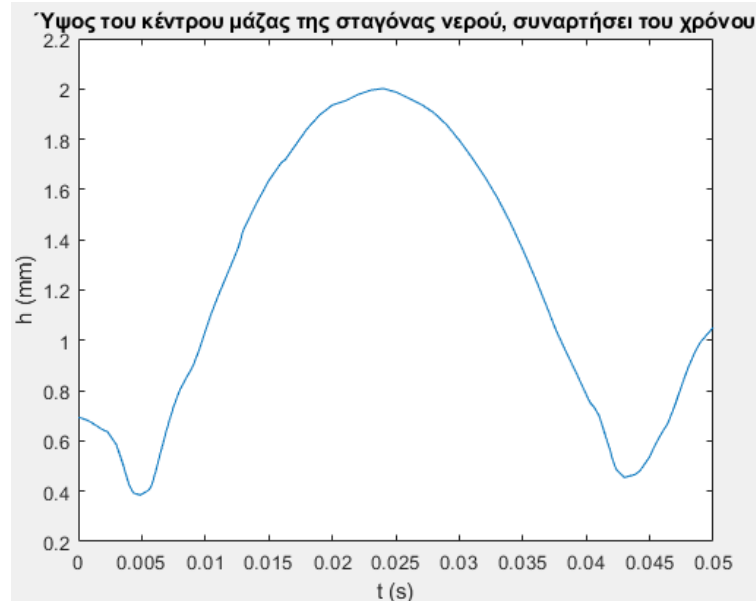
Η απόκλιση που εμφανίζεται μεταξύ των δύο εικόνων, εκτός από τη χαμηλή ποιότητα πλέγματος, μπορεί να οφείλεται σε ατέλειες της πειραματικής διαδικασίας (π.χ. την ύπαρξη ηλεκτροδίου εντός της σταγόνας), αλλά και σε ατέλειες του υπολογιστικού μοντέλου της προσομοίωσης.

Παρατίθεται και η αντίστοιχη εικόνα της σταγόνας από τη βιβλιογραφία, για σύγκριση.



Σχήμα 23. Εικόνες μιας σταγόνας όγκου 5µL που αποκολλάται από το στερεό υπόστρωμα στο πείραμα της βιβλιογραφίας, με τη βοήθεια απλού τετραγωνικού παλμού αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.79 και διάρκειας 3.5ms.¹ Κάτω από κάθε εικόνα αναγράφεται η χρονική στιγμή από την έναρξη εφαρμογής του ηλεκτρικού παλμού, στην οποία αντιστοιχεί.

Η θέση του κέντρου μάζας της παραπάνω σταγόνας συναρτήσει του χρόνου, που προέκυψε από την προσομοίωση, συνοψίζεται στο ακόλουθο διάγραμμα.

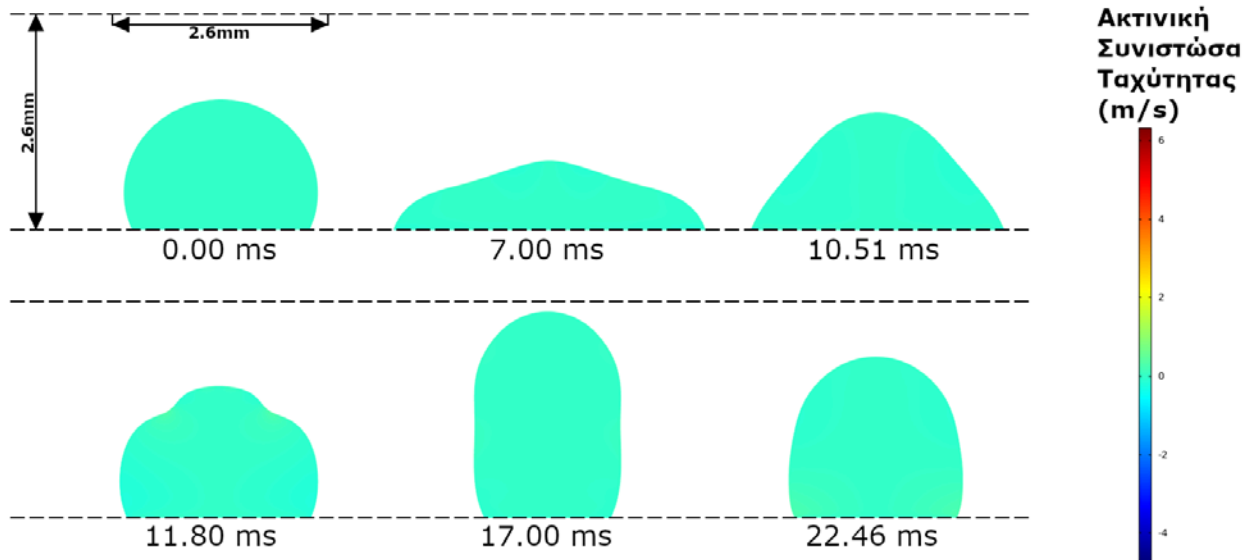


Σχήμα 24. Διάγραμμα του ύψους του κέντρου μάζας της σταγόνας νερού συναρτήσει του χρόνου, για όγκο σταγόνας 5µL και ηλεκτρικό παλμό τάσης 143V (αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.79) και διάρκειας 3.5ms.

Το κέντρο μάζας της σταγόνας λαμβάνει το μέγιστο ύψος $h = 2.0017 \text{ mm}$ σε χρόνο 24 ms , όπου η ανύψωση σε σχέση με την χαμηλότερή του θέση είναι $\Delta h = 1.6170 \text{ mm}$. Η σχετική ανύψωση, που προκύπτει διαιρώντας με την ακτίνα της σταγόνας (1.061 mm) είναι $\Delta h_r = 1.5240$.

3.2.2 Παλμός διάρκειας 10.5 ms

Τα στιγμιότυπα που προέκυψαν από την προσομοίωση εφαρμογής του ηλεκτρικού παλμού στη σταγόνα νερού για 10.5 ms είναι τα ακόλουθα.

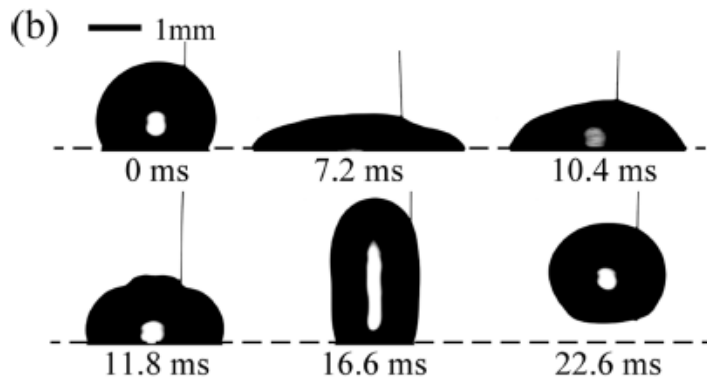


Σχήμα 25. Στιγμιότυπα εξέλιξης της σταγόνας νερού όγκου $5 \mu\text{L}$, υπό την επίδραση ηλεκτρικού παλμού τάσης 143V (αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.79) και διάρκειας 10.5 ms . Η προσομοίωση μέσω του *Comsol* έγινε για αρκετά ψηλή ποιότητα πλέγματος, ίση με 0.35 . Είναι εμφανές το σχήμα και η θέση της σταγόνας σε σχέση με την επιφάνεια κάτω από αυτήν, σε καθέναν από τους χρόνους που αναγράφονται. Η ακτινική συνιστώσα της ταχύτητας του ρευστού εντός της σταγόνας αποτυπώνεται με βάση την κλίμακα χρωμάτων στα δεξιά της εικόνας.

Πραγματοποιώντας σύγκριση των παραπάνω σχημάτων της σταγόνας με αυτούς που παρουσιάζονται στη βιβλιογραφία,¹ αν και υπάρχουν μερικές ομοιότητες σε μερικά σημεία, παρά τη χρήση σχετικά υψηλής ποιότητας πλέγματος, το σχήμα της σταγόνας είναι διαφορετικό. Για παράδειγμα στα 10.51 ms η σταγόνα εμφανίζεται πιο ψηλή και πιο μυτερή σε σχέση με τη βιβλιογραφία. Είναι σημαντικό να τονισθεί ότι η σταγόνα στην περίπτωση της προσομοίωσης δεν αποκολλάται από το υπόστρωμα, σε αντίθεση με το πείραμα της βιβλιογραφίας. Το τελευταίο γεγονός μπορεί να δικαιολογηθεί, καθώς οι τιμές τόσο των 10.5 ms όσο και των 3.5 ms , αναγράφονται στη βιβλιογραφία ως οριακές τιμές του χρόνου εφαρμογής ηλεκτρικού παλμού 135V , που απαιτείται για την αποκόλληση της σταγόνας $5 \mu\text{L}$ από το υπόστρωμα. Όπως και με τα προηγούμενα παραδείγματα, η ασυμφωνία μεταξύ των αποτελεσμάτων μπορεί να οφείλεται σε σφάλματα του φυσικού πειράματος λόγω της ύπαρξης του ηλεκτροδίου που διέρχεται από τη σταγόνα, όσο και σε αδυναμίες της υπολογιστικού μοντέλου. Με χρήση πλέγματος εξαιρετικά μεγάλης ποιότητας (άνω του 0.35), ενδέχεται να βελτιωθούν τα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

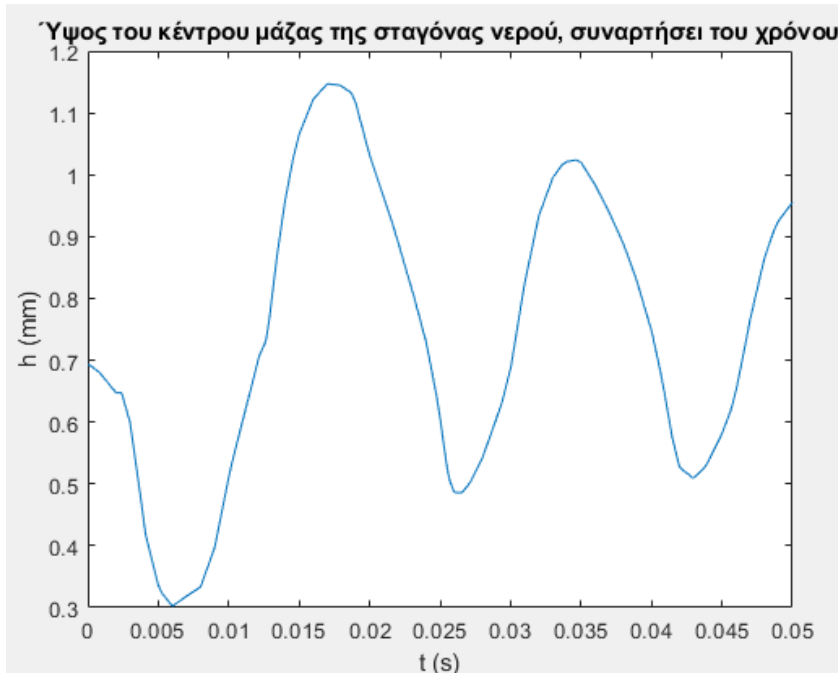
Είναι ενδιαφέρον το γεγονός ότι, ενώ η σταγόνα νερού πήδηξε στην προσομοίωση εφαρμογής του ηλεκτρικού παλμού για 3.5 ms, δεν αναπήδησε για τον μεγαλύτερο χρόνο των 10.5 ms, στοιχείο που αναδεικνύει τη σημασία του συντονισμού του επιβαλλόμενου ηλεκτρικού παλμού με τις ταλαντώσεις της σταγόνας για την επιτυχή και αποδοτική αποκόλλησή της.

Παρατίθενται και οι εικόνες της σταγόνας σύμφωνα με τη βιβλιογραφία, για σύγκριση.



Σχήμα 26. Εικόνες μιας σταγόνας όγκου 5μL που αποκολλάται από το στερεό υπόστρωμα στο πείραμα της βιβλιογραφίας, με τη βοήθεια απλού τετραγωνικού παλμού αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.79 και διάρκειας 10.5ms.¹ Κάτω από κάθε εικόνα αναγράφεται η χρονική στιγμή από την έναρξη εφαρμογής του ηλεκτρικού παλμού, στην οποία αντιστοιχεί.

Η θέση του κέντρου μάζας της σταγόνας αποτυπώνεται στο παρακάτω διάγραμμα.

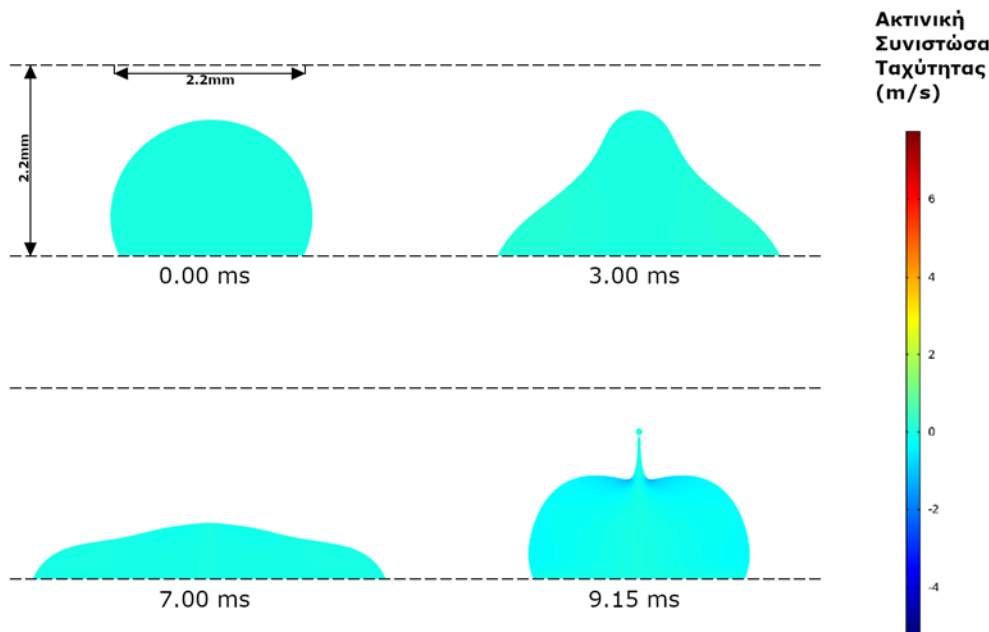


Σχήμα 27. Διάγραμμα του ύψους του κέντρου μάζας της σταγόνας νερού συναρτήσεως του χρόνου, για όγκο σταγόνας 5μL και ηλεκτρικό παλμό τάσης 143V (αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.79) και διάρκειας 10.5ms.

Το κέντρο μάζας της σταγόνας λαμβάνει το μέγιστο ύψος $h = 1.1471$ mm σε χρόνο 17 ms, όπου η ανύψωση σε σχέση με την χαμηλότερή του θέση είναι $\Delta h = 0.8448$ mm. Η σχετική ανύψωση, που προκύπτει διαιρώντας με την ακτίνα της σταγόνας (1.061 mm), είναι $\Delta h_r = 0.7962$. Η σταγόνα, όπως προαναφέρθηκε, δεν αποκολλάται από το υπόστρωμα.

3.3 Εφαρμογή Διπλού ηλεκτρικού παλμού τάσης 240V, διάρκειας 7ms και περιόδου 16ms

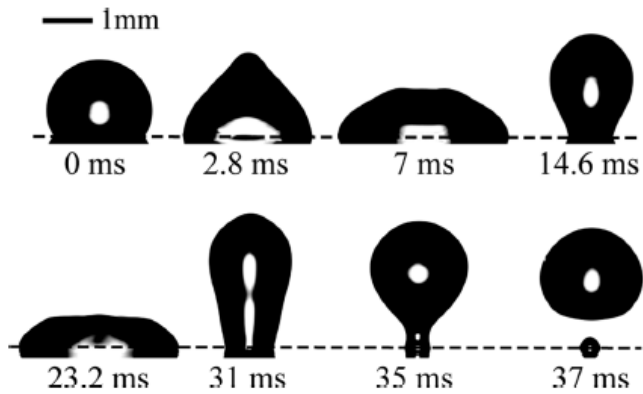
Η διαδοχή σχημάτων της σταγόνας, κατά την εφαρμογή διπλού παλμού αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.9 (τάσης 240 V σε διαφορετική διάταξη), διάρκειας εφαρμογής παλμού 7 ms και περιόδου 16 ms συνοψίζεται στην ακόλουθη εικόνα.



Σχήμα 28. Στιγμιότυπα εξέλιξης της σταγόνας νερού όγκου 5μL, υπό την επίδραση διπλού ηλεκτρικού παλμού αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.9 (τάσης 240V – άλλη διάταξη) με σκέλη διάρκειας 7ms και περίοδο 16ms. Η προσομοίωση μέσω του Comsol έγινε για αρκετά ψηλή ποιότητα πλέγματος, ίση με 0.35. Είναι εμφανές το σχήμα και η θέση της σταγόνας σε σχέση με την επιφάνεια κάτω από αυτήν, σε καθέναν από τους χρόνους που αναγράφονται. Η ακτινική συνιστώσα της ταχύτητας του ρευστού εντός της σταγόνας αποτυπώνεται με βάση την κλίμακα χρωμάτων στα δεξιά της εικόνας.

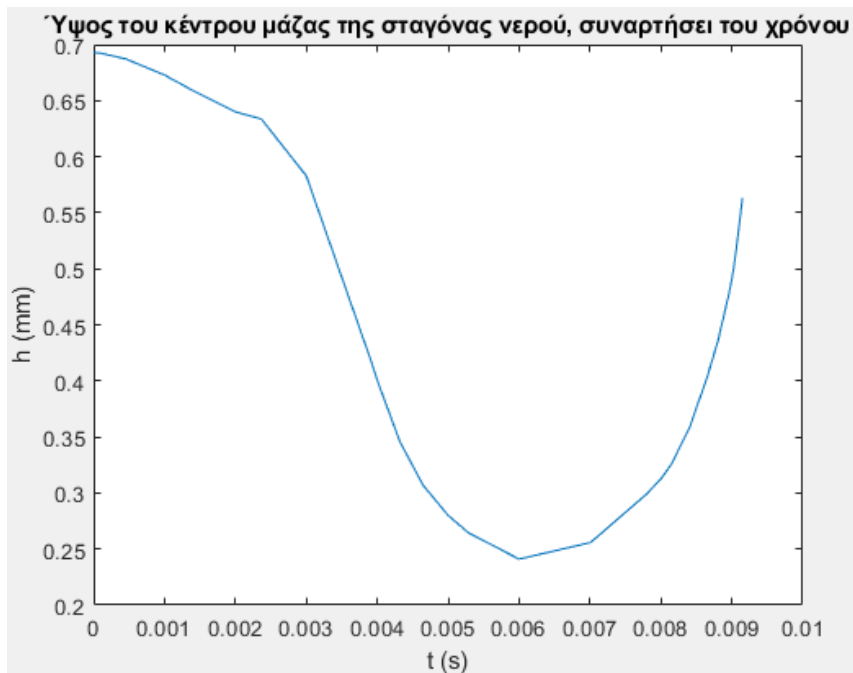
Αν και τα παραπάνω σχήματα της σταγόνας μοιάζουν σχετικά με αυτά της βιβλιογραφίας, η προσομοίωση δεν ολοκληρώθηκε, λόγω αδυναμίας επίλυσης των διαφορικών εξισώσεων με τη χρησιμοποιούμενη μέθοδο υπολογισμών (σηματισμός μικρής σταγόνας που αποσπάται από την κύρια μάζα ρευστού). Ακόμα και με μείωση της ποιότητας του πλέγματος δεν έγινε εφικτή η συνέχιση της προσομοίωσης σε περαιτέρω χρόνους. Η μικρή σταγόνα που σχηματίζεται δεν εντοπίζεται στις εικόνες της βιβλιογραφίας.¹ Αυτό οφείλεται πιθανότατα στο γεγονός ότι οι εικόνες των σταγόνων στην περιοχή των 9.00 ms παραλείπονται και η επόμενη εικόνα μετά τα 7 ms είναι αυτή των 14.6 ms.

Παρατίθεται η αντίστοιχη εικόνα της βιβλιογραφίας για σύγκριση.



Σχήμα 29. Εικόνες μιας σταγόνας όγκου 5μL που αποκολλάται από το στερεό υπόστρωμα στο πείραμα της βιβλιογραφίας, με τη βοήθεια διπλού τετραγωνικού παλμού αριθμού τάσης 240V και διάρκειας 7ms και περιόδου 16ms.¹ Κάτω από κάθε εικόνα αναγράφεται η χρονική στιγμή από την έναρξη εφαρμογής του ηλεκτρικού παλμού, στην οποία αντιστοιχεί.

Ακολουθεί και το διάγραμμα της θέσης του κέντρου μάζας της σταγόνας συναρτήσει του χρόνου.



Σχήμα 30. Διάγραμμα του ύψους του κέντρου μάζας της σταγόνας νερού συναρτήσει του χρόνου, για όγκο σταγόνας 5μL και διπλό ηλεκτρικό παλμό αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.9 (τάσης 240V – άλλη διάταξη) με σκέλη διάρκειας 7ms και περίοδο 16ms.

Λόγω της άμεσης διακοπής της προσομοίωσης στα 9.15 ms, το χρονικό διάστημα που έχει προσομοιωθεί είναι πολύ μικρό και δεν προφταίνει η σταγόνα να αποκολληθεί, ούτε εφαρμόζεται το δεύτερο σκέλος του παλμού. Το μεγαλύτερο ύψος που λαμβάνει το κέτρο μάζας είναι αυτό των 0.692818 mm στην αρχή της προσομοίωσης, προτού η σταγόνα ξεκινήσει να απλώνεται στο υπόστρωμα.

Κεφάλαιο 4: Προσομοίωση Οριακών Σεναρίων Αποκόλλησης Σταγόνων Νερού

4.1 Περιγραφή των σεναρίων προς προσομοίωση

Σε δεύτερο στάδιο εξετάστηκαν μέσω του Comsol, οι αναγραφόμενες στη βιβλιογραφία¹ ελάχιστες τιμές αριθμών ηλεκτροδιαβροχής (που αντιστοιχούν στις ελάχιστες ηλεκτρικές τάσεις) που απαιτείται να εφαρμόζονται μέσω των ηλεκτρικών παλμών σε σταγόνες διαφορετικών όγκων, προκειμένου αυτές να αναπηδούν.

Στο άρθρο της βιβλιογραφίας έχουν αποτυπωθεί σε ένα διάγραμμα οι ελάχιστοι απαιτούμενοι αριθμοί ηλεκτροδιαβροχής για την οριακή αποκόλληση σταγόνων νερού όγκων 0.4, 1, 3, 5 και 10 μL μέσω απλού και διπλού ηλεκτρικού παλμού, που προέκυψαν από πειράματα. Οι αριθμοί αυτοί είναι χαμηλότεροι στις περιπτώσεις του διπλού παλμού, σε σχέση με αυτές του απλού, δείχνοντας ότι, μέσω κατάλληλου συντονισμού του ηλεκτρικού παλμού με την ταλάντωση της σταγόνας, υποβοηθείται η αναπήδηση της τελευταίας και μειώνονται οι απαιτήσεις στην εφαρμοζόμενη ηλεκτρική τάση. Ως συνθήκη οριακής αποκόλλησης των σταγόνων στη βιβλιογραφία χρησιμοποιήθηκε η εξίσωση της μέγιστης σχετικής ανύψωσης, δηλαδή του λόγου της μέγιστης ανύψωσης του κέντρου μάζας της κάθε σταγόνας σε σχέση με την κατώτατη θέση, δια της ακτίνας της (ακτίνα ισοδύναμης σφαίρας), με τη μονάδα. Στα πειράματα της βιβλιογραφίας οι ηλεκτρικοί παλμοί εφαρμόστηκαν για χρόνο που οδηγεί σε βέλτιστα αποτελέσματα και ο οποίος εξαρτάται από τον όγκο της κάθε σταγόνας.

Για κάθε όγκο σταγόνας, προσομοιώθηκε μέσω του Comsol, η εφαρμογή ηλεκτρικών παλμών ιδίων χαρακτηριστικών με αυτών του διαγράμματος της βιβλιογραφίας και εξετάστηκε το εάν η σταγόνα αποκολλάται από την επιφάνεια κάτω από αυτήν και κατά πόσο κοντά βρίσκεται στη μονάδα η μέγιστη σχετική ανύψωση του κέντρου μάζας της κάθε σταγόνας.

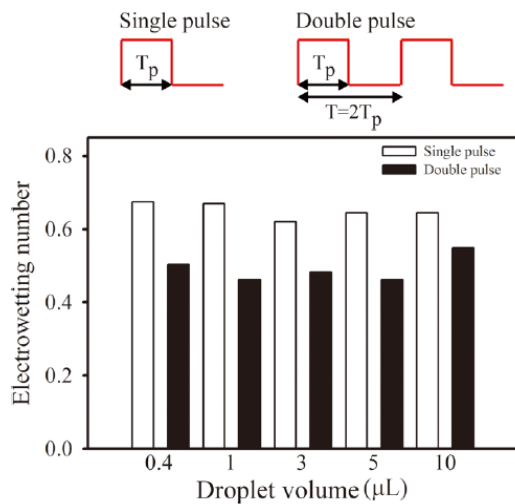
Τα σενάρια που προσομοιώθηκαν για κάθε σταγόνα συνοψίζονται στον ακόλουθο πίνακα.

Πίνακας 1. Πίνακας με τη λίστα των όγκων σταγόνων που προσομοιώθηκαν (V), την ακτίνα που αντιστοιχεί σε σφαιρικό σχήμα αυτών (R_0), τη χρονική διάρκεια των ηλεκτρικών παλμών που εφαρμόστηκαν (T_p), τον αριθμό ηλεκτροδιαβροχής των απλών (η) και διπλών (η_{Double}) παλμών και τις τροποποιημένες γωνίες επαφής που προκύπτουν μετά από την εφαρμογή των απλών (θ_A) ή διπλών παλμών ($\theta_{A \text{ Double}}$), οι οποίες εκτιμήθηκαν μέσω της εξίσωσης Lippmann. Η αρχική γωνία επαφής της σταγόνας με το υπόστρωμα (χωρίς επίδραση ηλεκτρικής τάσης) είναι 116° . Η περίοδος μεταξύ της εφαρμογής κάθε παλμού στους διπλούς παλμούς είναι διπλάσια του χρόνου εφαρμογής του κάθε παλμού.

V (μL)	R_0 (mm)	T_p (ms)	η	θ_A ($^\circ$)	η_{Double}	$\theta_{A \text{ Double}}$ ($^\circ$)
0.4	0.457	2	0.68	76.0	0.51	85.9
1	0.620	3	0.67	76.6	0.46	88.8
3	0.895	5.3	0.62	79.5	0.49	87.0
5	1.061	7	0.65	77.8	0.46	88.8
10	1.337	9	0.65	77.8	0.55	83.6

Double Pulse: $T = 2T_p$

Παρουσιάζεται και το σχετικό διάγραμμα της βιβλιογραφίας.¹



Σχήμα 31. Οριακοί αριθμοί ηλεκτροδιαβροχής που απαιτούνται για την αποκόλληση σταγόνων διαφορετικών όγκων από το υπόστρωμα, μέσω εφαρμογής απλού και διπλού τετραγωνικού ηλεκτρικού παλμού. Το πλάτος του παλμού (T_p) είναι ίσο με το χρόνο εξάπλωσης, ο οποίος εξαρτάται από τον όγκο της σταγόνας. Σε αυτό το διάγραμμα για τα πλάτη των παλμών ανάλογα με τον όγκο κάθε σταγόνας, ισχύει ότι: $T_p = 2 \text{ ms}$ (0.4 μL), 3 ms (1 μL), 5.3 ms (3 μL), 7 ms (5 μL) και 9 ms (10 μL). Το πειραματικό σφάλμα είναι ίσο με $\pm 3\%$ των τιμών.¹

4.2 Αποτελέσματα των προσομοιώσεων και αποκλίσεις από τη βιβλιογραφία

Εκτελώντας τις προσομοιώσεις, οι σταγόνες σε όλες τις περιπτώσεις φάνηκαν να αποκολλώνται από την επιφάνεια που βρίσκεται κάτω από αυτές.

Οι περισσότερες προσομοιώσεις εκτελέστηκαν χωρίς προβλήματα με υψηλή ποιότητα πλέγματος (0.35). Στην περίπτωση του διπλού παλμού σε σταγόνα 10 μL η προσομοίωση διακοπτόταν προτού η σταγόνα αποκολληθεί ακόμα και μετά από ελάττωση της ποιότητας του πλέγματος, λόγω εμφάνιση απροσδιοριστίας (singularity) που καθιστούσε αδύνατη την περαιτέρω επίλυση των εξισώσεων του προβλήματος. Στις περιπτώσεις εφαρμογής απλού παλμού στη σταγόνα όγκου 1 μL και διπλού παλμού στη σταγόνα όγκου 0.4 μL χρειάστηκε υποβιβασμός της ποιότητας του πλέγματος σε 0.15 για να ολοκληρωθεί η προσομοίωση.

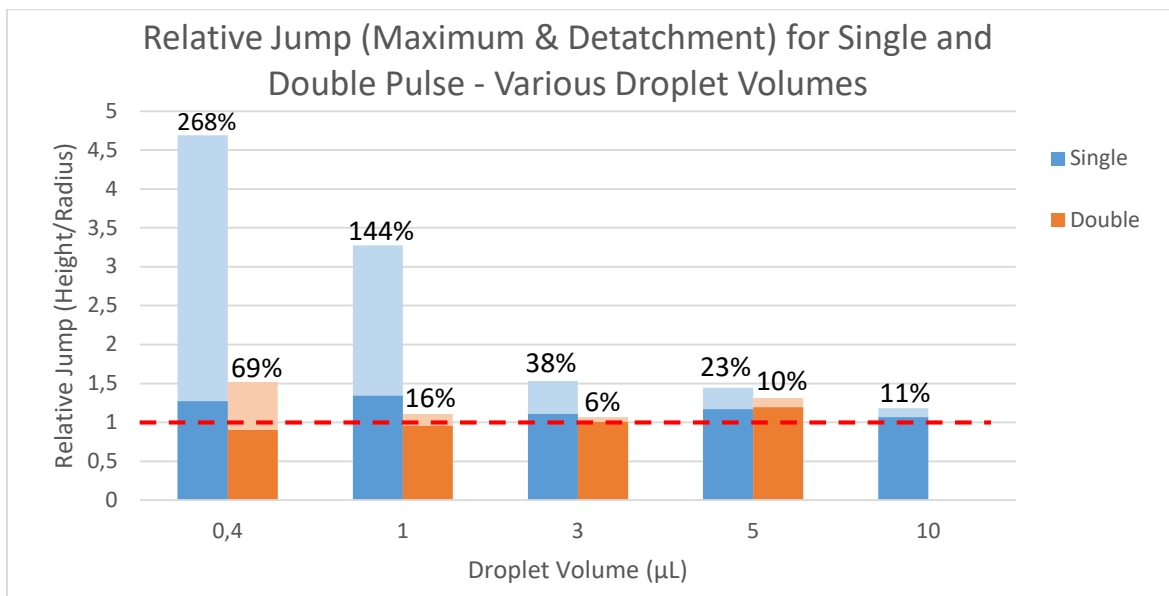
Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις παρουσιάζονται παρακάτω. Εκτός από τη σχετική ανύψωση του κέντρου μάζας της κάθε σταγόνας τη στιγμή της αποκόλλησης, καταγράφηκε και η μέγιστη τιμή της σχετικής ανύψωσης που εμφανίζεται μετά την αποκόλληση της κάθε σταγόνας από το υπόστρωμα, σύμφωνα με την προσομοίωση. Η σχετική ανύψωση του κέντρου μάζας των σταγόνων όταν αυτές αποκολλώνται, φαίνεται πράγματι να βρίσκεται πολύ κοντά στη μονάδα, με μικρές αποκλίσεις. Στον ακόλουθο πίνακα αναγράφονται για κάθε εξεταζόμενο σενάριο (πλην του διπλού παλμού σε σταγόνα 10 μL , που δεν προσομοιώθηκε επιτυχώς) οι τιμές της μέγιστης σχετικής ανύψωσης του κέντρου μάζας της σταγόνας νερού μετά την αποκόλλησή της, οι τιμές της σχετικής ανύψωσης κατά την αποκόλληση της σταγόνας, η απόκλιση της μέγιστης σχετικής ανύψωσης από τη σχετική ανύψωση κατά την αποκόλληση και η απόκλιση της μέγιστης σχετικής ανύψωσης από τη μονάδα (κριτήριο αναπήδησης της βιβλιογραφίας).

Πίνακας 2. Πίνακας με τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων οριακής αποκόλλησης σταγόνων νερού μέσω ηλεκτροδιαβροχής. Για κάθε είδος παλμού - απλού (Single Pulse) ή διπλού (Double Pulse) και για κάθε όγκο σταγόνας (V), αναγράφονται η μέγιστη σχετική ανύψωση του κέντρου μάζας της σταγόνας (Max) μετά την αποκόλλησή της, η σχετική ανύψωση του κέντρου μάζας τη στιγμή που η σταγόνα αποκολλάται (Detachment), η ποσοστιαία απόκλιση της μέγιστης σχετικής ανύψωσης από τη σχετική ανύψωση κατά την αποκόλληση (Rel. Diff (%)) – ίση με (Max-Detachment)/Detachment και η ποσοστιαία απόκλιση της μέγιστης σχετικής ανύψωσης από τη μονάδα (Rel. Diff 1 (%)) – ίση με (Max-1)/1.

Single Pulse				
V (μL)	Relative Jump (= Height / Equivalent Radius)			
	Max	Detachment	Rel. Diff (%)	Rel. Diff 1 (%)
0.4	4.6914	1.2737	268%	369%
1	3.275	1.3436	144%	228%
3	1.5306	1.1071	38%	53%
5	1.445	1.1705	23%	45%
10	1.18	1.0643	11%	18%

Double Pulse				
V (μL)	Relative Jump (= Height / Equivalent Radius)			
	Max	Detachment	Rel. Diff (%)	Rel. Diff 1 (%)
0.4	1.5202	0.9017	69%	52%
1	1.107	0.9544	16%	11%
3	1.0643	1.0053	6%	6%
5	1.3129	1.192	10%	31%
10	-	-	-	-

Τα παραπάνω αποτελέσματα συνοψίζονται και στο διάγραμμα που ακολουθεί.



Σχήμα 32. Διάγραμμα με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης οριακής αποκόλλησης σταγόνων νερού. Για κάθε όγκο σταγόνας που προσομοιώθηκε και για εφαρμογή απλού (μπλε) ή διπλού (πορτοκαλί) ηλεκτρικού παλμού, αποτυπώνονται με μορφή κολώνας η μέγιστη σχετική ανύψωση του κέντρου μάζας της μετά την αποκόλληση (ανοιχτό χρώμα) και η σχετική ανύψωση κατά την αποκόλληση (σκούρο χρώμα). Πάνω από κάθε κολώνα αναγράφεται η ποσοστιαία απόκλιση της μέγιστης σχετικής ανύψωσης από αυτήν κατά την αποκόλληση. Η αναμενόμενη μέγιστη σχετική ανύψωση κατά την οριακή αποκόλληση, με βάση τη βιβλιογραφία, αποτυπώνεται μέσω μίας κόκκινης διακεκομμένης γραμμής.

Μέσω του παραπάνω διαγράμματος, βλέπουμε ότι οι σταγόνες, κυρίως για μικρούς όγκους σταγόνες (0.4 – 1 μL) και για απλούς παλμούς, αναπηδούν αρκετά περισσότερο από όσο θα έπρεπε για να αποκολληθούν οριακά από το υπόστρωμα. Οι αποκλίσεις αυτές μπορεί να οφείλονται στην επίδραση του κατακόρυφου ηλεκτροδίου εντός της σταγόνας που χρησιμοποιήθηκε στα πειράματα της βιβλιογραφίας, για τη διέγερση των σταγόνων μέσω απλού παλμού. Στους διπλούς παλμούς, όπου δεν χρησιμοποιήθηκε κατακόρυφο ηλεκτρόδιο, οι αποκλίσεις από την οριακή αποκόλληση είναι σημαντικά μικρότερες.

4.3 Εύρεση νέων οριακών σεναρίων στις περιπτώσεις μεγάλης απόκλισης

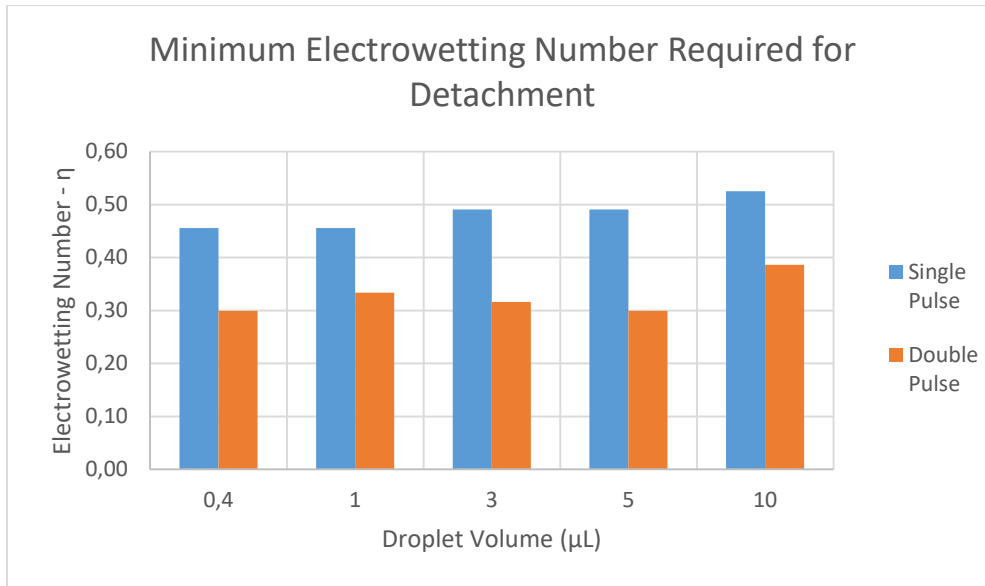
Όπως φαίνεται από το τελευταίο διάγραμμα, μέσω της εφαρμογής των ηλεκτρικών παλμών προσφέρθηκε περισσότερη ενέργεια στις σταγόνες σε σχέση με αυτήν που απαιτείται για την αποκόλλησή τους από το υπόστρωμα. Το φαινόμενο αυτό εμφανίστηκε εντονότερα στις περιπτώσεις των απλών παλμών και για μικρούς όγκους σταγόνες, όπου η μέγιστη σχετική ανύψωση των σταγόνων μετά την αποκόλληση ήταν αρκετά μεγαλύτερη από την ανύψωση που είχαν τη στιγμή που αποκολλήθηκαν. Για το λόγο αυτό διεξήχθη μία νέα σειρά προσομοιώσεων, όπου, αυξάνοντας την τροποποιημένη γωνία επαφής των σταγόνων σε όλα τα σενάρια, έγινε διερεύνηση της τιμής που οδηγεί στην οριακή αποκόλλησή τους. Η διάρκεια και η περίοδος εφαρμογής των παλμών διατηρήθηκαν σταθερές.

Οι τιμές της τροποποιημένης γωνίας επαφής, που προέκυψαν από αυτές τις προσομοιώσεις για κάθε μία από τις εξεταζόμενες σταγόνες, παρουσιάζονται στον παρακάτω πίνακα μαζί με τον αντίστοιχο αριθμό ηλεκτροδιαβροχής και τις τιμές της σχετικής ανύψωσης του κέντρου μάζας της σταγόνας.

Πίνακας 3. Πίνακας με τις τιμές της τροποποιημένης γωνίας επαφής και του αριθμού ηλεκτροδιαβροχής, που απαιτούνται για την οριακή αποκόλληση κάθε μιας από τις εξεταζόμενες σταγόνες, μέσω απλών και διπλών ηλεκτρικών παλμών. Αναγράφονται ο όγκος της κάθε σταγόνας (V), η απαιτούμενη τροποποιημένη γωνία επαφής (θ_A), ο αντίστοιχος αριθμός ηλεκτροδιαβροχής (η), η μέγιστη σχετική ανύψωση του κέντρου μάζας της κάθε σταγόνας μετά την αποκόλλησή της υπό αυτές τις συνθήκες (Max R. Jump), η ανύψωση τη στιγμή που η σταγόνα αποκολλάται (Detach R. Jump) και η ποσοστιαία απόκλιση της μέγιστης σχετικής ανύψωσης από αυτήν της αποκόλλησης. Η τροποποιημένη γωνία επαφής προσδιορίστηκε με ακρίβεια μίας μοίρας σε πλέγμα υψηλής ποιότητας (0.35) σε όλες τις περιπτώσεις. Ο αριθμός ηλεκτροδιαβροχής εκτιμήθηκε βάσει της γωνίας επαφής.

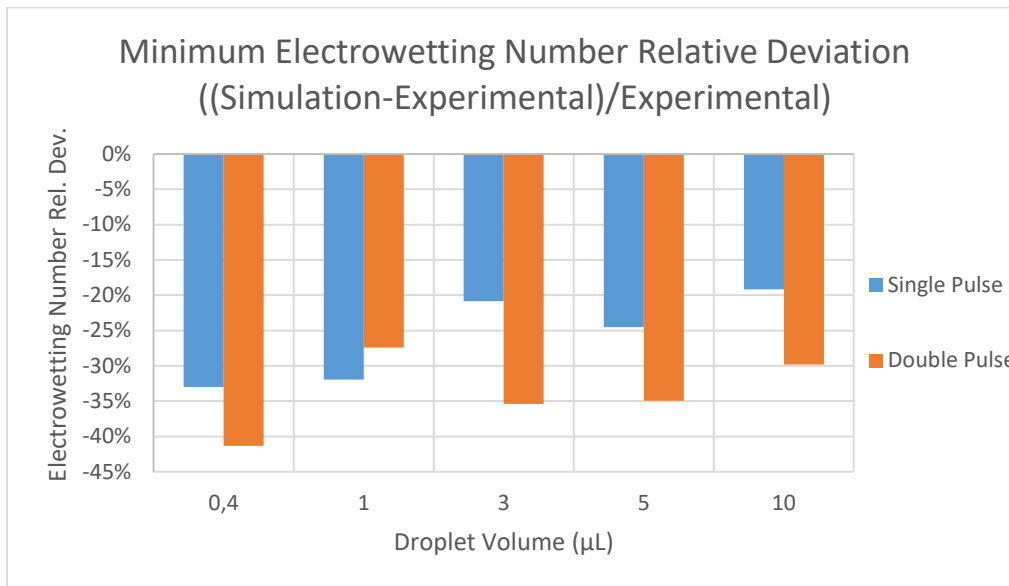
V (μL)	Single Pulse					Double Pulse				
	θ_A ($^\circ$)	η	Max R. Jump	Detach R. Jump	Rel. Diff (%)	θ_A ($^\circ$)	η	Max R. Jump	Detach R. Jump	Rel. Diff (%)
0.4	89	0.46	0.9265	0.8205	13%	98	0.30	0.8978	0.8129	10%
1	89	0.46	0.8690	0.8176	6%	96	0.33	0.8778	0.8577	2%
3	87	0.49	0.7958	0.7883	1%	97	0.32	0.9245	0.8831	5%
5	87	0.49	0.8245	0.8057	2%	98	0.30	0.8921	0.8605	4%
10	85	0.53	0.7814	0.7709	1%	93	0.39	0.9096	0.9000	1%

Ακολουθεί και το διάγραμμα του απαιτούμενου αριθμού διαβροχής για αποκόλληση των σταγόνων, σε κάθε όγκο σταγόνας και είδος παλμού. Το διάγραμμα είναι το αντίστοιχο αυτού της βιβλιογραφίας, αλλά σχεδιάζεται βάσει των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις.



Σχήμα 33. Απεικόνιση του ελάχιστου αριθμού ηλεκτροδιαβροχής που απαιτείται για την αποκόλληση των σταγόνων από το στερεό υπόστρωμα. Παρουσιάζονται οι τιμές του ελάχιστου αριθμού ηλεκτροδιαβροχής για κάθε όγκο σταγόνας που εξετάστηκε, για απλό (μπλέ) και διπλό (πορτοκαλί) ηλεκτρικό παλμό.

Παρατίθεται και το διάγραμμα της σχετικής απόκλισης των παραπάνω οριακών αριθμών ηλεκτροδιαβροχής σε σχέση με αυτούς της βιβλιογραφίας.



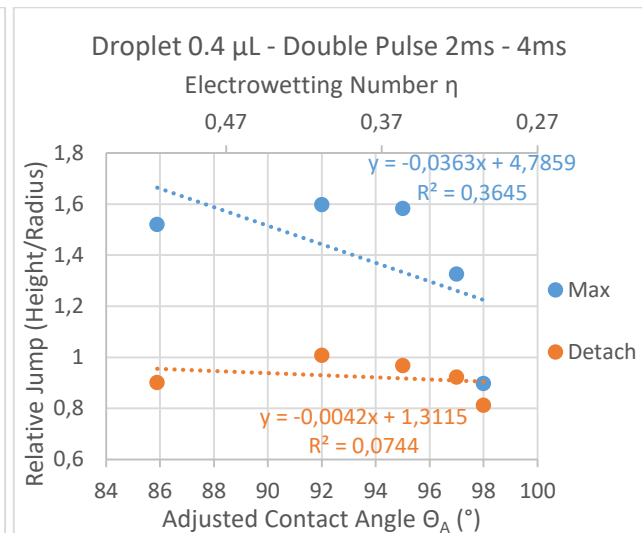
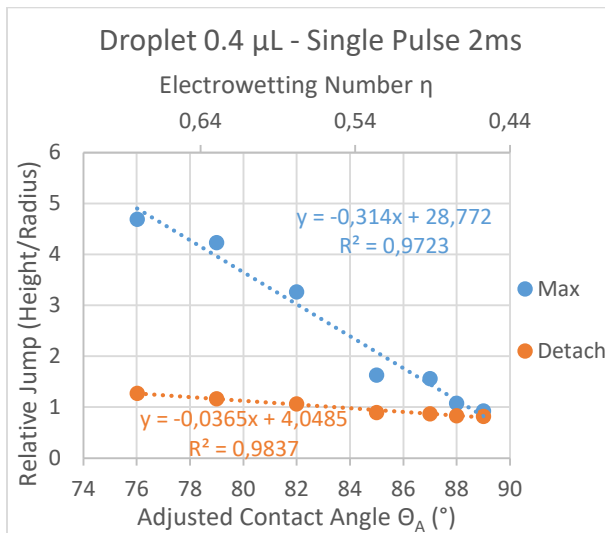
Σχήμα 34. Απεικόνιση της σχετικής απόκλισης του ελάχιστου αριθμού ηλεκτροδιαβροχής που προέκυψε από τις προσομοιώσεις σε σχέση με τις πειραματικές τιμές της βιβλιογραφίας. Παρουσιάζεται η σχετική απόκλιση του ελάχιστου αριθμού ηλεκτροδιαβροχής $((\eta_{\text{προσομοίωσης}} - \eta_{\text{πειραματικός}}) / \eta_{\text{πειραματικός}})$ για κάθε εξεταζόμενο όγκο σταγόνας, για απλό (μπλέ) και διπλό (πορτοκαλί) ηλεκτρικό παλμό.

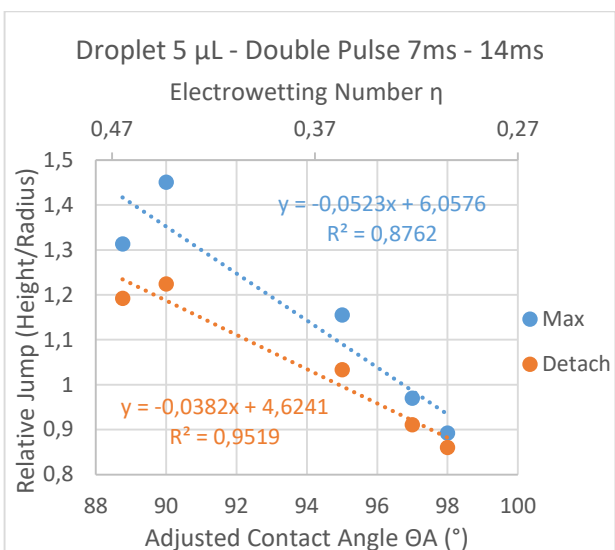
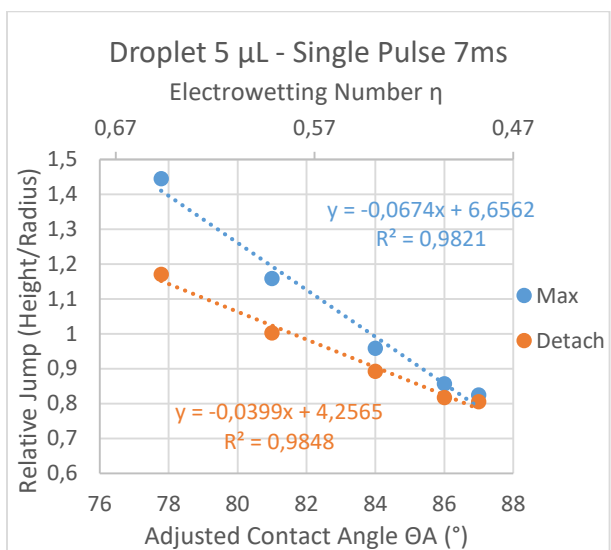
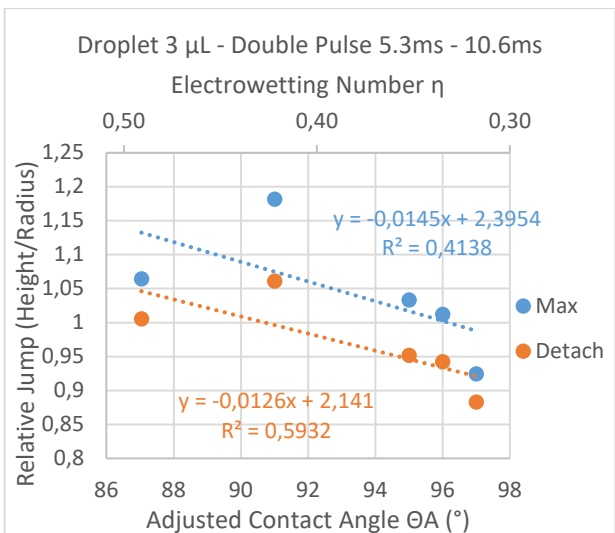
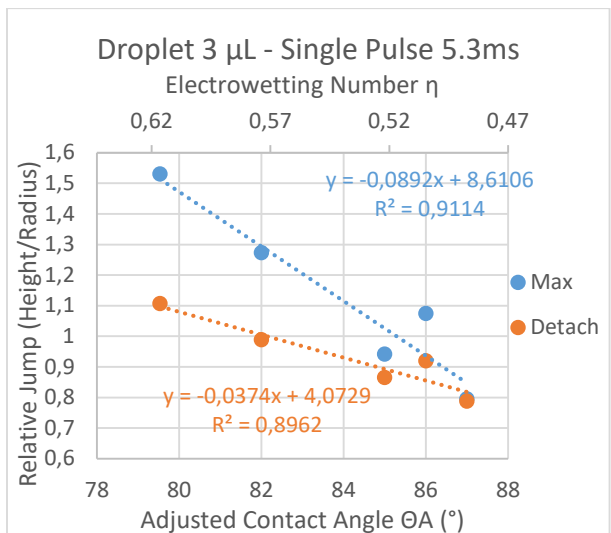
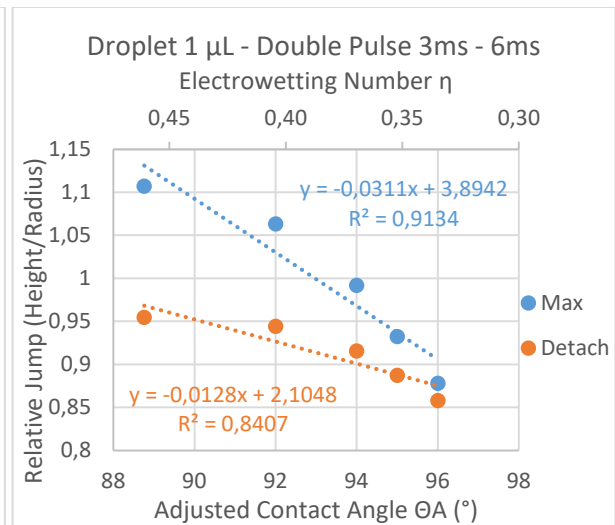
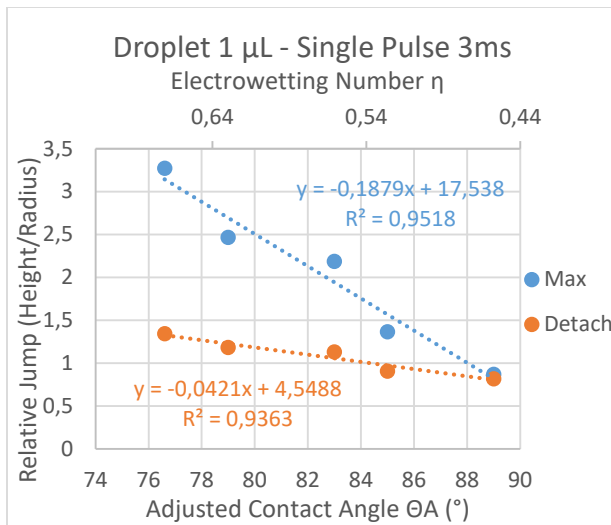
Όπως φαίνεται στα παραπάνω διαγράμματα, σε όλες τις περιπτώσεις, ο απαιτούμενος αριθμός ηλεκτροδιαβροχής για την αποκόλληση των σταγόνων είναι μικρότερος σύμφωνα με τις προσομοιώσεις σε σχέση με τα πειραματικά δεδομένα. Σύμφωνα και με τα προαναφερθέντα, η απόκλιση μεταξύ προσομοιώσεων και πειράματος φαίνεται να είναι ελαφρώς μεγαλύτερη για πολύ μικρό όγκο σταγόνας.

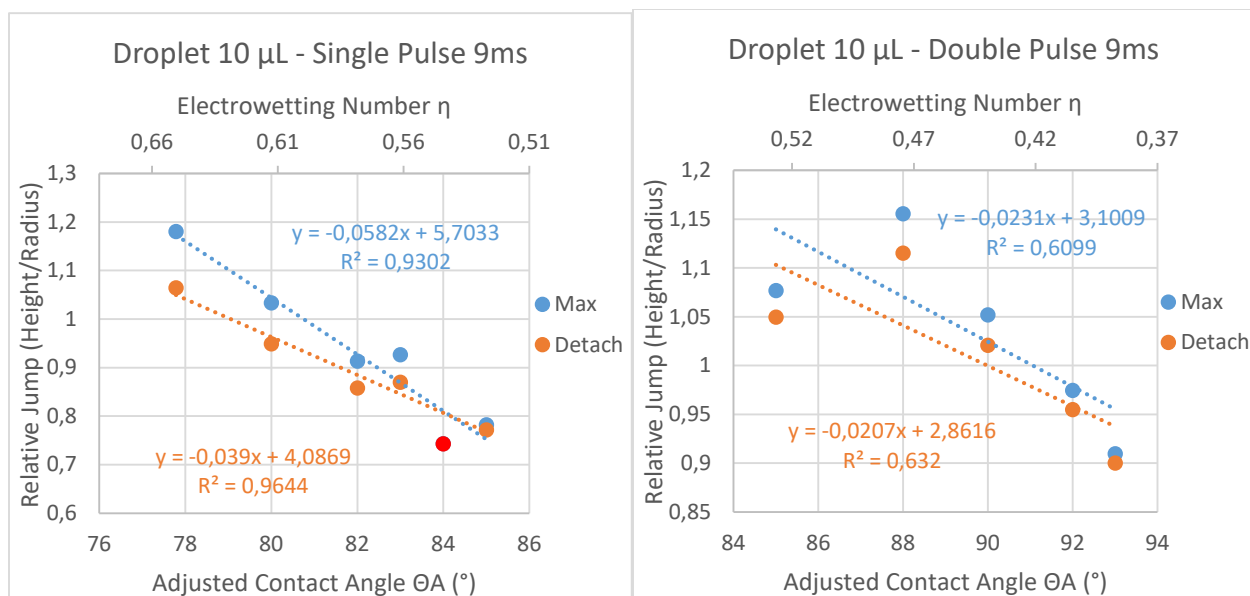
Επίσης, τόσο στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων όσο και στα πειραματικά δεδομένα, η απαιτούμενη τιμή για την αποκόλληση των σταγόνων από το υπόστρωμα φαίνεται να είναι μικρότερη στις περιπτώσεις των διπλών παλμών σε σχέση με αυτές των απλών.

Ακόμα, σημειώνεται ότι οι σταγόνες ανυψώνονται περεταίρω αφού αποκολληθούν από το υπόστρωμα (Μέγιστο ύψος μετά από αποκόλληση > Ύψος κατά την αποκόλληση), ακόμα και μετά τον επαναπροσδιορισμό των απαιτούμενων γωνιών επαφής. Η συμπεριφορά αυτή οφείλεται στο ότι οι οριακές γωνίες επαφής δεν προσδιορίστηκαν επακριβώς, αλλά με ακρίβεια μίας μοίρας (βρέθηκε η μεγαλύτερη ακέραια τιμή της γωνίας που οδηγεί σε αποκόλληση).

Τέλος, έχοντας τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων από όλες τις δοκιμές γωνιών, μπορούμε να μελετήσουμε την εξάρτηση της μέγιστης ανύψωσης του κέντρου μάζας μετά την αποκόλληση και της ανύψωσής του κατά την αποκόλληση των σταγόνων από την τιμή της τροποποιημένης γωνίας επαφής, για κάθε όγκο σταγόνας και κάθε είδος παλμού που εξετάστηκε. Ακολουθούν τα σχετικά διαγράμματα.







Σχήμα 35. Διαγράμματα της σχετικής ανύψωσης (ύψος από κατώτατη θέση / ακτίνα ισοδύναμης σφαιράς) των σταγόνων συναρτήσει της τροποποιημένης γωνίας επαφής. Για κάθε όγκο σταγόνας και κάθε είδος παλμού (απλού ή διπλού), απεικονίζεται η σχετική ανύψωση του κέντρου μάζας της σταγόνας, στην κορυφή του άλματος της σταγόνας μετά την αποκόλλησή της (μπλέ) και κατά την αποκόλλησή της από το έδαφος (πορτοκαλί), συναρτήσει της τροποποιημένης γωνίας επαφής, που προκύπτει μέσω της εφαρμογής των ηλεκτρικών παλμών. Στην κορυφή των διαγραμμάτων παρατίθεται και άξονας με τις τιμές του αριθμού ηλεκτροδιαβροχής, που αντιστοιχούν στις τροποποιημένες γωνίες επαφής του κυρίου οριζοντίου άξονα. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων (κουκίδες) προσεγγίζονται από ευθείες (διακεκομμένες γραμμές). Στην περίπτωση της σταγόνας 10μL που αναπηδά μέσω απλού ηλεκτρικού παλμού, σημειώνεται με κόκκινο το αποτέλεσμα της προσομοίωσης για τροποποιημένη γωνία επαφής 84°, καθώς η σταγόνα δεν αποκολλάται από το υπόστρωμα, παρόλο που αποκολλάται για μεγαλύτερη γωνία επαφής (85°) και άρα μικρότερο αριθμό ηλεκτροδιαβροχής.

Όπως φαίνεται από τα παραπάνω διαγράμματα, στις περιπτώσεις εφαρμογής απλού ηλεκτρικού παλμού, κοντά στην περιοχή της κρίσιμης τροποποιημένης γωνίας επαφής, που οδηγεί στην οριακή αποκόλληση της σταγόνας από το υπόστρωμα, η μέγιστη σχετική ανύψωση μετά την αποκόλληση και η σχετική ανύψωση κατά την αποκόλληση των σταγόνων από το υπόστρωμα, προσεγγίζονται σχετικά καλά από γραμμικές συναρτήσεις (ευθείες) της τροποποιημένης γωνίας επαφής. Οι ευθείες αυτές έχουν αρνητική κλίση και τέμνονται στην κρίσιμη γωνία επαφής, όπου η σταγόνα αποκολλάται οριακά από το έδαφος και δεν ανυψώνεται περαιτέρω. Όσο μικρότερη είναι η τροποποιημένη γωνία επαφής, τόσο μεγαλύτερη είναι η απόκλισή της από την αρχική γωνία Young που σχηματίζεται μεταξύ του υποστρώματος και της σταγόνας (116°). Για αυτόν το λόγο είναι μεγαλύτερος ο αριθμός ηλεκτροδιαβροχής και υψηλότερο το άλμα της σταγόνας, όσο η γωνία επαφής ελαττώνεται.

Κατά την αποκόλληση των σταγόνων μέσω διπλών παλμών δεν παρατηρείται συστηματικά αυτή η γραμμική συμπεριφορά ανάμεσα στο ύψος άλματος και την τιμή της τροποποιημένης γωνίας επαφής.

Στην περίπτωση της εφαρμογής απλού παλμού σε σταγόνα όγκου 10μL, αν και η σταγόνα αποκολλάται από το υπόστρωμα για τροποποιημένη γωνία επαφής ίση με 85°, δεν αποκολλάται για γωνία επαφής 84°. Το γεγονός αυτό οφείλεται στις ταλαντώσεις που πραγματοποιεί η σταγόνα κατά την κίνησή της, οι οποίες, λόγω του σχετικά μεγάλου μεγέθους της σταγόνας έχουν μεγαλύτερο πλάτος και άρα σημαντικότερη επίδραση στην εμφάνιση του φαινομένου της αποκόλλησης. Εφόσον υπάρχει κατάλληλος συντονισμός της σταγόνας με τον ηλεκτρικό παλμό, οι ταλαντώσεις είναι ικανές να τη συγκρατήσουν στο έδαφος, όταν αυτή αιωρείται αρκετά χαμηλά.

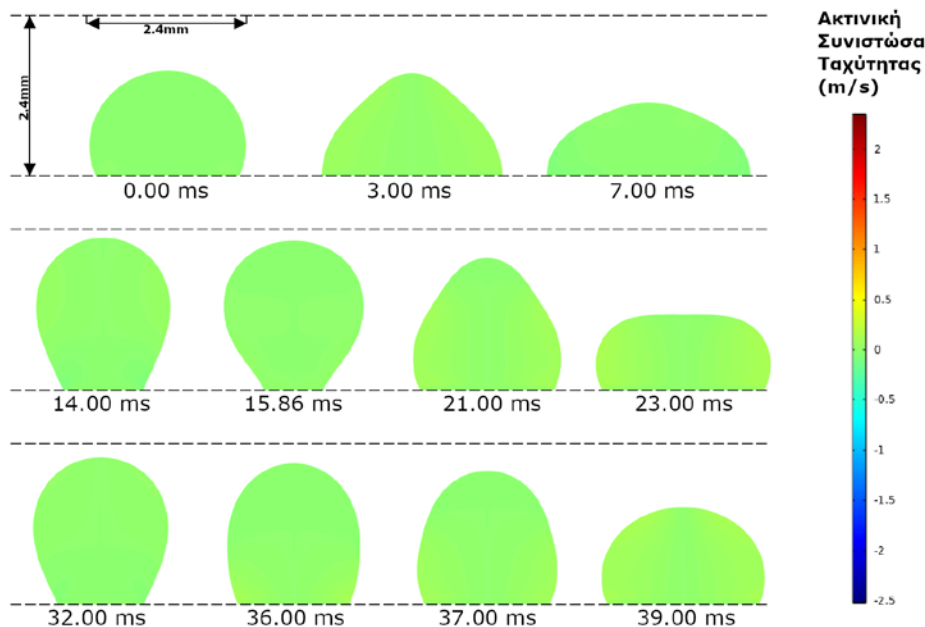
Κεφάλαιο 5: Σύγκριση Επίδρασης της Εφαρμογής Απλού και Διπλού Παλμού

Στο τρίτο και τελευταίο στάδιο της εργασίας, εξετάστηκε μέσω των προσομοιώσεων στο Comsol το εάν οι σταγόνες μπορούν όντως να αποκολληθούν πιο εύκολα στην περίπτωση εφαρμογής διπλού ηλεκτρικού παλμού, σε σχέση με αυτήν του απλού.

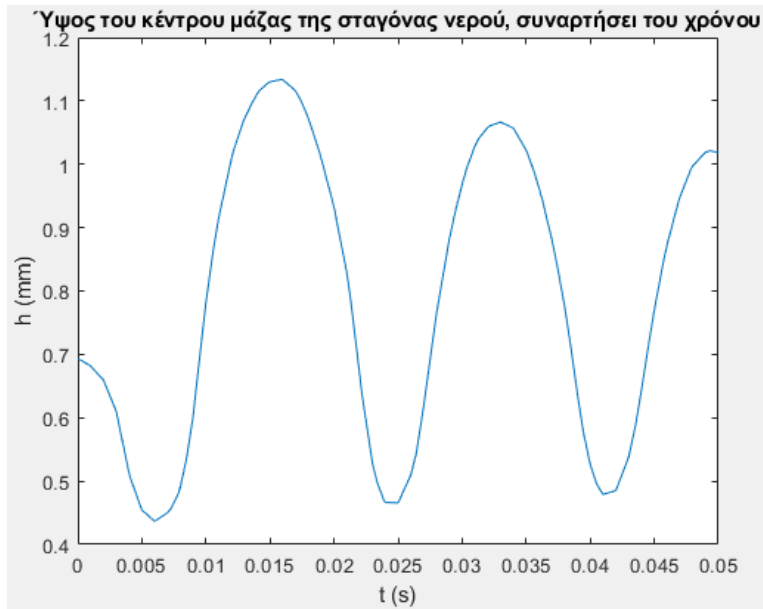
Για το σκοπό αυτό, εκτελέστηκαν δύο προσομοιώσεις ηλεκτροδιαβροχής σταγόνας όγκου 5μL. Στην πρώτη περίπτωση ασκήθηκε στη σταγόνα απλός παλμός αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.46 και διάρκειας 7ms. Στη δεύτερη περίπτωση ασκήθηκε διπλός παλμός με τα ίδια χαρακτηριστικά και περίοδο ίση με 14 ms. Το τελευταίο σενάριο του διπλού παλμού αναφέρεται στη βιβλιογραφία¹ ως οριακή συνθήκη για την αποκόλληση της σταγόνας των 5μL και συμπεριλήφθηκε στο προηγούμενο στάδιο της εργασίας, όπου όντως φάνηκε να αποκολλά τη σταγόνα χωρίς να την ανυψώνει πολύ. Επομένως, αφού ο διπλός παλμός αποκολλά οριακά τη σταγόνα, ο απλός αναμένεται να μην καταφέρνει να την αποκολλήσει. Παρακάτω παρουσιάζονται οι εικόνες του σχήματος των σταγόνων και το ύψος του κέντρου μάζας τους συναρτήσει του χρόνου, για καθένα από τα δύο σενάρια που εξετάστηκαν.

5.1 Εφαρμογή απλού παλμού

Ξεκινώντας με τον απλό παλμό, τα αποτελέσματα είναι τα εξής.



Σχήμα 36. Στιγμιότυπα εξέλιξης της σταγόνας νερού όγκου 5μL, υπό την επίδραση απλού ηλεκτρικού παλμού αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.46 και διάρκειας 7ms. Η προσομοίωση μέσω του Comsol έγινε για αρκετά ψηλή ποιότητα πλέγματος, ίση με 0.35. Είναι εμφανές το σχήμα και η θέση της σταγόνας σε σχέση με την επιφάνεια κάτω από αυτήν, για καθέναν από τους χρόνους που αναγράφονται. Η ακτινική συνιστώσα της ταχύτητας του ρευστού εντός της σταγόνας αποτυπώνεται με βάση την κλίμακα χρωμάτων στα δεξιά της εικόνας.

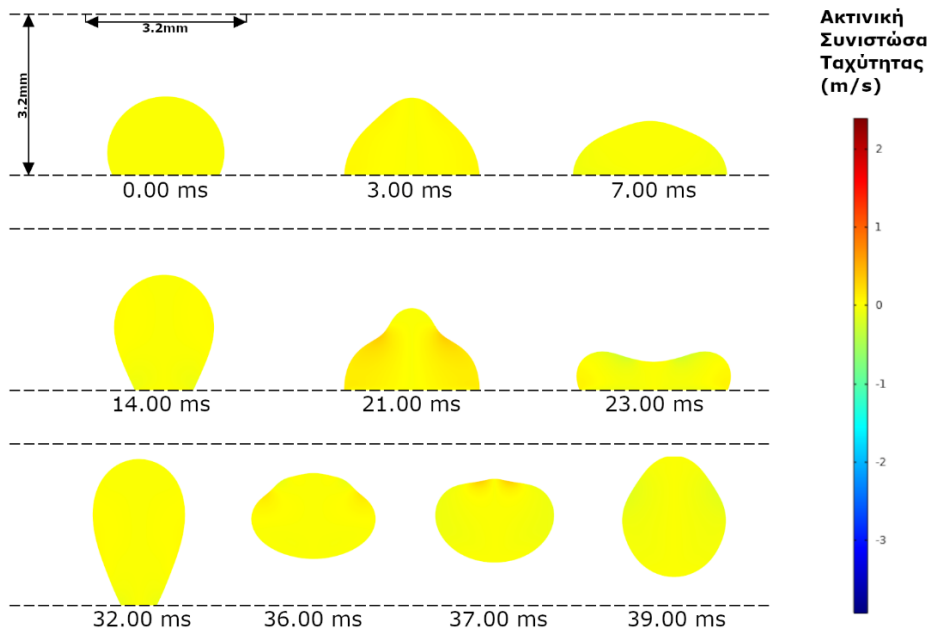


Σχήμα 37. Διάγραμμα του ύψους του κέντρου μάζας της σταγόνας νερού συναρτήσει του χρόνου, για όγκο σταγόνας 5μL και απλό ηλεκτρικό παλμό αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.46 και διάρκειας 7ms.

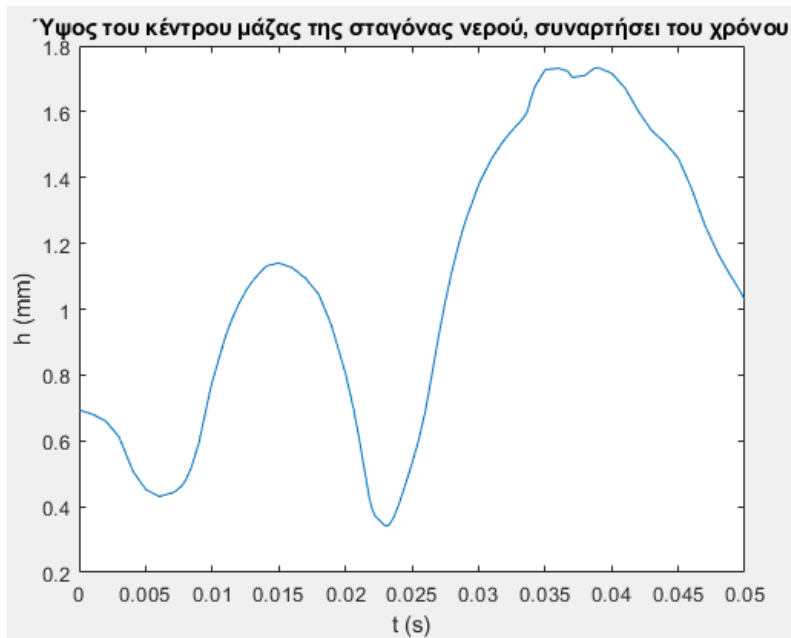
Σύμφωνα με την προσομοίωση, η σταγόνα δεν αποκολλήθηκε από το υπόστρωμα μέσω του απλού παλμού. Το κέντρο μάζας της έφτασε στο μέγιστο ύψος των 1.133698mm στα 15.86ms, και στο ελάχιστο ύψος των 0.436612mm στα 6.00ms.

5.2 Εφαρμογή διπλού παλμού

Συνεχίζοντας με το διπλό παλμό, η σταγόνα συμπεριφέρεται σύμφωνα με τα ακόλουθα σχήματα.



Σχήμα 38. Στιγμιότυπα αναπήδησης της σταγόνας νερού όγκου 5μL, υπό την επίδραση διπλού ηλεκτρικού παλμού αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.46, διάρκειας 7ms και περιόδου 14ms. Η προσομοίωση μέσω του Comsol έγινε για αρκετά ψηλή ποιότητα πλέγματος, ίση με 0.35. Είναι εμφανές το σχήμα και η θέση της σταγόνας σε σχέση με την επιφάνεια κάτω από αυτήν, για καθέναν από τους χρόνους που αναγράφονται. Η ακτινική συνιστώσα της ταχύτητας του ρευστού εντός της σταγόνας αποτυπώνεται με βάση την κλίμακα χρωμάτων στα δεξιά της εικόνας.



Σχήμα 39. Διάγραμμα του ύψους του κέντρου μάζας της σταγόνας νερού συναρτήσει του χρόνου, για όγκο σταγόνας 5μL και διπλό ηλεκτρικό παλμό αριθμού ηλεκτροδιαβροχής 0.46, διάρκειας 7ms και περιόδου 14ms.

Βάσει της προσομοίωσης, προκύπτει ότι μέσω του διπλού παλμού η σταγόνα των 5μL αποκολλάται από το υπόστρωμα. Το κέντρο μάζας της έφτασε στο μέγιστο ύψος των 1.733854mm στα 39.00ms, και στο ελάχιστο ύψος των 0.340904mm στα 23.00ms.

Όπως φάνηκε από τις δύο παραπάνω προσομοιώσεις, ενώ η σταγόνα των 5μL δεν αποκολλάται από το υπόστρωμα στην περίπτωση εφαρμογής του απλού παλμού, όταν εφαρμόζεται διπλός παλμός ίδιου αριθμού ηλεκτροδιαβροχής (και άρα ίδιας τάσης), η σταγόνα αποκολλάται. Το γεγονός αυτό έρχεται σε συμφωνία με τα λεγόμενα της βιβλιογραφίας¹ και τη θεωρία και δείχνει ότι μέσω κατάλληλου συγχρονισμού του εφαρμοζόμενου στο σύστημα ηλεκτρικού παλμού με τη συχνότητα ταλάντωσης της σταγόνας, μπορεί να δοθεί περισσότερη ενέργεια στην τελευταία και να διευκολυνθεί η αποκόλλησή της. Έτσι αποφεύγεται η άσκηση μεγαλύτερης τάσης στο σύστημα σταγόνας – υποστρώματος, η επίτευξη της οποίας μπορεί να είναι δύσκολη (απαίτηση καλύτερης διάταξης ηλεκτροδίων, ισχυρότερης πηγής τάσης κ.α.).

Συμπεράσματα και Προτάσεις για Μελλοντική Έρευνα

Η μέθοδος προσομοίωσης των σταγόνων που χρησιμοποιήθηκε έδωσε ικανοποιητικά αποτελέσματα. Τα προβλεπόμενα από την προσομοίωση σχήματα των σταγόνων κατά τη διέγερσή τους μέσω ηλεκτροδιαβροχής, φάνηκαν να περιγράφουν πολύ καλά τα πραγματικά. Βέβαια, οι υπολογιζόμενες μέσω της προσομοίωσης ανυψώσεις του κέντρου μάζας των σταγόνων βρέθηκαν να απέχουν από αυτές των πειραμάτων της βιβλιογραφίας σε αρκετές περιπτώσεις. Επίσης, σε ορισμένες περιπτώσεις και κυρίως για τις σταγόνες μικρού όγκου (0.4 – 1 μL) οι σταγόνες βρέθηκαν να αποκολλώνται αρκετά πιο εύκολα (σε χαμηλότερους αριθμούς ηλεκτροδιαβροχής) από αυτές της θεωρίας. Όπως προαναφέρθηκε, οι παραπάνω αποκλίσεις μεταξύ των πειραμάτων της βιβλιογραφίας και των προσομοιώσεων, μπορεί να μην οφείλονται σε αδυναμίες του υπολογιστικού μοντέλου, αλλά στην πραγματοποίηση εσφαλμένων μετρήσεων κατά τη διεξαγωγή του φυσικού πειράματος της βιβλιογραφίας, λόγω της ύπαρξης του κατακόρυφου ηλεκτροδίου, το οποίο επηρεάζει τις δυνάμεις συνάφειας μεταξύ της σταγόνας και του υποστρώματος. Ακόμα, μερικά από τα σενάρια – ως επί το πλείστον αυτά στα οποία δίνεται περισσότερη ενέργεια στη σταγόνα από αυτήν που απαιτείται για την αποκόλλησή της – ήταν αδύνατο να προσομοιωθούν, λόγω σχηματισμού μικρότερων σταγόνων που αποκολλώνται από την κύρια μάζα ρευστού και δεν μπορούν να περιγραφούν από τις μεθόδους επίλυσης που χρησιμοποιούνται. Επιπλέον, μέσω των προσομοιώσεων επιβεβαιώθηκε ότι με κατάλληλο συντονισμό μιας σταγόνας (π.χ. μέσω διπλών τετραγωνικών ηλεκτρικών παλμών) μπορεί να γίνει αποδοτικότερη η διεργασία αποκόλλησής της (έχοντας χαμηλότερες απαιτήσεις ως προς την εφαρμοζόμενη τάση).

Ως συνέχεια αυτής της εργασίας, θα μπορούσε στο μέλλον να πραγματοποιηθεί ενεργειακή ανάλυση για μια πιο ολοκληρωμένη σύγκριση μεταξύ της αποκόλλησης της σταγόνας με απλό και με διπλό τετραγωνικό ηλεκτρικό παλμό. Έτσι θα φανεί εάν η χρήση μικρότερης τάσης στην περίπτωση των διπλών παλμών, συνεπάγεται και χαμηλότερη κατανάλωση ενέργειας ή όχι. Επίσης, ενδιαφέρον θα ήταν να εφαρμοστεί, μέσω των προσομοιώσεων, εναλλασσόμενο ηλεκτρικό ρεύμα στο υπόστρωμα κάτω από τις σταγόνες για τον προσδιορισμό των συχνοτήτων συντονισμού τους. Οι συχνότητες αυτές καθορίζουν τη βέλτιστη χρονική διάρκεια εφαρμογής των ηλεκτρικών παλμών, μέσω της οποίας επιτυγχάνεται το μέγιστο άλμα της σταγόνας για δεδομένη τάση. Τέλος, χρήσιμο θα ήταν να κατασκευαστούν σε εργαστηριακό επίπεδο συσκευές, όπως αυτοκαθαριζόμενα τζάμια ή μικρορευστονικά συστήματα μετακίνησης και τοποθέτησης σταγόνων, στα οποία θα εφαρμόζεται η αποκόλληση σταγόνων από επιφάνειες μέσω ηλεκτροδιαβροχής.

Βιβλιογραφία

1. Lee SJ, Hong J, Kang KH, Kang IS, Lee SJ. Electrowetting-Induced Droplet Detachment from Hydrophobic Surfaces. *Langmuir*. 2014;30(7):1805-1811. doi:10.1021/la404344y
2. Palan V, Shepard W. Enhanced water removal in a fuel cell stack by droplet atomization using structural and acoustic excitation. *J Power Sources - J POWER SOURCES*. 2006;159:1061-1070. doi:10.1016/j.jpowsour.2005.12.020
3. Mannelje D, Murade C, Van den Ende D, Mugele F. Electrically assisted drop sliding on inclined planes. *Appl Phys Lett*. 2011;98:014102-014102. doi:10.1063/1.3533362
4. Kim J, Kaviany M. Electrowetting Purged Surface Condensate in Evaporators. *Heat Transf Eng*. 2010;31(2):101-107. doi:10.1080/01457630903285302
5. Pollack MG, Fair RB, Shenderov AD. Electrowetting-based actuation of liquid droplets for microfluidic applications. *Appl Phys Lett*. 2000;77(11):1725-1726. doi:10.1063/1.1308534
6. Cho SK, Moon H, Kim C-J. Creating, transporting, cutting, and merging liquid droplets by electrowetting-based actuation for digital microfluidic circuits. *Microelectromechanical Syst J Of*. 2003;12:70-80. doi:10.1109/JMEMS.2002.807467
7. Abdelgawad M, Freire SLS, Yang H, Wheeler AR. All-terrain droplet actuation. *Lab Chip*. 2008;8(5):672-677. doi:10.1039/B801516C
8. Fair R. Digital microfluidics: Is a true lab-on-a-chip possible? *Microfluid Nanofluidics*. 2007;3:245-281. doi:10.1007/s10404-007-0161-8
9. Yi U-C, Kim C-J "CJ." Soft printing of droplets pre-metered by electrowetting. *Sens Actuators Phys*. 2004;2-3(114):347-354. doi:10.1016/j.sna.2003.12.003
10. Feenstra BJ, Hayes R, Dijk R, et al. Electrowetting-Based Displays: Bringing Microfluidics Alive On-Screen. In: Vol 2006. ; 2006:48-53. doi:10.1109/MEMSYS.2006.1627733
11. Wikipedia P at E. *Example of an Approximately 37,500 Probe Spotted Oligo Microarray with Enlarged Inset to Show Detail.*; 2006. Accessed September 3, 2021. <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Microarray2.gif>
12. Squidonius. *English: Picture Explaining Hybridization.*; 2009. Accessed September 3, 2021. https://commons.wikimedia.org/wiki/File:NA_hybrid.svg
13. Chamakos NT. Design of micro- and nano-structured surfaces with tunable wettability (pHD). School of Chemical Engineering, National Technical University of Athens, Athens, Greece. Published online September 2011. <http://dx.doi.org/10.26240/heal.ntua.2654>
14. Chamakos NT, Sema DG, Papathanasiou AG. Progress in Modeling Wetting Phenomena on Structured Substrates. *Arch Comput Methods Eng*. 2021;28(3):1647-1666. doi:10.1007/s11831-020-09431-3

15. Karapetsas G, Chamakos N, Papathanasiou A. Efficient modelling of droplet dynamics on complex surfaces. *J Phys Condens Matter*. 2016;28:085101. doi:10.1088/0953-8984/28/8/085101
16. Sourais AG, Papathanasiou AG. Modelling of Electrowetting-Induced Droplet Detachment and Jumping over Topographically Micro-Structured Surfaces. *Micromachines*. 2021;12(6):592. doi:10.3390/mi12060592
17. Young T. III. An essay on the cohesion of fluids. *Philos Trans R Soc Lond*. 1805;95:65-87. doi:10.1098/rstl.1805.0005
18. Onda T, Shibuichi S, Satoh N, Tsujii K. Super-Water-Repellent Fractal Surfaces. *Langmuir*. 1996;12(9):2125-2127. doi:10.1021/la950418o
19. Banpurkar AG, Nichols KP, Mugele F. Electrowetting-Based Microdrop Tensiometer. *Langmuir*. 2008;24(19):10549-10551. doi:10.1021/la801549p
20. Mugele F, Duits M, van den Ende D. Electrowetting: A versatile tool for drop manipulation, generation, and characterization. *Adv Colloid Interface Sci*. 2010;161(1):115-123. doi:10.1016/j.cis.2009.11.002
21. Σέμα ΔΓ. Τριδιάστατη προσομοίωση στατικής και δυναμικής διαβρεκτικότητας μικρο- και νανο-δομημένων επιφανειών. Published online 2018.
22. Mesh Element Quality and Size. Accessed October 1, 2021. https://doc.comsol.com/5.5/doc/com.comsol.help.comsol/comsol_ref_mesh.15.18.html