ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΙΙ: ΑΝΑΛΥΣΗΣ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΚΑΙ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

Ψύξη με εξάτμιση μικροσταγόνων

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΤΗΣ **ΚΛΕΪΝΤΑ Γ. ΧΥΣΑ**

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: **Α. ΠΑΠΑΘΑΝΑΣΙΟΥ**

ΑΘΗΝΑ

ΣΕΠΤΕΜΒΡΙΟΣ 2024

Ευχαριστίες

Η ολοκλήρωση της παρούσας διπλωματικής σηματοδοτεί την περάτωση των σπουδών μου στην Σχολή Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου. Σε αυτήν την ιδιαίτερη, για εμένα, στιγμή δεν θα γινόταν να μην ευχαριστήσω τους ανθρώπους που συνέβαλαν καθοριστικά στην εκπλήρωσή της.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της διπλωματικής μου, καθηγητή Αθανάσιο Παπαθανασίου, για την ανάθεση αυτού του ενδιαφέροντος θέματος, την καθοδήγησή του και την ευκαιρία που μου έδωσε να συνεργαστώ με τους ερευνητές στο εργαστήριό του.

Ευχαριστώ θερμά τον Υποψήφιο Διδάκτορα Αλέξανδρο Σουραή, που από την πρώτη στιγμή της συνεργασίας μας με εφοδίασε με τις θεωρητικές και τεχνικές γνώσεις που αφορούσαν την διπλωματική μου. Χωρίς τις συμβουλές του, τις διορθώσεις του και τις λύσεις που μου προσέφερε όταν δυσκολευόμουν, δεν θα υπήρχε αυτό το αποτέλεσμα.

Φυσικά, δεν θα μπορούσα να βρίσκομαι εδώ χωρίς την αμέριστη συμπαράσταση της μητέρας μου, του πατέρα μου και της αδερφής μου. Η αδιάλειπτη συμπαράστασή της οικογένειάς μου τις στιγμές που το είχα ανάγκη, η αποδοχή των επιλογών μου και η γενικότερη στήριξή τους αυτά τα πέντε χρόνια ήταν πολύτιμη για την διαμόρφωσή μου ως άνθρωπο και ως μηχανικό.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους φίλους μου που ήταν δίπλα μου σε όλες τις ευχάριστες και δυσάρεστες στιγμές. Μαζί περάσαμε αμέτρητες ώρες συζητώντας τις ανησυχίες μας, τα άγχη μας και τις χαρές μας και κάθε ένας τους είναι αναπόσπαστο κομμάτι του χαρακτήρα που έχω διαμορφώσει σήμερα. Η στήριξή τους ήταν πάντα η κινητήριος δύναμη για να συνεχίσω.

Περιεχόμενα

Περίληψη **5**

Abstract **7**

Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή **9**

1.1 Στόχοι της εργασίας 10

1.2 Δομή της εργασίας 11

Κεφάλαιο 2: Θεωρητικό μέρος **12**

2.1 Εισαγωγή 12

2.2 Φαινόμενα διαβροχής 13

2.3 Μοντέλα εξάτμισης 14

2.3.1 Σταθερή Γωνία Επαφής (Constant Contact Angle – CCA) 14

2.3.2 Σταθερή Ακτίνα Επαφής (Constant Contact Radius – CCR) 15

2.3.3 Μεικτός Μηχανισμός 15

2.3.4 Σύγκριση ρυθμών εξάτμισης 16

2.4 Φυσικομαθηματικά μοντέλα και συνοριακές συνθήκες 17

2.5 Πίεση Αποκόλλησης 19

2.5 Ροή εντός εξατμιζόμενων σταγόνων - Φαινόμενο Marangoni 20

2.5.1 Φαινόμενο Marangoni και θερμική αγωγιμότητα του υποστρώματος 21

2.6 Τραχύτητα 22

2.6.1 Επιρροή της τραχύτητας στην εξάτμιση 26

2.7 Εξάτμιση σε θερμαινόμενο υπόστρωμα 26

Κεφάλαιο 3: Προσομοίωση της εξάτμισης στο COMSOL Multiphysics® **27**

3.1 Εισαγωγή 27

3.1.1 Εισαγωγή τραχύτητας στην επιφάνεια μέσω της εξίσωσης Eikonal 27

3.1.2 Εναπόθεση και εξάπλωση (spreading) της σταγόνας στο στερεό υπόστρωμα 28

3.1.3 Εξάτμιση της σταγόνας στο στερεό υπόστρωμα 28

Κεφάλαιο 4: Αποτελέσματα Προσομοιώσεων **30**

4.1 Εξάτμιση σε λείες επιφάνειες 30

4.2 Εξάτμιση σε τραχεία επιφάνεια και σύγκριση με την λεία 34

4.3 Ψύξη λόγω της Εξάτμισης 39

4.4 Προσομοίωση εξάτμισης για μεταβαλλόμενες τιμές του λόγου k_R 41

4.5 Σύγκριση αποτελεσμάτων των τριών προσομοιώσεων μεταβαλλόμενου λόγου k_R 51
4.6 Προσομοίωση εξάτμισης σε τραχεία επιφάνεια με θερμαινόμενο υπόστρωμα 53
Κεφάλαιο 5: Συμπεράσματα και Μελλοντική Έρευνα..... 56
Βιβλιογραφία..... 58

Περίληψη

Η εξάτμιση μικροσταγόνων είναι ένα φαινόμενο που επιτελεί κρίσιμο ρόλο σε πολλές επιστημονικές και βιομηχανικές εφαρμογές όπως η ψύξη επιφανειών. Η εργασία επικεντρώνεται στην υπολογιστική μοντελοποίηση των συζευγμένων μηχανισμών που διέπουν την εξάτμιση σταγόνων, δίνοντας βαρύτητα στην διαβρεκτικότητα της επιφάνειας και τα φαινόμενα μεταφοράς θερμότητας και μάζας. Σημαντικό σημείο της διερεύνησης ήταν η ψυκτική ικανότητα της εξατμιζόμενης σταγόνας, η οποία είναι κρίσιμο μέγεθος σε τομείς όπως η ψύξη ηλεκτρονικών, όπου είναι αναγκαία η προστασία των ευαίσθητων εξαρτημάτων από την υψηλή θερμοκρασία.

Οι υπολογιστικές προσομοιώσεις εκτελέστηκαν στο εμπορικό λογισμικό πεπερασμένων στοιχείων COMSOL Multiphysics®. Εξετάστηκε η εξάτμιση τόσο σε λείες όσο και τραχείες επιφάνειες.

Τα κυριότερα μεγέθη που εξετάζονται είναι η μεταβολή της φαινόμενης γωνίας επαφής, η θέση της τριφασικής γραμμής επαφής της σταγόνας, η θερμοκρασία τόσο της σταγόνας όσο και της στερεής επιφάνειας, η ταχύτητα εντός του ρευστού μαζί με τις ανακυκλοφορίες και η ψύξη που προκαλείται στο υπόστρωμα.

Η προσομοίωση της εξάτμισης των σταγόνων σε αυτές τις επιφάνειες δίνει την δυνατότητα να μελετηθεί το πώς η τραχύτητας τη επιφάνειας, η διαβρεκτικότητα και η βαθμίδα της θερμοκρασίας επιδρούν στον ρυθμό της εξάτμισης και την συμπεριφορά της γραμμής επαφής υγρού-στερεού-αέρα (τριφασικής γραμμής επαφής) της εξατμιζόμενης σταγόνας. **Σε λείες επιφάνειες, ο ρυθμός εξάτμισης παρουσιάζεται βραδύτερος σε σχέση με τις τραχείες, στις οποίες διατηρείται σταθερή η ακτίνα επαφής μεταξύ στερεού και υγρού.**

Παράλληλα, μελετάται ο ρόλος του φαινομένου Marangoni, η εκδήλωση του οποίου οφείλεται σε βαθμίδα επιφανειακής τάσης, προερχόμενη από την θερμοκρασία των επιμέρους περιοχών του υγρού. Η βαθμίδα της θερμοκρασίας, και κατά συνέπεια της επιφανειακής τάσης, ωθεί στην ανάπτυξη ανακυκλοφοριών εντός του ρευστού και επηρεάζει την διαδικασία της εξάτμισης. Η παραμετρική ανάλυση της ροής Marangoni γίνεται μέσω της επίδρασης των διαφορετικών λόγων θερμικής αγωγιμότητας στερεού (k_s) προς αυτήν του υγρού (k_l). Παρατηρούνται τα κρίσιμα μεγέθη που χαρακτηρίζουν τον κάθε λόγο αγωγιμοτήτων και επιβεβαιώνεται με την θεωρία πως για λόγο θερμικών αγωγιμοτήτων $k_R < 1.45$, η ροή αντιστρέφεται όταν η φαινόμενη γωνία επαφής λάβει την τιμή των 31°. Στις τρεις παραμετροποιήσεις υπολογίστηκαν οι αντίστοιχοι ρυθμοί εξάτμισης και διαπιστώθηκε πως στην επιφάνεια με τον μεγαλύτερο λόγο k_R (επιφάνεια από τιτάνιο) η ρυθμός εξάτμισης ήταν κατά 36% μεγαλύτερος από ότι στην επιφάνεια από τεφλόν (μικρότερος λόγος θερμικών αγωγιμοτήτων στερεού προς υγρού). Στην ίδια προσομοίωση υπολογίστηκε και ο ρυθμός απαγωγής θερμότητας από το στερεό και βρέθηκε πως στο τιτάνιο ο ρυθμός ήταν κατά 40% μεγαλύτερος από αυτόν του τεφλόν. Τέλος, μελετήθηκε το βάθος ψύξης του υποστρώματος εξαιτίας της εξάτμισης και διαπιστώθηκε πως η ψύξη που επιτεύχθηκε στο

υπόστρωμα με την μικρότερη θερμική αγωγιμότητα διείσδυσε σε μεγαλύτερο βάθος, συγκριτικά με την επιφανειακή ψύξη που υπολογιζόταν στις περισσότερο αγώγιμες επιφάνειες.

Τέλος, η εργασία διερευνά την επίδραση της εισαγωγής θερμαινόμενου υποστρώματος κάτω από την σταγόνα, μία συνθήκη που αυξάνει τον ρυθμό εξάτμισης και οδηγεί σε ταχύτερη ολοκλήρωση της εξάτμισης. Εξετάστηκαν δύο διαφορετικές θερμοκρασίες υποστρώματος: 10°C και 30°C πάνω από την θερμοκρασία του περιβάλλοντος. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι όταν η θερμοκρασία αυξήθηκε κατά 30°C πάνω από αυτήν του περιβάλλοντος, ο ρυθμός εξάτμισης της σταγόνας ήταν σημαντικά υψηλότερος ($51 \cdot 10^{-4}\ kg/m^2 s$) σε σχέση με την περίπτωση που το υπόστρωμα θερμαινόταν κατά 10°C ($12.7 \cdot 10^{-4}\ kg/m^2 s$). Επιπλέον, υπολογίστηκε και ο ρυθμός απαγωγής θερμότητας από το στερεό υπόστρωμα στην κάθε περίπτωση, και βρέθηκε ίσος με $11.7 \cdot 10^{-3}\ W$ και $6.1 \cdot 10^{-3}\ W$ αντίστοιχα. Τα αποτελέσματα που ελήφθησαν από την αύξηση των 10°C είναι παραπλήσια με αυτά από την μελέτη χωρίς θερμοκρασιακή επιβολή στο υπόστρωμα και διαπιστώθηκε πως η μονωτική ιδιότητα του υλικού του υποστρώματος δεν επιτρέπει την παρατήρηση έντονων φαινομένων μεταφοράς θερμότητας για μικρές θερμοκρασιακές επιβολές.

Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων είναι συμβατά με τα συμπεράσματα που έχουν προκύψει από την βιβλιογραφία, καταδεικνύοντας την αποτελεσματικότητα του μοντέλου να προβλέψει την συμπεριφορά της σταγόνας, καθιστώντας την μεθοδολογία που ακολουθήθηκε ένα πολύτιμο εργαλείο για την μελέτη της εξάτμισης σταγόνων σε πρακτικές εφαρμογές.

Λέξεις κλειδιά: Εξάτμιση μικροσταγόνων, διαβρεκτικότητα, ψύξη λόγω εξάτμισης, τριφασική γραμμή επαφής, γωνία επαφής, τραχύτητα, υδρόφοβη επιφάνεια, υδρόφιλη επιφάνεια, πίεση αποκόλλησης, μοντέλα εξάτμισης, φαινόμενο Marangoni, ανακυκλοφορία, θερμική αγωγιμότητα, λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης, COMSOL Multiphysics®, MATLAB®, θερμαινόμενο υπόστρωμα, ρυθμός εξάτμισης, ρυθμός θερμικής απαγωγής.

Abstract

Microdroplet evaporation is a phenomenon that plays a critical role in many scientific and industrial applications such as surface cooling. This work focuses on the computational modelling of the coupled mechanisms governing droplet evaporation, with emphasis on surface wettability and heat and mass transfer phenomena. An important point of investigation was the cooling capacity of the evaporating droplet, which is a critical parameter in areas such as electronics cooling, where it is necessary to protect sensitive components from high temperature.

The computational simulations were performed in the commercial finite element software COMSOL Multiphysics®. Evaporation on both smooth and rough surfaces was considered.

The main quantities considered are the variation of the apparent contact angle, the position of the three-phase drop contact line, the temperature of both the drop and the solid surface, the velocity within the fluid together with recirculations and the cooling induced in the substrate.

The simulation of droplet evaporation on these surfaces allows to study how surface roughness, wettability and temperature gradient affect the evaporation rate and the behaviour of the liquid-solid-air contact line (triple-phase contact line) of the evaporating droplet. **On smooth surfaces, the evaporation rate is slower than on rough surfaces, where the solid-liquid contact radius is kept constant**.

At the same time, the role of the Marangoni effect is studied, the manifestation of which is due to a surface tension gradient, derived from the temperature of individual regions of the liquid. The temperature gradient, and consequently the surface tension, induces the development of recirculations within the fluid and influences the evaporation process. The parametric analysis of the Marangoni flow is carried out through the effect of different ratios of solid thermal conductivity (k_s) to that of the liquid (k_l). The critical quantities characterizing each thermal conductivity ratio are observed and it is confirmed by theory that for a thermal conductivity ratio $k_R < 1.45$, the flow is reversed when the apparent contact angle takes the value of 31°. In the three parameterizations, the corresponding evaporation rates were calculated and it was found that on the surface with the highest k_R ratio (titanium surface) the evaporation rate was 36% higher than on the Teflon surface (lower ratio of thermal conductivities of solid to liquid). In the same simulation, the heat removal rate from the solid was also calculated and it was found that in titanium the rate was 40% higher than that of Teflon. Finally, the depth of substrate cooling due to evaporation was studied and it was found that the cooling achieved on the substrate with the lowest thermal conductivity penetrated to a greater depth, compared to the surface cooling calculated on the more conductive surfaces.

Finally, the paper investigates the effect of introducing a heated substrate under the drop, a condition that increases the evaporation rate and leads to faster evaporation completion. Two different substrate temperatures were considered: 10°C and 30°C above ambient temperature. The

results showed that when the temperature was increased by 30°C above ambient, the droplet evaporation rate was significantly higher ($51 \cdot 10^{-4}\ kg/m^2 s$) than when the substrate was heated by 10°C ($12.7 \cdot 10^{-4}\ kg/m^2 s$). In addition, the heat dissipation rate from the solid substrate was also calculated in each case, and was found to be equal to $11.7 \cdot 10^{-3}\ W$ and $6.1 \cdot 10^{-3}\ W$ respectively. The results obtained from the 10°C increase are similar to those obtained from the study without temperature imposition on the substrate, and it was found that the insulating property of the substrate material does not allow the observation of strong heat transfer phenomena for small temperature imposition.

The simulation results are consistent with the conclusions drawn from the literature, demonstrating the effectiveness of the model to predict the droplet behaviour, making the methodology followed a valuable tool for the study of droplet evaporation in practical applications.

Key words: Microdroplet evaporation, wettability, evaporative cooling, Triple Phase contact Line (TPL), contact angle, roughness, hydrophobic surface, hydrophilic surface, disjoining pressure, evaporation modes, Marangoni effect, recirculation, thermal conductivity, latent heat of evaporation, COMSOL Multiphysics®, MATLAB®, heated surfaces, evaporation rate, heat dissipation rate.

Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή

Η εξάτμιση σταγόνων είναι ένα θεμελιώδες φαινόμενο όπου μια επικαθήμενη σταγόνα σταδιακά συρρικνώνεται λόγω αλλαγής φάσης. Η κινούσα δύναμη για την εκδήλωση του φαινομένου είναι η διαφορά συγκέντρωσης ατμών πάνω από την επιφάνειάς της.[1,15] Η εξάτμιση διέπεται από συζευγμένα φαινόμενα μεταφοράς θερμότητας και μάζας, από την δυναμική της ίδιας της σταγόνας, όπως το μέγεθος και τη διαβρεκτικότητά της, την επιφάνεια που επικάθεται και περιβαλλοντικές συνθήκες. Όσο το υγρό εξατμίζεται, μετατρέπεται σε ατμό που διαχέεται στον περιβάλλοντα αέρα και ο ρυθμός εξάτμισής του εξαρτάται από την υγρασία του περιβάλλοντος και την θερμοκρασία του υγρού και του υποστρώματος.[1] Η πολυπλοκότητα και η σύζευξη όλων αυτών των φαινομένων και μηχανισμών καθιστούν την εξάτμιση σταγόνων ένα αντικείμενο με αυξημένο ερευνητικό ενδιαφέρον.

Η εξάτμιση σταγόνων αξιοποιείται σε ένα ευρύ φάσμα φυσικών και βιομηχανικών διεργασιών. Χρησιμοποιείται εκτενώς στην τεχνολογία εκτύπωσης με ψεκασμό μελάνης (Inkjet) για την απόθεση μίκρο- και νανοσωματιδίων, ώστε να σχηματιστούν επιθυμητά μοτίβα σε υποστρώματα.[1,2] Αυτή η τεχνική βρίσκει εφαρμογή σε εκτυπωτές για γραφικά υψηλής ανάλυσης και σε βιομηχανικές εκτυπωτικές διαδικασίες, όπως λόγου χάρη στην εκτύπωση ελεγχόμενου αγώγιμου δικτύου πάνω σε μία επιφάνεια.[1,2]

Στην ιατρική διάγνωση, στην δημιουργία chip DNA αλλά και στην βιοτεχνολογία, η εξάτμιση σταγόνων έχει συνεισφέρει στην απλούστερη αποκάλυψη ασθενειών, στην ανάλυση της γενετικής πληροφορίας και στην ακριβή απόθεση μορίων πρωτεϊνών.[4,3] Παράλληλα, συνδέεται με ενδιαφέροντα φαινόμενα της καθημερινότητας όπως το coffee ring effect που εμφανίζεται όταν μία σταγόνα υγρού, που περιέχει στερεά μικροσωματίδια (όπως για παράδειγμα οι κόκκοι του καφέ) στεγνώνει σε μία επιφάνεια, αφήνοντας πίσω της ένα σχήμα όμοιο με δακτύλιο, με ακτίνα που ταυτίζεται με την ακτίνα διαβροχής της σταγόνας. Αυτό οφείλεται σε δύο συνυπάρχοντες μηχανισμούς. Ο πρώτος αφορά σε τριχοειδείς ροές που εμφανίζονται κατά την εξάτμιση και ο δεύτερος αφορά την προσκόλληση (pinning) των μη εξατμιζόμενων στερεών σωματιδίων στην περιφέρεια της σταγόνας.[5]

Ένα βασικό χαρακτηριστικό της εξάτμισης είναι η ψύξη λόγω ενθαλπίας εξάτμισης. Καθώς μία σταγόνα εξατμίζεται, μόρια με μεγαλύτερη κινητική ενέργεια διαφεύγουν από την υγρή φάση, μειώνοντας την συνολική θερμοκρασία από το υπόλοιπο υγρό. Η διαδικασία αυτή απαιτεί την απορρόφηση λανθάνουσας θερμότητας από το περιβάλλον, που, τελικά, προκαλεί την ψύξη του.[15] Η ψύξη μέσω εξάτμισης βρίσκει πολλές πρακτικές εφαρμογές. Για παράδειγμα, στην ψύξη μικροηλεκτρονικών, η ψύξη μέσω εξάτμισης αποτρέπει την υπερθέρμανση ευαίσθητων εξαρτημάτων, απάγοντας την παραγόμενη θερμότητα από την επιφάνεια προς το περιβάλλον. Σε συστήματα ηλεκτρικών εξαρτημάτων υψηλής ισχύος, όπως είναι οι επεξεργαστές και τα τσιπ, η ψύξη τους μέσω του φαινομένου της εξάτμισης είναι πολλά υποσχόμενη.[15,16] Παράλληλα, σε

συστήματα λέιζερ και συστήματα μετατροπής ενέργειας, τα οποία βασίζονται στην εξάτμιση μικροσταγόνων, επωφελούνται από τον ακριβή θερμοκρασιακό έλεγχο.[16]

Η ψύξης μέσω εξάτμισης σταγόνων πραγματοποιείται με την τεχνική ψεκασμού, η οποία προσφέρει την δυνατότητα να αφαιρεί ομοιόμορφα μεγάλα ποσά θερμότητας, χρησιμοποιώντας μικρούς όγκους υγρού. Παράλληλα, η τεχνική αυτή, εκμεταλλευόμενη την μεγάλη λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης του νερού, αξιοποιώντας χαμηλές ταχύτητες κρούσης σταγονιδίων, παρέχει τον βέλτιστο έλεγχο της θερμοκρασίας του συστήματος.[17] Η παραπάνω εφαρμογή έχει ως αποτέλεσμα την διατήρηση της απόδοσης του εξοπλισμού, την συντήρησή του και την μεγαλύτερης διάρκειας ζωής, εξασφαλίζοντας την προστασία ανθρωπίνου δυναμικού και πόρων.[3]

Η ποικιλία εφαρμογών της εξάτμισης σταγόνων, σε συνδυασμό με την πολυπλοκότητα των συζευγμένων φυσικών μηχανισμών που καθορίζουν την εξέλιξη του φαινομένου, αποτελεί κίνητρο για την ανάπτυξη μαθηματικών μοντέλων και την αξιοποίηση υπολογιστικών εργαλείων εστιάζοντας στην εξάρτηση από τη γεωμετρία, το υπόστρωμα στο οποίο εναποτίθεται η σταγόνα αλλά και στις μεταβαλλόμενες συνθήκες που επηρεάζουν το πρόβλημα.

1.1 Στόχοι της εργασίας

Ο κύριος στόχος της παρούσας εργασίας είναι η διερεύνηση των μηχανισμών εξάτμισης μικροσταγόνων σε διάφορες επιφάνειες μέσω υπολογιστικής προσομοίωσης στο λογισμικό COMSOL® και η ανάλυση των φαινόμενων που εμπλέκονται σε αυτήν, με έμφαση στα φαινόμενα μεταφοράς θερμότητας. Οι επιμέρους στόχοι των παραμετρικών προσομοιώσεων περιλαμβάνουν:

1. Την κατανόηση των φαινομένων διαβροχής. Τα φαινόμενα διαβροχή είναι η βάση της μελέτης των μικροσταγόνων. Η ανάλυση της αλληλεπίδρασης των σταγόνων με λείες και τραχείες επιφάνειες και η διερεύνηση της γωνίας επαφής ήταν τα αντικείμενα μελέτης.
2. Την μοντελοποίηση και την προσομοίωση της εξάτμισης. Η εισαγωγή των μαθηματικών και φυσικών μοντέλων που περιγράφουν το φαινόμενο στο λογισμικό και η επίλυση των εξισώσεων μεταφοράς μάζας και θερμότητας.
3. Την εξέταση της επίδρασης της τραχύτητας στην εξάτμιση. Με ποιον μηχανισμό εξατμίζεται μία σταγόνα σε μία λεία και μία στερεή επιφάνεια και σύγκριση των δύο αναλύσεων. Επίδραση τραχύτητας στην συμπεριφορά της γραμμής επαφής.
4. Την διερεύνηση του φαινομένου Marangoni. Μελέτη των συνθηκών δημιουργίας των ανακυκλοφοριών και επιρροή τους από την βαθμίδα θερμοκρασίας και επιφανειακής τάσης.
5. Την επιρροή της θερμικής αγωγιμότητας στις ανακυκλοφορίες. Παραμετρική ανάλυση διαφορετικών αγωγιμοτήτων υποστρωμάτων.
6. Την συμπεριφορά της εξατμιζόμενης σταγόνας, όταν η επιφάνεια επαφής είναι θερμαινόμενη.

7. Την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων και την επαλήθευσή τους με την βιβλιογραφία.

1.2 Δομή της εργασίας

Η παρούσα εργασία διαρθρώνεται στα εξής βασικά τμήματα:

- **Εισαγωγή**: Παρουσιάζεται η σημασία της εξάτμισης των σταγόνων σε καθημερινές πρακτικές εφαρμογές αλλά και σύγχρονες τεχνολογίες και παρουσιάζονται οι βασικές θεματικές της εργασίας.
- **Θεωρητικό υπόβαθρο**: Παρουσιάζονται και αναλύονται τα βασικά φαινόμενα που διέπουν την εξάτμιση των σταγόνων και οι φυσικοί μηχανισμοί που εμπλέκονται. Αποτυπώνονται οι μαθηματικές εξισώσεις και οι συνοριακές συνθήκες του προβλήματος.
- **Προσομοίωση της εξάτμισης στο COMSOL**: Περιγράφεται η διαδικασία προσομοίωσης όλων των σύνθετων φαινομένων στο λογισμικό και οι βασικότερες τιμές των παραμέτρων που εισήχθησαν.
- **Ανάλυση και Σχολιασμός Αποτελεσμάτων Προσομοιώσεων**: Παρουσιάζονται τα αποτελέσματα όλων των προσομοιώσεων που εκτελέστηκαν και ο σχολιασμός των παρατηρήσεων. Τα αποτελέσματα συγκρίνονται με την βιβλιογραφία για την αξιολόγηση της αποτελεσματικότητας του μοντέλου.
- **Συμπεράσματα και Μελλοντική Έρευνα**: Συνοψίζονται τα ευρήματα της έρευνας και προτείνονται κατευθυντήριες συστάσεις για μελλοντικές βελτιώσεις.

Κεφάλαιο 2: Θεωρητικό μέρος

2.1 Εισαγωγή

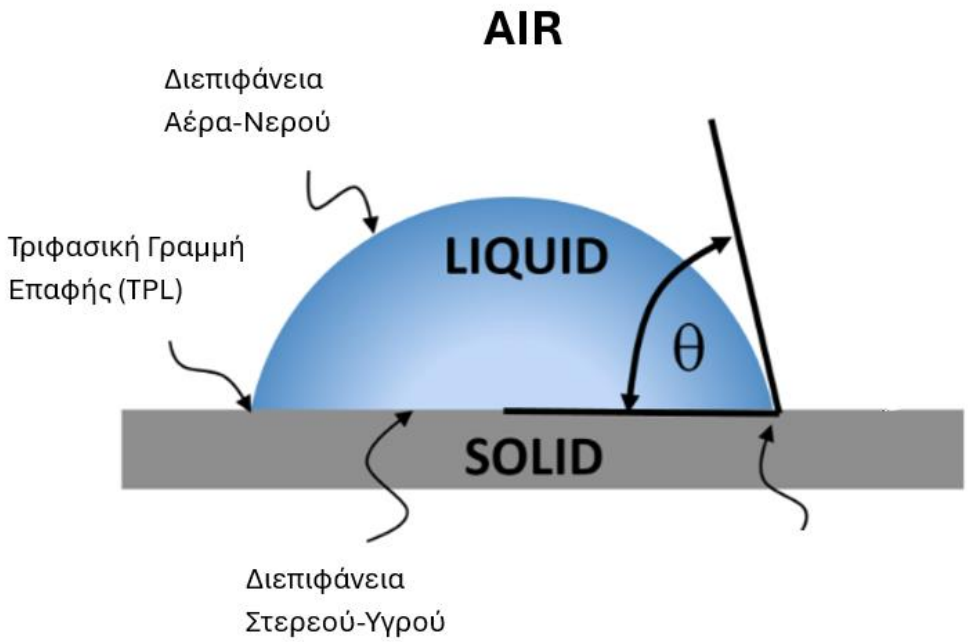
Όπως αναφέρθηκε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, παρόλο που η εξάτμιση των σταγόνων είναι ένα πολύ σύνηθες φαινόμενο, η κατανόηση του είναι πολυδιάστατη. Η συνύπαρξη πολλών και σύνθετων ανταγωνιστικών μηχανισμών, η αλληλεπίδραση φαινομένων διαβροχής και τριχοειδών φαινομένων, η ύπαρξη τριών φάσεων και οι μηχανισμοί μεταφοράς θερμότητας και μάζας θα αναλυθούν παρακάτω. Για να είναι δυνατή η πλήρης μαθηματική περιγραφή του φαινομένου, χρειάζεται πρώτα η κατανόηση των μηχανισμών και η καταγραφή όλων των εξισώσεων που το διέπουν, αφού πρώτα ληφθούν όλες οι απαραίτητες παραδοχές. Αυτές είναι:

- Αξονική συμμετρία: Το πρόβλημα της εξάτμισης της σταγόνας θεωρείται αξονοσυμμετρικό ως προς τον κατακόρυφο άξονα $(z = 0)$, και ως εκ τούτου μελετάται και προσομοιώνεται κατά αυτόν τον τρόπο. Η παραδοχή αυτή απλοποιεί το πρόβλημα σε δύο διαστάσεις, περιορίζοντας, παράλληλα, το υπολογιστικό κόστος.
- Ασυμπίεστη και στρωτή ροή: Η ροή τόσο στην υγρή όσο και στην αέρια φάση θεωρείται ασυμπίεστη και στρωτή, εξαιτίας των χαμηλών ταχυτήτων που αναπτύσσονται.
- Το ρευστό που εξατμίζεται από την σταγόνα και μεταφέρεται στην αέρια φάση έχει αρκετά μικρή συγκέντρωση ώστε να μην θεωρείται ικανό να μεταβάλλει τις φυσικοχημικές ιδιότητες του αέρα. Ο αέρας που περιβάλλει την σταγόνα έχει χαμηλό ποσοστό υγρασίας και ο ατμός που προέρχεται από την εξάτμιση της σταγόνας δεν θεωρείται πως επηρεάζει αυτό το ποσοστό σε μεγάλη απόσταση από την σταγόνα.[6]
- Η τραχύτητα της επιφάνειας αντιμετωπίζεται ως ένα πλήθος αξονοσυμμετρικών δακτυλίων τυχαίου ύψους και πλάτους και όχι ως τυχαία τραχύτητα στις 3 διαστάσεις λόγω της παραδοχής αξονικής συμμετρίας. Η πλήρης μοντελοποίηση εξάτμισης σταγόνων σε επιφάνειες με ρεαλιστική τραχύτητα στις τρεις διαστάσεις και διάσταση από μερικά νανόμετρα έως και μικρόμετρα αυξάνει δυσανάλογα το υπολογιστικό κόστος και απαιτεί μεθόδους μοντελοποίησης πολλαπλών χωρικών κλιμάκων που υπερβαίνει τους στόχους της παρούσας διπλωματικής εργασίας.[6,7]
- Το υπολογιστικό χωρίο όπου πραγματοποιείται η εξάτμιση έχει πολύ μεγάλη διάσταση συγκριτικά με την ακτίνα της σταγόνας, η οποία είναι και το χαρακτηριστικό μέγεθος του προβλήματος.
- Θερμοεξαρτώμενες ιδιότητες: Οι φυσικές και θερμοδυναμικές ιδιότητες του νερού και του αέρα θεωρούνται εξαρτημένες από την θερμοκρασία. Οι ιδιότητες αυτές είναι η πυκνότητα, το ιξώδες, η θερμική αγωγιμότητα, η ειδική θερμοχωρητικότητα και η ειδική ενθαλπία εξάτμισης και υπολογίζονται από τις βιβλιοθήκες δεδομένων του COMSOL Multiphysics®.

2.2 Φαινόμενα διαβροχής

Τα φαινόμενα διαβροχής θεμελιώνουν την κατανόηση της αλληλεπίδρασης υγρών με στερεές επιφάνειες. Αυτή η αλληλεπίδραση είναι καθοριστική για ένα πολύ μεγάλο εύρος φυσικών και βιομηχανικών εφαρμογών. Παρακάτω ακολουθεί η θερμοδυναμική θεμελίωση των φαινομένων διαβροχής και η κατάταξη των επιφανειών ανάλογα με την γωνία που σχηματίζει το σύστημα σταγόνα-επιφάνεια.

Το σύνορο στο οποίο η υγρή, στερεή και αέρια φάση συναντώνται ονομάζεται τριφασική γραμμή επαφής. Για απλοποίηση, παρακάτω η τριφασική γραμμή επαφής θα χαρακτηρίζεται ως "TPL", από την αγγλική της ονομασία Triple Phase contact Line. Η συμπεριφορά της TPL είναι κρίσιμη για την κατανόηση της εξάτμισης σταγόνων, καθώς επηρεάζει τα διαβρεκτικά και τριχοειδή φαινόμενα και την μεταφορά μάζας. Κατά την διάρκεια της εξάτμισης, η κίνηση ή το «κόλλημα» της TPL ακολουθεί ορισμένους μηχανισμούς, ανάλογα με την επιφάνεια που έχει χρησιμοποιηθεί, και θα εξηγηθούν στην επόμενη ενότητα.[6]



Εικόνα 1. Υγρή σταγόνα πάνω σε στερεή επιφάνεια. Τα σώματα περιβάλλονται από αέρα και απεικονίζεται η Τριφασική Γραμμή Επαφής (TPL) όπου συναντώνται και οι τρεις φάσεις.

Όταν μία σταγόνα τοποθετείται και ισορροπεί πάνω σε μία στερεή επιφάνεια, σχηματίζεται μία σφαιρική τομή, με γωνία επαφής θ_γ. Ο Young εισήγαγε την έννοια της γωνίας επαφής ισορροπίας με την παρακάτω εξίσωση, η οποία έλαβε το όνομα του, και διατυπώνεται ως εξής:

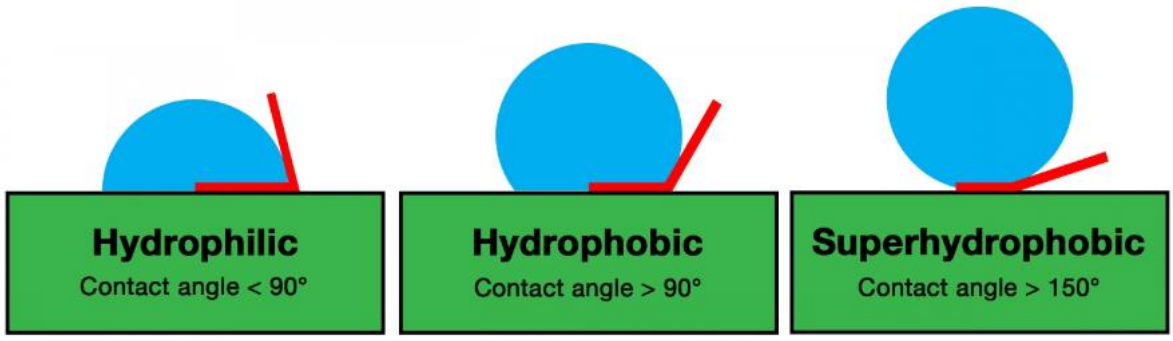
$$\gamma_{sg} = \gamma_{ls} + \gamma_{lg} cos\theta_\gamma \quad (2.1)$$

Όπου γ_{sg} η διεπιφανειακή τάση μεταξύ στερεού και αέρα, γ_{ls} μεταξύ υγρού και στερεού και γ_{lg} μεταξύ υγρού και αέρα.

Η εξίσωση Young συνδέει την γωνία επαφής με τις διεπιφανειακές τάσεις, ανά δύο, μεταξύ των επιφανειών και περιγράφει την τιμή της γωνίας επαφής στην οποία η σταγόνα ισορροπεί πάνω σε λεία στερεή επιφάνεια.

Όταν η γωνία Young λαμβάνει τιμές από 0° έως 90° και το εξεταζόμενο υγρό είναι νερό, η στερεή επιφάνεια αποκαλείται υδρόφιλη, ενώ όταν υπερβαίνει τις 90° αποκαλείται υδρόφοβη. Πρακτικά, οι συνήθεις υδρόφοβες επιφάνειες δεν εμφανίζουν γωνία επαφής μεγαλύτερη από 120°. Ωστόσο, σε επιφάνειες με ιεραρχική τραχύτητα σε πολλαπλές κλίμακες[6] μπορεί να παρατηρηθεί γωνία επαφής μεγαλύτερη από 150°. Αυτή η ιδιαίτερη κατηγορία επιφανειών χαρακτηρίζεται ως υπερυδρόφοβη.[8]

Παρακάτω, παρουσιάζονται απεικονίσεις της ισορροπίας σταγόνων στις επιφάνειες που αναφέρθηκαν.



Εικόνα 2. Απεικόνιση διαφορετικών τύπων υδροφιλικότητας. Από αριστερά προς τα δεξιά: Υδρόφιλη, υδρόφοβη και υπερυδρόφοβη επιφάνεια.[9]

2.3 Μοντέλα εξάτμισης

Οι Picknett και Bexon το 1977 κατέταξαν την εξάτμιση επικαθήμενων σταγόνων σε 3 βασικές κατηγορίες-μηχανισμούς με κριτήριο την χρονική εξέλιξη της θέσης της τριφασικής γραμμής επαφής κατά τη διάρκεια της εξάτμισης.[6] Οι τρεις μηχανισμοί περιγράφονται αναλυτικά παρακάτω.

2.3.1 Σταθερή Γωνία Επαφής (Constant Contact Angle – CCA)

Αυτός ο μηχανισμός εξάτμισης χαρακτηρίζεται από την διατήρηση σταθερής γωνίας επαφής μεταξύ της επιφάνειας του υγρού και του υποστρώματος, ενώ παράλληλα παρατηρείται η βαθμιαία υποχώρηση της τριφασικής γραμμής επαφής (βλ. Εικόνα 3 α)). Κατά αυτόν τον τρόπο, η επιφάνεια επαφής της σταγόνας με το υπόστρωμα σταδιακά συρρικνώνεται, λόγω της απώλειας

μάζας. Εδώ η γραμμή επαφής είναι αποκολλημένη από την επιφάνεια και ολισθαίνει ελεύθερα και συνεχώς, επιτρέποντας την ομοιόμορφη μείωση του όγκου της σταγόνας. Σε υπολογιστικές προσομοιώσεις, όπου το υπόστρωμα θα θεωρηθεί τελείως λείο, ο μηχανισμός που θα παρατηρηθεί είναι ο μηχανισμός **Σταθερής Γωνίας Επαφής**. Κάτι τέτοιο όμως στην πραγματικότητα δεν είναι ρεαλιστικό, καθώς δεν υφίσταται η έννοια της τέλειας, λείας επιφάνειας. Ακόμα και μακροσκοπικά λείες επιφάνειες εμφανίζουν τραχύτητα σε επίπεδο νανομέτρων. Ωστόσο σε ορισμένες περιπτώσεις, όπως για παράδειγμα σε υπερυδρόφοβες επιφάνειες, με γωνία επαφής μεγαλύτερη των 150° η γραμμή επαφής δεν προσκολλάται έντονα στο υπόστρωμα. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα η κίνηση της είναι αρκετά συνεχής ώστε να προσεγγίζει τον μηχανισμό CCA.[1,6]

2.3.2 Σταθερή Ακτίνα Επαφής (Constant Contact Radius – CCR)

Αυτός ο μηχανισμός εξάτμισης χαρακτηρίζεται από την διατήρηση σταθερής ακτίνας επαφής μεταξύ στερεού και υγρού, που παραμένει κολλημένη στο υπόστρωμα, όσο η γωνία επαφής μειώνεται με την εξέλιξη της εξάτμισης (βλ. Εικόνα 3 β)). Σε αυτή την διαδικασία, η επιφάνεια επαφής της σταγόνας με το στερεό υπόστρωμα παραμένει σταθερή και το σχήμα της σταγόνας αλλάζει, κυρίως εξαιτίας της μείωσης της γωνίας επαφής και την πτώση του ύψους της. Η τριφασική γραμμή επαφής εδώ εμφανίζεται προσκολλημένη, εξαιτίας της ετερογένειας που εμφανίζει η επιφάνεια. Το «κόλλημα» της τριφασικής γραμμής επαφής πάνω στο στερεό υπόστρωμα αποτελεί, στην πραγματικότητα, ένα ενεργειακό φράγμα. Η ενέργεια που αποθηκεύεται στην επιφάνεια της σταγόνας λόγω απομάκρυνσης από την κατάσταση ισορροπίας κατά την διάρκεια της εξάτμισης, δεν είναι αρκετή για να ξεπεραστεί το ενεργειακό φράγμα που απαιτείται για να αποκολληθεί η γραμμή επαφής και να υποχωρήσει προς τον άξονα συμμετρίας της σταγόνας.[1,6]

2.3.3 Μεικτός Μηχανισμός

Σε αυτόν το μοντέλο παρατηρείται η συνύπαρξη των δύο προαναφερθέντων μηχανισμών. Με πειράματά τους οι Bourges & Shanahan το 1995 έδειξαν πως σε πραγματικές επιφάνειες, με ετερογένειες και γεωμετρικές ατέλειες επικρατεί αυτός ο μηχανισμός και η κίνηση της τριφασικής γραμμής επαφής εξαρτάται σημαντικά από την υστέρηση στην γωνία επαφής. Αρχικά, η τριφασική γραμμή επαφής μπορεί να παραμείνει «κολλημένη» πάνω σε ανωμαλίες του στερεού και να ακολουθήσει τον μηχανισμό CCR, με αποτέλεσμα η παραιτούμενη γωνία επαφής να μειώνεται. Μόλις αυτή φτάσει σε μία κρίσιμη τιμή, τότε η TPL ξαφνικά «πηδάει» σε μία νέα θέση, όπου αυξάνεται η γωνία επαφής και το ύψος της σταγόνας και η εξάτμιση εξελίσσεται, πλέον, με σταθερή γωνία επαφής μέχρι την επόμενη προσκόλληση της TPL. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται, δίνοντας στον μηχανισμό το όνομα stick-slip.[6] Κάθε άλμα της τριφασικής γραμμής επαφής σχετίζεται με το ξεπέρασμα ενός ενεργειακού φράγματος. Η ενέργεια για το ξεπέρασμα του φράγματος αποθηκεύεται στην επιφάνεια της σταγόνας λόγω απομάκρυνσης από την κατάσταση ισορροπίας.

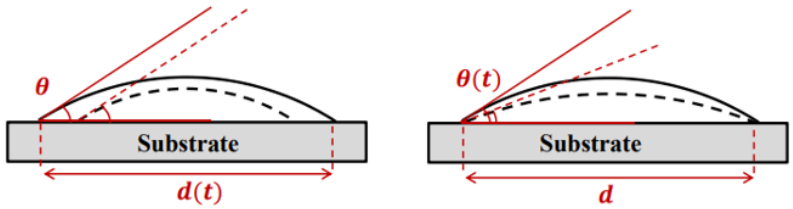
2.3.4 Σύγκριση ρυθμών εξάτμισης

Ο μηχανισμός σταθερής γωνίας επαφής οδηγεί σε βραδύτερη εξάτμιση, γεγονός που οφείλεται σε δύο βασικούς παράγοντες. Ο πρώτος παράγοντας εξηγείται από το γεγονός πως σταγόνες οι οποίες έχουν μεγάλη παρατηρούμενη γωνία επαφής έχουν και μικρότερη επιφάνεια, συγκριτικά με σταγόνες που έχουν μικρότερη γωνία επαφής. Κατά την διάρκεια της εξάτμισης με τον μηχανισμό Σταθερής Γωνίας Επαφής διατηρείται σταθερά μεγαλύτερη γωνία από ότι στον μηχανισμό Σταθερής Ακτίνας Επαφής, στον οποίο η γωνία μειώνεται διαρκώς. Η μικρότερη επιφάνεια έχει ως συνέπεια και μικρότερο ρυθμό μεταφοράς μάζας που δικαιολογεί την βραδύτητα του μηχανισμού Σταθερής Γωνίας Επαφής.

Ο δεύτερος παράγοντας οφείλεται στα φαινόμενα μεταφοράς θερμότητας που υφίστανται στο σύστημα που μελετάται. Ένα πολύ σημαντικό μέγεθος που αφορά το φαινόμενο της εξάτμισης σταγόνων είναι η αναλογία της ακτίνας της σταγόνας ως προς το ύψος της. Όσο πιο συγκρίσιμα είναι τα μεγέθη αυτά, τόσο πιο δύσκολη είναι η διάδοση θερμότητας με διάχυση από το στερεό υπόστρωμα προς την κορυφή της σταγόνας. Όσο μεγαλύτερος είναι ο λόγος της ακτίνας της σταγόνας προς το ύψος της, τόσο μεγαλύτερη είναι και η διαφορά θερμοκρασίας μεταξύ της κορυφής και του υποστρώματος. Ο μεγαλύτερος ρυθμός εξάτμισης εμφανίζεται συνήθως στη περιοχή της τριφασικής γραμμής επαφής λόγω της σφηνοειδούς γεωμετρίας. Ωστόσο, όταν το ύψος της σταγόνας είναι αρκετά μεγάλο δεν είναι δυνατή η μεταφορά θερμότητας προς την κορυφή και έτσι παρόλο που η TPL έχει εντονότερο ρυθμό εξάτμισης, άρα και ψύξης, έχει και παράλληλα την υψηλότερη θερμοκρασία.[6] Αυτή η συμπεριφορά μπορεί να αντιστραφεί σε ορισμένες περιπτώσεις για μια κρίσιμη τιμή του λόγου θερμικών αγωγιμοτήτων και της γωνίας επαφής.[11]

Με βάση αυτά, όταν μία σταγόνα εξατμίζεται με την μέθοδο CCR, γίνεται αντιληπτό, πλέον, πως η συνεχής μείωση της ακτίνας και η ελάττωση του ύψους της οδηγούν σε ταχύτερους ρυθμούς εξάτμισης συγκριτικά με τον μηχανισμό CCA.

Παρακάτω, επίσης, εμφανίζεται και η χρονική συνάρτηση των φυσικών χαρακτηριστικών μεγεθών της σταγόνας, ανάλογα με τον παρατηρούμενο μηχανισμό.



α) Σταθερή Γωνία Επαφής β) Σταθερή Ακτίνα Επαφής

Εικόνα 3. Μηχανισμοί εξάτμισης σταγονιδίου σε στερεό υπόστρωμα: α) Εξάτμιση με σταθερή γωνία επαφής και β) Εξάτμιση με σταθερή ακτίνα επαφής.[1]

Από την παραπάνω εικόνα (*Εικόνα 3*) φαίνεται πως στην περίπτωση α) η διάμετρος d στην οποία επικάθεται η σταγόνα είναι ένα χρονικά εξαρτώμενο μέγεθος, ενώ, από την άλλη, στην περίπτωση β) η παρατηρούμενη γωνία επαφής είναι αυτή που έχει χρονική συσχέτιση. Στην πρώτη περίπτωση η γωνία επαφής είναι σταθερή και ανεξάρτητη του χρόνου, ενώ στην δεύτερη, σταθερή είναι η ακτίνα επαφής με το υπόστρωμα.

2.4 Φυσικομαθηματικά μοντέλα και συνοριακές συνθήκες

Η εξάτμιση των μικροσταγόνων διέπεται από σύνθετους μηχανισμούς, οι οποίοι είναι συζευγμένοι και δρουν παράλληλα ή/και ανταγωνιστικά, ενώ η διαβρεκτικότητα και τα διάφορα φαινόμενα μεταφοράς μεταβάλλονται χωρικά και χρονικά.

Οι κυρίαρχες εξισώσεις που ορίζουν το πρόβλημα ευθυγραμμίζονται με τις παραδοχές που λήφθηκαν στην αρχή του κεφαλαίου και είναι οι εξισώσεις Navier Stokes καθώς και οι εξισώσεις μεταφοράς θερμότητα και μάζας.

1. Navier Stokes (διατήρηση ορμής και μάζας):

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \boldsymbol{u} + \boldsymbol{F} \tag{2.2}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \tag{2.3}$$

Όπου $\boldsymbol{u}$ το πεδίο της ταχύτητας, p η πίεση, μ το δυναμικό ιξώδες και $\boldsymbol{F} \equiv \rho \boldsymbol{g}$ η σωματική δύναμη της βαρύτητας.

Για την μοντελοποίηση της φυσικής κυκλοφορίας λαμβάνεται υπόψιν η προσέγγιση Boussinesq. Η θερμοκρασιακή εξάρτηση της πυκνότητας υπολογίζεται ως εξής:

$$\rho = \rho_0 + \alpha \rho_0 (T_{average} - T) \tag{2.4}$$

Όπου ρ_0 η πυκνότητα αναφοράς και α ο συντελεστής θερμικής διαστολής.

2. Εξισώσεις μεταφοράς θερμότητας:
   - Στην υγρή και την αέρια φάση εξαιτίας αγωγής και συναγωγής:

$$\rho C p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla T\right) = \nabla \cdot (k \nabla T) \tag{2.5}$$

   - Στην στερεή φάση εξαιτίας αγωγής:

$$\rho_s C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k_s \nabla T) \tag{2.6}$$

   Όπου T η θερμοκρασία, ρ είναι η πυκνότητα και C_p η ειδική θερμότητα και k ο συντελεστής μεταφοράς θερμότητας.

   - Στην αέρια φάση εξαιτίας διάχυσης και συναγωγής:

$$\frac{\partial c_v}{\partial t} + u \cdot \nabla c_v = \nabla \cdot (D \nabla c_v) \tag{2.7}$$

Όπου c_v η συγκέντρωση του ατμού και D ο συντελεστής διάχυσης.

Το παραπάνω σύστημα συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων πρέπει να πλαισιωθεί από τις κατάλληλες αρχικές και συνοριακές συνθήκες. Αυτές παρουσιάζονται αναλυτικά παρακάτω:

- Οι περιορισμοί στην κίνηση της γραμμής επαφής που εμφανίζονται κατά την χρήση συμβατικών συνοριακών συνθηκών μπορούν να αντιμετωπιστούν θεωρώντας τις διεπιφάνειες στερεού – υγρού και υγρού – αερίου ως ενιαίες. Με αυτόν τον τρόπο μπορεί να εκφραστεί η ισορροπία τάσεων σε όλο το σύνορο της σταγόνας με μία και μόνο εξίσωση. Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ του υγρού και του στερεού εισάγονται ως ένας όρος πίεσης (πίεση αποκόλλησης) στη κάθετη συνιστώσα της ισορροπίας των τάσεων:

$$\tau_{nn}|_g - \tau_{nn}|_l - \gamma_{lg} C - p_{ls} = 0\,,\ στο\ S_{lg} \tag{2.8}$$

  Όπου S_{lg} είναι η διεπιφάνεια στερεού υγρού, $\tau_{nn} = n \cdot \tau \cdot n$ είναι η κάθετη συνιστώσα του τανυστή τάσεων: $\tau = -pl + \mu[\nabla u + \nabla u^T]$ και p_{ls} η πίεση αποκόλλησης που θα παρουσιαστεί αναλυτικότερα σε ξεχωριστό υποκεφάλαιο.

- Στην διατμητική συνιστώσα της ισορροπίας των τάσεων πρέπει να ληφθεί υπόψη η εξάρτηση της επιφανειακής τάσης από την θερμοκρασία:

$$\tau_{nt}|_g - \tau_{nt}|_l - \gamma_{\mathrm{lg}_T} \nabla_t T = 0,\ στο\ S_{lg} \tag{2.9}$$

  Όπου $\gamma_{\mathrm{lg}_T} = \frac{d\gamma_{lg}}{dT}$.

  Ο όρος $\gamma_{\mathrm{lg}_T} \nabla_t T$ ονομάζεται θερμική τάση Marangoni και επενεργεί μόνο σε ένα τμήμα της σταγόνας, το οποίο είναι στην διεπιφάνεια υγρού – αέρα.
- Στην διεπιφάνεια υγρού – αέρα υπάρχει κορεσμός σε ατμό και η τάση του υπολογίζεται από την εξίσωση Antoine:

$$\log p_v^S = A_l - \frac{B_l}{C_l + (T - 273.15)} \tag{2.10}$$

  Όπου η συγκέντρωση του ατμού υπολογίζεται από τον νόμο των ιδανικών αερίων:

$$c_v^S = \frac{p_v^S}{RT} \tag{2.11}$$

- Ο ρυθμός εξάτμισης ή η απώλεια μάζας είναι αποτέλεσμα της διάχυσης του ατμού μέσω της διεπιφάνειας υγρού – αέρα και υπολογίζεται ως εξής:

$$\dot{m}' = \boldsymbol{n} \cdot (-D \nabla c_v) M_r \tag{2.12}$$

- Η θερμική ροή είναι ασυνεχής στην διεπιφάνεια υγρού – αέρα εξαιτίας της εισαγωγής της ενθαλπίας εξάτμισης, h_v. Η εισαγωγή της γίνεται με την εξίσωση:

$$\boldsymbol{n} \cdot \left((k \nabla T)_g - (k \nabla T)_l \right) = \dot{m}' h_v \tag{2.13}$$

- Λαμβάνονται και συνοριακές συνθήκες που επιβάλλονται στον άξονα συμμετρίας. Αυτές είναι:

$$u \cdot n = 0 \tag{2.14}$$

$$-pI + \mu\left(\nabla u + (\nabla u)\right)^T \cdot n = 0 \tag{2.15}$$

$$n \cdot (-D\nabla c_v) = 0 \tag{2.16}$$

$$n \cdot (-k\nabla T\ ) = 0 \tag{2.17}$$

- Συνοριακές συνθήκες στα τοιχώματα του χωρίου:
  - Συνθήκη μη ολίσθησης:

$$u = 0 \tag{2.18}$$

  - Πίεση αναφοράς:

$$p = p_0 \tag{2.19}$$

    Σε περίπτωση που το περιβάλλον διεξαγωγής του πειράματος δεν είναι υπό πίεση, ως πίεση αναφοράς θεωρείται η μανομετρική $p_0 = 0$
  - Ατμοσφαιρικές συνθήκες:

$$T = T_\infty \tag{2.20}$$

$$c_\infty = \frac{p^S_{v,\infty} H}{R T_\infty}\ , \tag{2.21}$$

2.5 Πίεση Αποκόλλησης

Η πίεση αποκόλλησης, ή αλλιώς πίεση Denjaguin, p_{ls} είναι ένα μέγεθος που εισάγεται, προκειμένου να περιγράψει τις διαμοριακές αλληλεπιδράσεις μεταξύ του υγρού και των στερεών επιφανειών που αυτό εναποτίθεται και εμφανίζεται στην ισορροπία τάσεων στερεού – υγρού – περιβάλλοντος. Οι αλληλεπιδράσεις αυτές μπορεί να είναι είτε ελκτικές είτε απωστικές, ανάλογα με την απόσταση των δύο φάσεων.

Η p_{ls} αντιπροσωπεύει την πίεση που ασκείται από τις αλληλεπιδράσεις του υγρού και του στερεού σε μικροσκοπικό επίπεδο και προκύπτει από τις δυνάμεις Vaan der Waals, τις ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις και τις στερεοχημικές δυνάμεις, οι οποίες αποτρέπουν τις επιφάνειες να έρθουν πολύ κοντά η μία στην άλλη. Οι τελευταίου τύπου δυνάμεις είναι απωστικές και γίνονται πολύ σημαντικές όταν γίνεται λόγος για πολύ μικρές αποστάσεις.[8]

Για την περιγραφή των αλληλεπιδράσεων μέσω της πίεσης αποκόλλησης υιοθετείται ένα δυναμικό τύπου Lennard-Jones:

$$\frac{R_0}{\gamma_{ls}} p_{ls} = w_{ls}\left(\left(\frac{\sigma}{\delta/R0 - \epsilon}\right)^{C_1} - \left(\frac{\sigma}{\delta/R0 - \epsilon}\right)^{C_2}\right) \tag{2.22}$$

Όπου γ_{ls} είναι η επιφανειακή τάση του υγρού, R_0 το χαρακτηριστικό μέγεθος της σταγόνας, δηλαδή η ακτίνα της, w_{ls} μία παράμετρος διαβροχής, η οποία σχετίζεται με την διαβρεκτικότητα της στερεής επιφάνειας, σ και ϵ δύο ακόμα σταθερές που ελέγχουν το εύρος των μικρο-αλληλεπιδράσεων, δ η Ευκλείδεια απόσταση μεταξύ του υγρού και της στερεής επιφάνειας και,

τέλος, C_1 και C_2 εκθέτες που καθορίζουν την φύση της αλληλεπίδρασης (απωστική και ελκτική αντίστοιχα).[6,8]

Οι τιμές που δίνονται στις παραμέτρους της πίεσης αποκόλλησης είναι: $C_1 = 12$, $C_2 = 10$, $\sigma = 0.011$ και $\epsilon = 0.008$ προκύπτουν από προσαρμογή σε πειραματικά δεδομένα εξάπλωσης σταγόνων.[6]

Όταν η πίεση Denjaguin είναι αρνητική, κυριαρχούν οι ελκτικές δυνάμεις, οδηγώντας το υγρό φιλμ σε πιθανή κατάρρευση, ενώ όταν είναι θετική, επιβάλλονται οι απωστικές δυνάμεις που σταθεροποιούν το φιλμ. Παράλληλα, για μεγαλύτερες τιμές του δ κυριαρχούν οι δυνάμεις van der Waals ελκτικής φύσεως, ενώ για μικρά δ κυριαρχούν δυνάμεις απωστικές.

Η διεπιφάνεια στερεού – υγρού διατηρείται σε απόσταση $\delta_{min} = \sigma - \epsilon$, η ευστάθεια της οποίας οφείλεται στη παρουσία της πιέσεως αποκόλλησης. Η δ_{min} είναι μία παράμετρος του μοντέλου μικρής τάξης μεγέθους, που στην φύση παίρνει τιμές στην κλίμακα των νανομέτρων, ωστόσο στο μοντέλο, όπως αυτό καταστρώθηκε υπολογιστικά και θα αναλυθεί σε επόμενη ενότητα, λαμβάνει τιμές της τάξεως του 10^{-3}. Αυτή η διαφορά μεταξύ πραγματικής τιμής του δ_{min} και δοθείσας τιμής του στην προσομοίωση, οφείλεται στην προσπάθεια ελάττωσης του υπολογιστικού της κόστους. Η ρεαλιστική τιμή της παραμέτρου δ_{min} σε μία προσομοίωση σταγόνας λίγων χιλιοστών απαιτεί μοντελοποίηση πολλαπλών κλιμάκων, η οποία θα συνδέει αλληλεπιδράσεις νανομέτρων με μακροσκοπική συμπεριφορά χιλιοστών, υπολογισμός κοστοβόρος για την προσέγγιση συνεχούς μέσου, που εξετάζεται στην παρούσα εργασία. Η επιλογή αυτή, λοιπόν, όχι μόνο διατηρεί την υπολογιστική αποδοτικότητα, αλλά παράλληλα εξακολουθεί να αναπαριστά με ακρίβεια την φυσική συμπεριφορά των σταγόνων.[8]

Η πίεση αποκόλλησης συντελεί πολύ σημαντικό ρόλο στην δυναμική της σταγόνας και το πώς αυτή αλληλεπιδρά με την επιφάνεια στην οποία επικάθεται. Παράλληλα, δεδομένης της άμεσης επιρροής της πίεσης στην γραμμή επαφής, υπάρχει και έμμεση επιρροή στην διαμόρφωση του coffee ring φαινομένου, καθώς σταθεροποιείται το φιλμ υγρού στην γραμμή επαφής και επιδρά στα τριχοειδή φαινόμενα και στην απόθεση των σωματιδίων.[8]

2.5 Ροή εντός εξατμιζόμενων σταγόνων - Φαινόμενο Marangoni

Το φαινόμενο Marangoni (Marangoni effect), που έλαβε το όνομα του από τον Ιταλό φυσικό Carlo Marangoni, αναφέρεται στην μεταφορά μάζας ενός ρευστού, εξαιτίας της βαθμίδας επιφανειακής πίεσης που δημιουργείται. Το φαινόμενο αυτό βρίσκει εφαρμογή σε ποικίλα επιστημονικά θέματα, όπως η εξάτμιση των σταγονιδίων, που μελετάται τώρα αλλά και στην απόθεση στερεών πάνω σε επιφάνειες. Η βαθμίδα της επιφανειακής τάσης, που ωθεί στην εμφάνιση του φαινομένου Marangoni, μπορεί να εμφανίζεται εξαιτίας της θερμοκρασιακής διαφοράς (Thermal Marangoni Effect) εντός του ρευστού ή εξαιτίας των διαφορών στην συγκέντρωση σε πολυσυστατικά και πολυφασικά συστήματα (Solutal Marangoni Effect). Τα δύο αυτά φαινόμενα δύναται να δρουν τόσο συνεργατικά όσο και ανταγωνιστικά.[6]

Το θερμικό φαινόμενο Marangoni συμβαίνει όταν δημιουργείται θερμοκρασιακή βαθμίδα εντός του ρευστού. Όσο η θερμοκρασία αυξάνεται τόσο η επιφανειακή τάση ελαττώνεται. Αντίστροφα αποτελέσματα παρατηρούνται με την μείωση της θερμοκρασίας. Αναμενόμενο είναι πως μέσα σε ένα σταγονίδιο που εξατμίζεται θα παρατηρηθεί θερμοκρασιακή βαθμίδα λόγω ψύξης (ενθαλπία εξάτμισης), η οποία με την σειρά της θα οδηγήσει και στην δημιουργία βαθμίδας επιφανειακής πίεσης. Η ύπαρξη βαθμίδων επιφανειακής τάσης επιφέρει κίνηση του ρευστού από μία περιοχή χαμηλής σε μία περιοχή υψηλής επιφανειακής τάσης.[1,6]

Ένα σημαντικό μέγεθος που επηρεάζει την συμπεριφορά της θερμοκρασιακής κατανομής εντός μίας σταγόνας είναι ο λόγος h/R_c. Ο λόγος αυτός εκφράζει το πηλίκο του ύψους που έχει η κορυφή της σταγόνας προς την ακτίνα εξάπλωσής της. Ο υψηλός λόγος h/R_c οδηγεί σε μία μεγαλύτερου μήκους διαδρομή για την αγωγή θερμότητας. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα η κορυφή της σταγόνας να έχει χαμηλότερη θερμοκρασία, συγκριτικά με την τριφασική γραμμή επαφής. Επειδή ο ρυθμός μεταφοράς θερμότητας προς την TPL τόσο από το υπόστρωμα όσο και από τον περιβάλλοντα αέρα είναι μεγαλύτερος, επακόλουθα θα έχει και μεγαλύτερο ρυθμό εξάτμισης. Συνέπεια της εξάτμισης είναι η ψύξη της διεπιφάνειας υγρού-αερίου λόγω ενθαλπίας εξάτμισης. Παρόλο που η τριφασική γραμμή επαφής ψύχεται με μεγαλύτερο ρυθμό λόγω μεγαλύτερου ρυθμού εξάτμισής, διατηρεί μεγαλύτερη θερμοκρασία σε σχέση με την κορυφή της σταγόνας εξαιτίας του υψηλού h/R_c[6]: η θερμότητα που χάνεται λόγω εξάτμισης στην περιοχή της TPL αναπληρώνεται ενώ στην κορυφή της σταγόνας όχι

Η μη ομοιόμορφη κατανομή θερμοκρασίας κατά μήκος της διεπιφάνειας υγρού-αερίου οδηγεί σε βαθμίδα επιφανειακής τάσης και εμφάνισης ανακυκλοφορίας εντός της σταγόνας. Σε περιπτώσεις όπου η εξάτμιση ακολουθεί μηχανισμό σταθερής ακτίνας επαφής, σε υπόστρωμα με χαμηλή θερμική αγωγιμότητα, καθώς η εξάτμιση προχωρά, μετά από μία κρίσιμη γωνία επαφής, είναι πιθανόν να παρατηρηθεί αντιστροφή του φαινομένου Marangoni λόγω αντιστροφής της βαθμίδας επιφανειακής τάσης. Αυτό το φαινόμενο οφείλεται στην μείωση της γωνίας επαφής και επακόλουθα του λόγου h/R_c κατά την διάρκεια της εξάτμισης. Στο κρίσιμο σημείο αντιστροφής των ανακυκλοφοριών έχει μόλις αντιστραφεί η κατανομή θερμοκρασίας κατά μήκος της διεπιφάνειας και η υψηλότερη θερμοκρασία δεν εντοπίζεται πλέον στην γραμμή επαφής.[6]

Εντός της σταγόνας είναι πολύ σημαντική η ανάπτυξη των ανακυκλοφοριών, καθώς αυτές οδηγούν σε ανάμειξη και πιο ομοιόμορφη κατανομή θερμοκρασίας. Επίσης καθορίζουν τα μοτίβα εναπόθεσης σωματιδίων σε στερεά υποστρώματα έπειτα από την πλήρη εξάτμιση των σταγόνων.

2.5.1 Φαινόμενο Marangoni και θερμική αγωγιμότητα του υποστρώματος

Μελετητές, όπως οι Ristenpart et al, έδειξαν πως η κατεύθυνση των ανακυκλοφοριών είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με την σχέση μεταξύ των θερμικών αγωγιμοτήτων μεταξύ του στερεού και του υγρού καθώς και την γωνία επαφής. Το παραπάνω πηλίκο θερμικών αγωγιμοτήτων συμβολίζεται ως $k_R \equiv k_S/k_L$ και είναι αδιάστατη ποσότητα.[11]

Συγκεκριμένα, οι Ristenpart et al έδειξαν πως όταν η στερεή επιφάνεια έχει θερμική αγωγιμότητα τουλάχιστον διπλάσια της αγωγιμότητας του υγρού, τότε η άκρη της σταγόνας είναι η θερμότερη περιοχή. Όταν ο λόγος $k_R > 2$, τότε η γωνία επαφής δεν επηρεάζει τις ανακυκλοφορίες εντός της σταγόνας και η ροή εξαρτάται από την βαθμίδα επιφανειακής τάσης και επακόλουθα την κατανομή θερμοκρασίας κατά μήκος της διεπιφάνειας υγρού-αερίου. Αν ο λόγος k_R ανήκει στο εύρος $1.45 < k_R < 2$ τότε η κατεύθυνση της βαθμίδας θερμοκρασίας, και επακόλουθα της ροή Marangoni, εξαρτάται από την γωνία επαφής της σταγόνας. Ενώ, τέλος, για $k_R < 1.45$ για μια σταγόνα που εξατμίζεται ακολουθώντας τον μηχανισμό CCR, μετά από έναν κρίσιμο χρόνο (μια κρίσιμη τιμή της γωνίας επαφής), είναι ψυχρότερη κοντά στην γραμμή επαφής και θερμότερη στην κορυφή και η ροή αντιστρέφεται, δηλαδή κινείται ακτινικά προς τα μέσα κατά μήκος του υποστρώματος (φορά των δεικτών του ρολογιού).[11]

Η κατεύθυνση των ανακυκλοφοριών ελέγχεται από την βαθμίδα της θερμοκρασίας, άρα επακόλουθα και της επιφανειακής τάσης. Η αντιστροφή των ανακυκλοφοριών συμβαίνει όταν η γωνία επαφής λάβει μία κρίσιμη τιμή θ_c, η οποία, σύμφωνα με το έργο πολλών ερευνητών, είναι περίπου στις $31°$.[11]

Συμπερασματικά, από την πειραματική ανάλυση των Ristenpart et al, εξήχθησαν ποσοτικά κριτήρια που συνδέουν το θερμικό φαινόμενο Marangoni με την θερμική αγωγιμότητα της σταγόνας και του υλικού του υποστρώματος. Τα κριτήρια αυτά λήφθηκαν υπόψιν στις προσομοιώσεις της εργασίας και επαληθεύτηκαν, όπως θα αναλυθεί εκτενέστερα και στα επόμενα κεφάλαια.

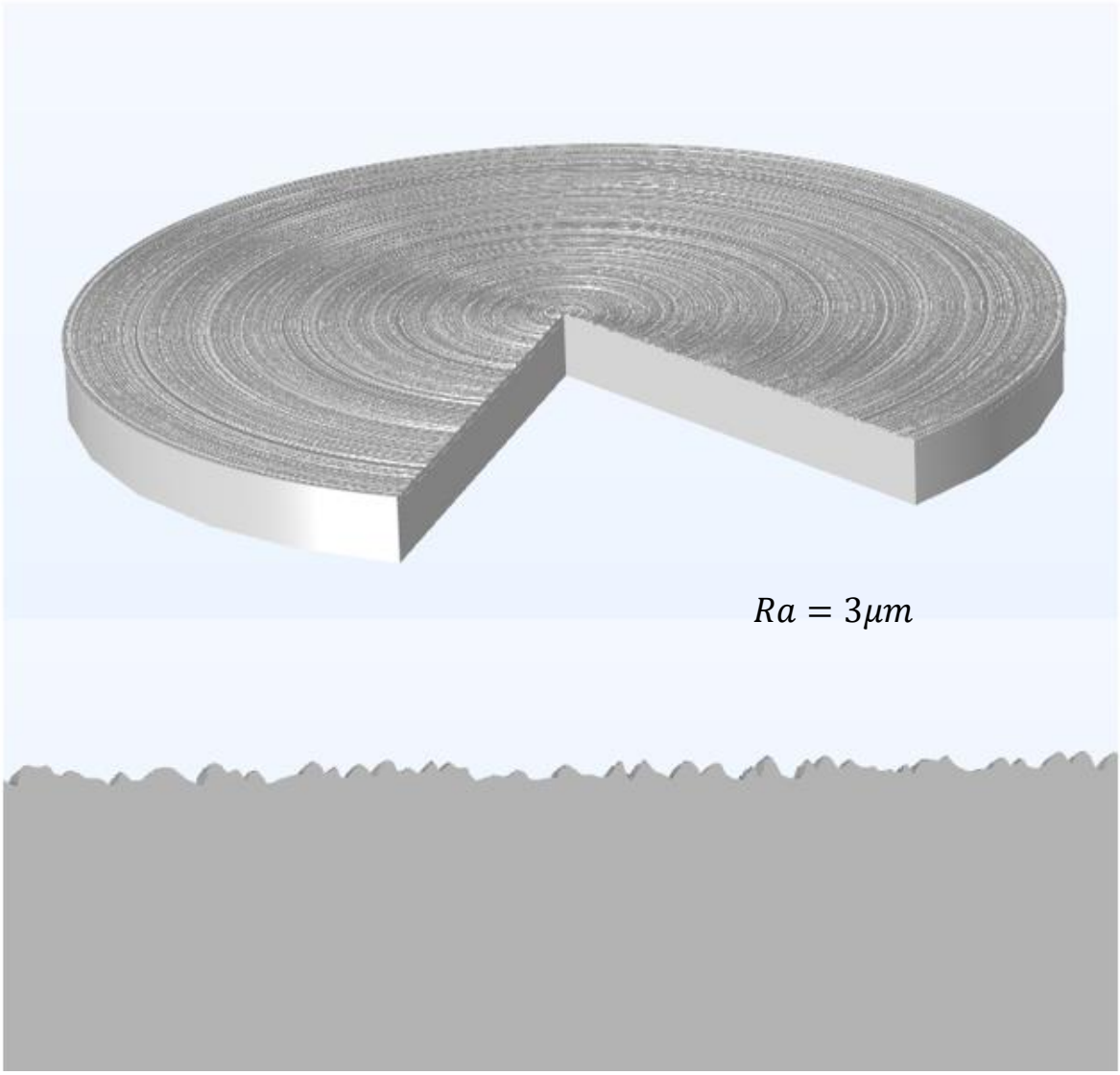
2.6 Τραχύτητα

Η τραχύτητα μίας επιφάνειας είναι άμεσα συνδεδεμένη με την υστέρηση της γωνίας επαφής, καθορίζει την διαβροχή των επιφανειών από σταγόνες και τους μηχανισμούς εξάτμισης. Πολλές φορές η ιδιότητα αυτή ποσοτικοποιείται, μέσω του παράγοντα r_f και τέλεια λείες επιφάνειες έχουν $r_f = 1$, ενώ όσο πιο τραχεία είναι, τόσο μεγαλώνει το r_f.[7]

Ο παράγοντας τραχύτητας της επιφάνειας, r_f, εκφράζεται ως ο λόγος της πραγματικής επιφάνειας της περιοχής προς την φαινόμενη επιφάνεια. Ως πραγματική επιφάνεια θεωρείται η επιφάνεια που λαμβάνει υπόψιν όλες τις μικροσκοπικές κορυφές, κοιλάδες και προεξοχές και περιλαμβάνει όλες τις ανωμαλίες της τοπογραφίας της επιφάνειας. Η φαινόμενη επιφάνεια, είναι αυτή που θα υπολογιζόταν αν η επιφάνεια είναι μία ιδανικά επίπεδη και λεία, αγνοώντας τις γεωμετρικές και χημικές ετερογένειες που προκαλούν την εμφάνιση τραχύτητας. Με άλλα λόγια, η φαινόμενη επιφάνεια είναι αυτή που παρατηρείται με γυμνό μάτι.

Είναι σαφές πως η πραγματική επιφάνεια έχει μεγαλύτερη τιμή από την φαινόμενη, καθώς λαμβάνει υπόψιν όλες αυτές τις μικρο-επιφάνειες που δημιουργούνται. Ως εκ τούτου, σε λείες επιφάνειες είναι εμφανές πως $r_f = 1$, ενώ σε τραχείες $r_f > 1$.[7]

Η οπτικοποίηση της τριασδιάστατης γεωμετρίας της τραχείας στερεής επιφάνειας που κατασκευάστηκε, για την προσομοίωση της εξάτμισης, παρουσιάζεται την εικόνα που ακολουθεί. (*Εικόνα 4*). Η τραχύτητα που ορίστηκε, με χρήση ψευδοτυχαίου κώδικα στο MATLAB® ήταν τα 3μm.



Εικόνα 4. Πάνω: Τρισδιάστατη περιστροφή, γύρω από τον άξονα συμμετρίας, της στερεής επιφάνειας που χρησιμοποιείται στις προσομοιώσεις. Κάτω: μεγέθυνση της τυχαίας τραχύτητας, όπως αυτή δημιουργήθηκε, χρησιμοποιώντας κώδικα κατανομής στο MATLAB®.

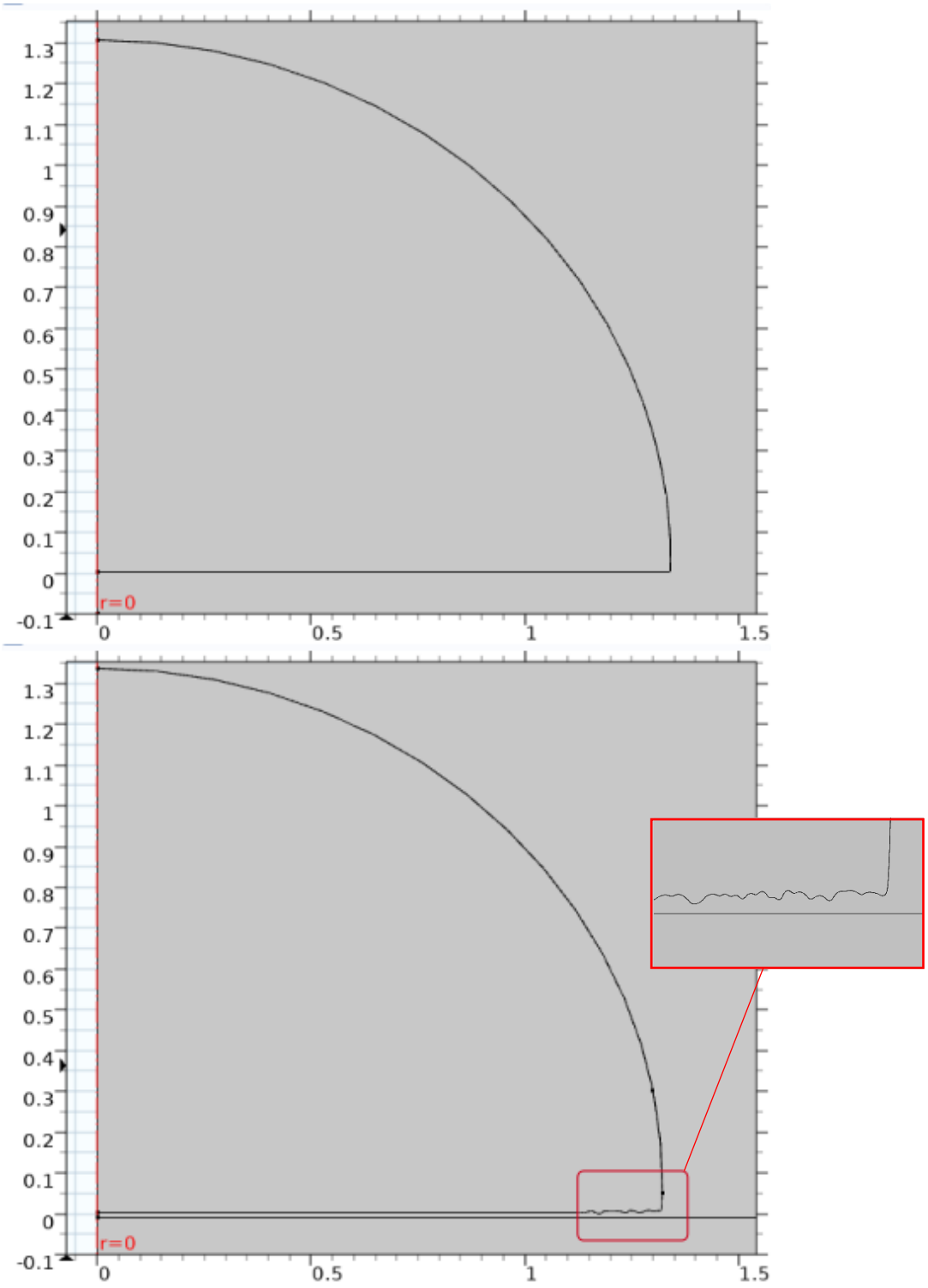
Η εξάπλωση μίας σταγόνας στο στερεό υπόστρωμα επηρεάζεται από την τραχύτητα και η συμπεριφορά της μπορεί να διακριθεί σε τρία στάδια. Το πρώτο στάδιο είναι η αρχική εξάπλωση της σταγόνας, στο οποίο γίνεται μία ταχεία αύξηση της επιφάνειας επαφής με το στερεό. Αυτό το στάδιο είναι ανεξάρτητο από το την τραχύτητα που έχει η επιφάνεια. Το δεύτερο, ενδιάμεσο

στάδιο, είναι η εξάρτηση της ακτίνας επαφής από την τραχύτητα της επιφάνειας και η χρονική καθυστέρηση που επιφέρει η ανομοιογένεια του υποστρώματος στην εξάπλωση της σταγόνας. Το τρίτο, και τελευταίο, στάδιο είναι η ανάκρουση της σταγόνας, όπου αυτή υποχωρεί ελάχιστα και η ακτίνα επαφής μειώνεται, αφού φτάσει την μέγιστη τιμή της. Αυτό το φαινόμενο είναι περισσότερο εμφανές σε λείες επιφάνειες και η θέσης της γραμμής επαφής διαφέρει ελάχιστα για λείες και τραχείες επιφάνειες.[7]

Η διαφορά στην εξάπλωση μπορεί να παρατηρηθεί και παρακάτω, όπου στην *Εικόνα 5* παρατηρείται η εναπόθεση της σταγόνας σε μία λεία επιφάνεια καθώς και η γωνία επαφής που σχηματίζει η σταγόνα με το υπόστρωμα. Για σύγκριση, παρατηρείται από κάτω η ίδια σταγόνα, τοποθετημένη σε μία επιφάνεια με τραχύτητα και είναι εμφανείς οι ανωμαλίες του υποστρώματος και το πώς αυτές επηρεάζουν την διαβρεκτικότητα.

Και οι δύο σταγόνες έχουν γωνία επαφής Young 90° αλλά διαφορετική παρατηρούμενη μακροσκοπική γωνία επαφής, λόγω του φαινομένου που περιγράφεται από το μοντέλο Cassie-Baxter και Wenzel. Σύμφωνα με αυτά τα μοντέλα, το υγρό που τοποθετείται σε μία επιφάνεια μπορεί να υπόκειται σε δύο καταστάσεις: είτε να «αιωρείται» πάνω στις αυλακώσεις της επιφάνειας (Μοντέλο Cassie-Baxter), είτε να ακολουθεί την τοπογραφία της τραχείας επιφάνειας (Μοντέλο Wenzel). Και στις δύο καταστάσεις, η μακροσκοπική γωνία επαφής και η υστέρησή της είναι διαφορετικές συγκριτικά με την αντίστοιχη λεία υδρόφοβη επιφάνεια. Εξαιτίας της μικρής επιφάνειας επαφής στερεού και υγρού στο μοντέλο Cassie-Baxter η υστέρηση είναι αρκετά μικρή, ενώ, στην κατάσταση Wenzel η φαινόμενη γωνία επαφής καθορίζεται από την τραχύτητα του υλικού και η υστέρηση είναι μεγαλύτερη. Από την άλλη πλευρά, στην αντίστοιχη λεία υδρόφοβη επιφάνεια η μακροσκοπική γωνία επαφής προσεγγίζει κατά πολύ την γωνία Young, καθώς το υγρό απλώνεται ομοιόμορφα στην επιφάνεια και έρχεται σε πλήρη επαφή με αυτήν.[18]

Παράλληλα, στην εικόνα που ακολουθεί (*Εικόνα 5*) φαίνεται πως η τραχύτητα εμφανίζεται μόνο κοντά στην τριφασική γραμμή επαφής. Ωστόσο, αυτή η απεικόνιση δεν είναι απολύτως ακριβής, καθώς η τραχύτητα μίας επιφάνειας είναι από την φύση της τυχαία και υφίσταται σε όλη την έκτασή της. Ο λόγος που έχει επιλεχθεί αυτή η προσέγγιση της τραχύτητας είναι η μείωση του υπολογιστικού κόστους της προσομοίωσης. Συγκεκριμένα η τραχύτητα ενεργοποιείται μόνο γύρω από την περιοχή της τριφασικής επαφής και ακολουθεί την κίνηση της κατά την εξάτμισης της σταγόνας. Η ύπαρξη της τραχύτητας σε ολόκληρη την επιφάνεια επαφής της σταγόνας δεν θα πρόσφερε κάποια επιπλέον πληροφορία στην προσομοίωση, καθώς όλα τα φαινόμενα διαβροχής και η υστέρηση της γωνίας επαφής σχετίζονται με την κινητικότητα της τριφασικής γραμμής επαφής και την προσκόλλησή της στις ατέλειες της επιφάνειας.



Εικόνα 5. Απεικόνιση σταγόνας σε επίπεδη επιφάνεια χωρίς τραχύτητα με γωνία επαφής 90° (πάνω) και της ίδιας σταγόνας σε τραχεία επιφάνεια (κάτω).

2.6.1 Επιρροή της ταχύτητας στην εξάτμιση

Η χημική ή γεωμετρική ετερογένεια μιας επιφάνειας όπως έχει αναλυθεί παραπάνω επηρεάζει την κινητικότητα της τριφασικής γραμμής επαφής και ως συνέπεια, καθορίζει το μηχανισμό ή τους μηχανισμούς εξάτμισης.

Σε λείες επιφάνειες, συνήθως, ακολουθείται ο Μηχανισμός Σταθερής Γωνίας Επαφής (CCA). Εν αντιθέσει, στις τραχείες επιφάνειες, λόγω προσκόλλησης της TPL στις ατέλειες, ακολουθείται ο μηχανισμός Σταθερής Ακτίνας Επαφής (CCR) ή ο μικτός μηχανισμός stick-slip, όπου η γραμμή επαφής «κολλάει» στην επιφάνεια και μετά γλιστρά, μέχρι να επαναληφθεί ξανά η διαδικασία από την αρχή.

Όπως έχει αναφερθεί σε προηγούμενη ενότητα, ο Μηχανισμός Σταθερής Γωνίας Επαφής (CCA) επιφέρει βραδύτερους ρυθμούς εξάτμισης. Δεδομένου ότι ο μηχανισμός αυτός κυριαρχεί στις λείες επιφάνειες, τότε η εξάτμιση σε αυτές θα ολοκληρώνεται σε περισσότερο χρόνο. Ομοίως, αφού ο Μηχανισμός Σταθερής Ακτίνας Επαφής επιφέρει ταχύτερους χρόνους εξάτμισης και οι επιφάνειες στις οποίες εμφανίζεται είναι τραχείες, τότε προκύπτει το συμπέρασμα πως η εξάτμιση σε τραχεία επιφάνεια θα ολοκληρώνεται σε μικρότερο χρόνο από την εξάτμιση, υπό ίδιες συνθήκες, σε λεία επιφάνεια.

2.7 Εξάτμιση σε θερμαινόμενο υπόστρωμα

Κατά την μελέτη της εξάτμισης μικροσταγόνων πολλές φορές επιλέγεται η θέρμανση της επιφάνειας στην οποία επικάθεται η σταγόνα. Η ανωστική ροή σχετίζεται με την φυσική συναγωγή που προκύπτει λόγω της θερμοκρασιακής διαφοράς μέσα στην σταγόνα κατά την διάρκεια της εξάτμισης. Η ανωστική ροή προκαλείται από τις διαφορές στην πυκνότητα του υγρού, που οφείλονται στις θερμοκρασιακές βαθμίδες. Η ροή αυτή τείνει να δημιουργεί ανοδική κίνηση στις περιοχές με χαμηλότερη πυκνότητα (πιο θερμές) και καθοδική στις ψυχρότερες, με υψηλότερη πυκνότητα. Όταν η θερμοκρασία στο κάτω μέρος της σταγόνας είναι υψηλότερη από το πάνω μέρος της, όπως στην περίπτωση του θερμαινόμενου υποστρώματος, προκαλείται εσωτερική ροή στην σταγόνα, που επηρεάζει την εξάτμιση και την θερμοκρασιακή κατανομή στο εσωτερικό της.[20]

Για την προσομοίωση της ροής στο εσωτερικό της σταγόνας χρησιμοποιήθηκε η προσέγγιση Boussinesq, η οποία επιτρέπει την απλοποίηση της προσέγγισης της ροής, καθώς αγνοεί τις μικρές αλλαγές στην πυκνότητα.

Κεφάλαιο 3: Προσομοίωση της εξάτμισης στο COMSOL Multiphysics®

3.1 Εισαγωγή

Από την ανάλυση του προηγούμενου κεφαλαίου έγινε αντιληπτό ότι αποτελεί πρόκληση η πλήρης μαθηματική μοντελοποίηση εξάτμισης μικροσταγόνων από επιφάνειες με ρεαλιστική τραχύτητα. Για την επίλυση των συζευμένων συστημάτων μερικών διαφορικών εξισώσεων μαζί με τις απαραίτητες συνοριακές συνθήκες αξιοποιούνται υπολογιστικά εργαλεία καθώς τέτοιου είδους προβλήματα δεν επιδέχονται αναλυτική επίλυση. Επιπρόσθετα, ήταν αναγκαία και η προσεκτική επιλογή των απαραίτητων αριθμητικών μεθόδων και στρατηγικών προκειμένου οι αριθμητικοί αλγόριθμοι να συγκλίνουν με ακρίβεια στην λύση και παράλληλα να μην οδηγήσουν σε ραγδαία αύξηση του υπολογιστικού κόστους που μεταφράζεται σε υπολογιστικό χρόνο επίλυσης και ανάγκης για μνήμη.

Για την προσομοίωση του προβλήματος έγινε χρήση του λογισμικού COMSOL Multiphysics®, το οποίο έχει την δυνατότητα να επιλύει διαφορικές εξισώσεις με χρήση πεπερασμένων στοιχείων. Πέρα από τα έτοιμα πακέτα που διαθέτει, έχει και την δυνατότητα εισαγωγής των προς επίλυση εξισώσεων που αναφέρθηκαν παραπάνω.

Το πρόβλημα της εξάτμισης σταγόνων επιλέχθηκε να μοντελοποιηθεί χρησιμοποιώντας 2D αξονική συμμετρία υπό μεταβατικές χρονικές συνθήκες. Προκειμένου να γίνει εφικτή η προσομοίωση της εξάτμισης έγινε μία σειρά ενεργειών, τα αποτελέσματα των οποίων εισήχθησαν ως τροφοδοσία στα επόμενα στάδια. Οι ενέργειες αυτές ακολουθούν παρακάτω:

3.1.1 Εισαγωγή τραχύτητας στην επιφάνεια μέσω της εξίσωσης Eikonal

Στο προηγούμενο κεφάλαιο αναφέρθηκε η πίεση αποκόλλησης, στην οποία εμφανίζεται ο όρος δ που εκφράζει την ελάχιστη απόσταση από το στερεό υπόστρωμα. Όταν γίνεται αναφορά σε λείες επιφάνειες, το δ ισούται με την κάθετη απόσταση της υγρής επιφάνειας και του στερεού συνόρου (στον άξονα z). Όταν οι επιφάνειες είναι ανισόπεδες και τραχείς, από την άλλη, η απόσταση κατά τον z άξονα δεν είναι απαραίτητα η ελάχιστη. Σε αυτή την περίπτωση, το δ επιλέγεται ως η Ευκλείδεια απόσταση, όπως αυτό προκύπτει από την λύση της εξίσωσης Eikonal.[8] Προκειμένου να μοντελοποιηθεί η τραχύτητα της επιφάνειας, αρχικά, επιλύθηκε ένας κώδικας που παράγει τυχαία μια κατανομή κορυφών και κοιλάδων με την επιθυμητή ονομαστική τραχύτητα Ra. Επιλέχθηκε η τραχύτητα της επιφάνειας να είναι στα $Ra = 3\mu m$. Ο κώδικας αναπτύχθηκε στο προγραμματιστικό περιβάλλον του MATLAB®.

Όταν ληφθούν οι συντεταγμένες της διακριτοποιημένης τραχείας επιφάνειας, αυτές εισάγονται στο COMSOL Multiphysics®, όπου και γίνεται η λύση της εξίσωσης Eikonal. Παράλληλα, στο λογισμικό εισάγεται η γεωμετρία του χωρίου και η χωρική διακριτοποίηση (πλέγμα). Η επίλυση της Eikonal γίνεται μόνο μία φορά και χρησιμοποιείται σε κάθε προσομοίωση που ακολουθεί,

στην παρούσα εργασία. Η επίλυση της εξίσωσης Eikonal ισοδυναμεί με την επίλυση της παρακάτω μερικής διαφορικής εξίσωσης:

$$|\nabla\delta(r,z)| = 1\,, \quad (r,z) \in S \tag{3.1}$$

$$\delta(r,z) = 0\,, \quad \in \partial S \tag{3.2}$$

Προκειμένου να ελαττωθεί το υπολογιστικό κόστος, η τραχύτητα της επιφάνειας επιλέγεται να είναι εφαρμόσιμη μόνο κοντά στην περιοχή που βρίσκεται η τριφασική γραμμή επαφής όπως αναφέρθηκε παραπάνω.

3.1.2 Εναπόθεση και εξάπλωση (spreading) της σταγόνας στο στερεό υπόστρωμα

Η επόμενη ενέργεια είναι η εναπόθεση της σταγόνας πάνω στο υπόστρωμα και η εξάπλωση της σε αυτό. Αρχικά, εισάγονται οι τιμές των φυσικοχημικών παραμέτρων, οι οποίοι εμφανίζονται στις διαφορικές εξισώσεις. Σειρά έχει η καταχώρηση του προφίλ της επιφάνειας, που εμφανίζεται εξαιτίας της τραχύτητας της, αλλά και, κατόπιν, η σχεδίαση της αξονοσυμμετρικής γεωμετρίας της σταγόνας πάνω από το υπόστρωμα. Επιλέγεται η χρονικά εξαρτώμενη, στρωτή ροή της σταγόνας με κινούμενο πλέγμα ως φυσικό μοντέλο και παράλληλα, η δομή και πυκνότητα του πλέγματος προσαρμόζεται με τέτοιον τρόπο, ώστε το πλέγμα να είναι πιο αραιό στο «σώμα» της σταγόνας και αρκετά πιο πυκνό στα σύνορα της με τις άλλες φάσεις, στερεή και αέρια. Σκοπός αυτού είναι η επίτευξη μεγαλύτερης ακρίβειας στην επίλυση καθώς τα πιο σημαντικά φαινόμενα που καθορίζουν την εξάτμιση της σταγόνας και χρειάζεται να διερευνηθούν, λαμβάνουν χώρα στις διεπιφάνειες υγρού-στερεού και υγρού-αερίου. Μερικά από αυτά είναι η ακριβής θέση και ταχύτητα της γραμμής επαφής, ο υπολογισμός του ρυθμού εξάτμισης κ.α. Με την στοχευμένη πύκνωση του πλέγματος αποφεύγεται η δυσανάλογη αύξηση του υπολογιστικού κόστους για την επίτευξη ίδιας ακρίβειας χρησιμοποιώντας ισοκατανεμημένη πύκνωση. Παράλληλα, η πύκνωση του πλεγματος στις διεπιφάνειες διευκολύνει την σύγκλιση καθώς περιορίζεται η παραμόρφωση του πλέγματος και η ανάγκη για συχνά remeshing όταν εμφανίζονται μεγάλες βαθμίδες στα προς επίλυση μεγέθη.

Όταν εισάγονται οι παράμετροι του προβλήματος παράλληλα εισάγεται και η γωνία επαφής της απόθεσης της σταγόνας με το στερεό υπόστρωμα. Η προσομοίωση της εξάπλωσης θα δώσει τελικά το προφίλ της σταγόνας όταν αυτή ισορροπεί πάνω από το στερεό υπόστρωμα. Το προφίλ αυτό αντιστοιχεί στις αρχικές συνθήκες του προβλήματος της εξάτμισης.

3.1.3 Εξάτμιση της σταγόνας στο στερεό υπόστρωμα

Η εξαγωγή του προφίλ της σταγόνας είναι το τελευταίο προαπαιτούμενο προκειμένου να είναι δυνατή η κατάστρωση του μοντέλου της εξάτμισης. Αρχικά, επιλέγεται το είδος του μοντέλου που θα προσομοιωθεί (χρονικά εξαρτώμενη, στρωτή ροή με κινούμενο πλέγμα) και εισάγονται οι αρχικές παράμετροι του συστήματος, καταχωρούνται οι θερμοεξαρτώμενες ιδιότητες από την

βιβλιοθήκη του COMSOL και εκχωρείται εκ νέου η ταχύτητα μέσω της Eikonal. Παράλληλα, καταστρώνεται η γεωμετρία του χωρίου που θα προσομοιωθεί, η οποία αποτελείται από την στερεή επιφάνεια εναπόθεσης της σταγόνας, από τον περιβάλλοντα ατμοσφαιρικό χώρο, από την σταγόνα όπως αυτή λήφθηκε από την προσομοίωση του spreading και γίνεται η ενοποίηση της δομής. Σημειώνεται ξανά πως το χαρακτηριστικό διαστατικό μέγεθος είναι η ακτίνα (R_0) και η στερεή επιφάνεια και το περιβάλλον είναι, κατά πολύ, μεγαλύτερα από την ακτίνα.

Παράλληλα, όπως και στο spreading έτσι και εδώ, είναι αναγκαίο να καθοριστεί το πλέγμα για την χωρική διακριτοποίηση μερικών διαφορικών εξισώσεων. Τα στοιχεία του πλέγματος είναι τριγωνικά και ως ελάχιστη απαίτηση θεωρήθηκε η διατήρηση της ποιότητας του πλέγματος πάνω από ένα κατώφλι. Η ποιότητα των στοιχείων του πλέγματος είναι ένα αδιάστατο μέγεθος, το οποίο λαμβάνει τιμές από 0 έως 1. Η μονάδα αντιπροσωπεύει την τέλεια κανονική δομή τριγώνου, ανάλογα με το επιλεγμένο μέτρο ποιότητας, ενώ το μηδέν εκφράζει ένα εκφυλισμένο στοιχείο. Η πυκνότητα του πλέγματος, όπως και στις προηγούμενες περιπτώσεις, επιλέχθηκε να είναι πιο πυκνή κοντά στην επιφάνεια με μικρό μέγεθος τριγώνων και αραιότερη στις υπόλοιπες περιοχές. Το πλέγμα οφείλει να ακολουθεί την κίνηση της επιφάνειας της σταγόνας κατά την εξάτμιση. Αυτό επιτυγχάνεται με την παρακάτω κινηματική συνοριακή συνθήκη που εφαρμόζεται στην επιφάνεια της σταγόνας και συσχετίζει την ταχύτητα κίνησης του πλέγματος με τις ταχύτητες των φάσεων εκατατέρωθεν της επιφάνειας:

$$\boldsymbol{u_{mesh}} = \left(\boldsymbol{u_{liquid}} \cdot \boldsymbol{n} + \frac{\dot{m}'}{\rho_l}\right)\boldsymbol{n} \tag{3.3}$$

Τέλος, αναφορικά με το πλέγμα, η λειτουργία του κινούμενου πλέγματος (moving mesh) έχει ως αποτέλεσμα, εξαιτίας της παραμόρφωσης της σταγόνας, να παραμορφώνεται και το πλέγμα. Όταν η ποιότητα του πλέγματος αλλοιωθεί τόσο, ώστε να είναι χαμηλότερη από την επιθυμητή προδιαγραφή που είχε τεθεί από τον χρήστη, τότε το πλέγμα ανακατασκευάζεται αυτόματα, εκτελώντας remeshing.

Η επεξεργασία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης μπορούν να επεξεργαστούν τόσο με τα εργαλεία του COMSOL (διαγράμματα πεδίου ταχύτητας, κατανομής θερμοκρασίας κ.α) αλλά και με την χρήση του MATLAB. Στην συγκεκριμένη εργασία αξιοποιούνται και τα δύο λογισμικά.

Κεφάλαιο 4: Αποτελέσματα Προσομοιώσεων

Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζονται και ερμηνεύονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που πραγματοποιήθηκαν με την χρήση του λογισμικού COMSOL Multiphysics ®. Στόχος των προσομοιώσεων ήταν η μελέτη της εξάτμισης μικροσταγόνων σε λείες και τραχείες επιφάνειες, η διερεύνηση της επιρροής της θερμικής αγωγιμότητας του υποστρώματος καθώς και η επίδραση της θέρμανσης του υποστρώματος.

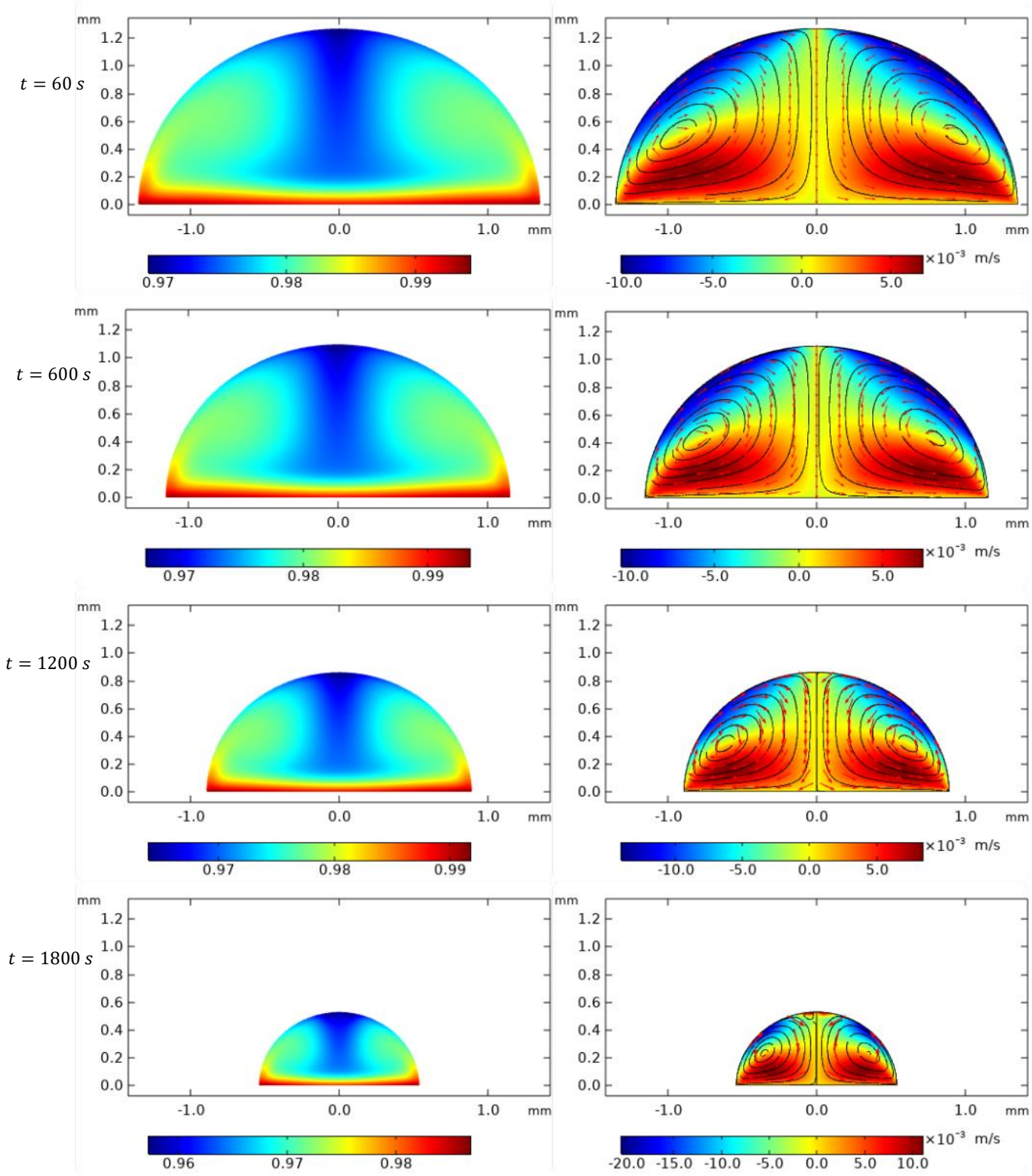
Αρχικά, μελετάται η εξάτμιση σε λείες επιφάνειες, διαπιστώνεται ο μηχανισμός εξάτμισης και στην συνέχεια τα ευρήματα συγκρίνονται με αυτά της εξάτμισης σε τραχεία επιφάνεια. Εξετάζεται η χρονική εξέλιξη της γωνίας επαφής της σταγόνας με το υπόστρωμα και η σχέση του ύψους και του όγκου της με τον χρόνο σε κάθε μία από τις δύο περιπτώσεις. Παράλληλα, συγκρίνονται οι παρατηρούμενοι μηχανισμοί εξάτμισης στις δύο περιπτώσεις.

Εν συνεχεία, μελετάται η ψύξη που προκαλεί η εξάτμιση της σταγόνας στο υπόστρωμα και παρουσιάζεται η θερμοκρασιακή κατανομή σε μια κάθετη τομή της επιφάνειας που διέρχεται από την περιοχή της τριφασικής γραμμής επαφής.

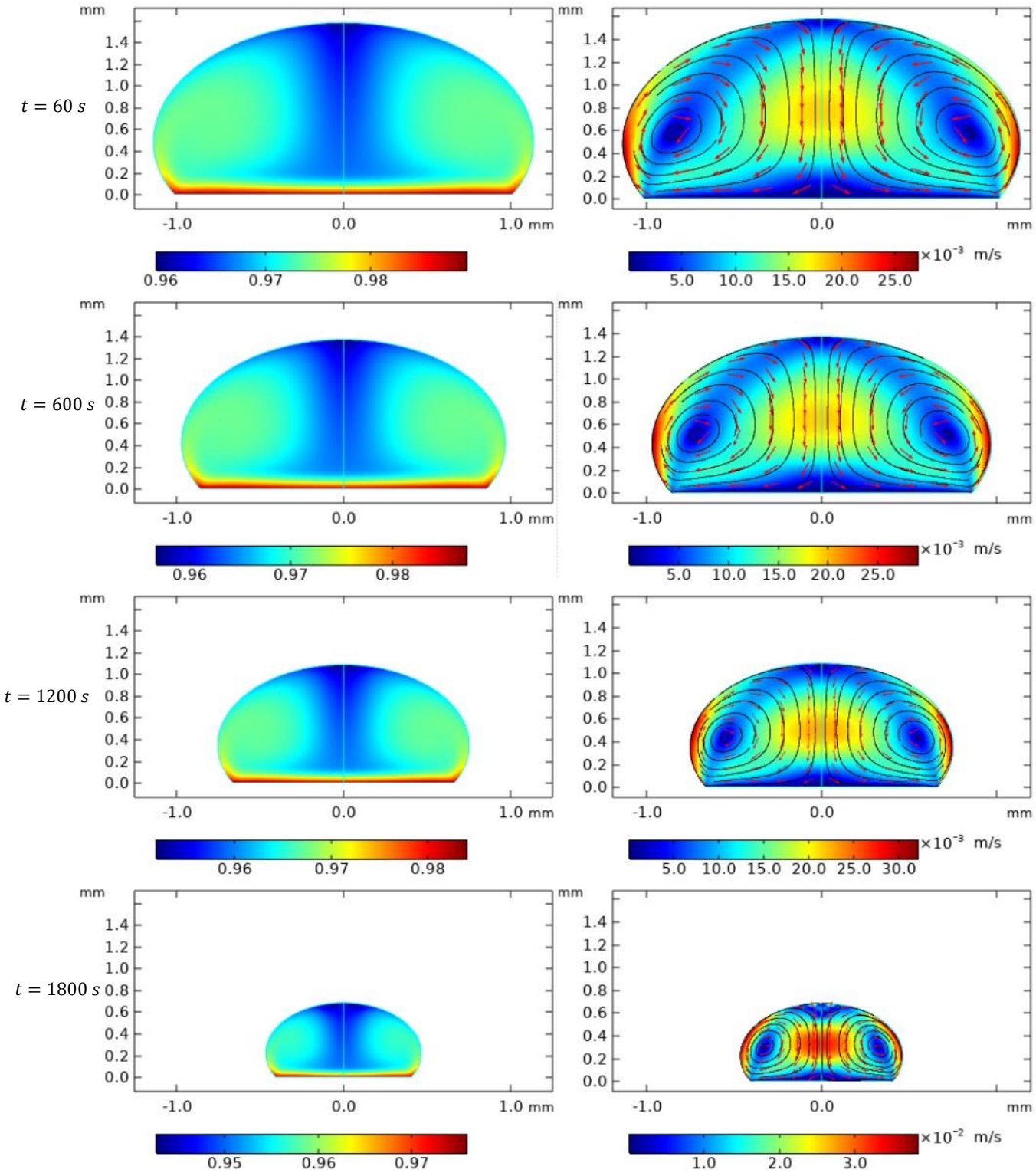
Στο παρόν κεφάλαιο, επίσης, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των παραμετρικών προσομοιώσεων για μεταβαλλόμενες τιμές του λόγου θερμικής αγωγιμότητας, k_R, του στερεού προς το υγρό και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με την βιβλιογραφία. Τέλος, συγκρίνονται τα αποτελέσματα μεταξύ της επιβολής θερμοκρασιακών συνθηκών στο υπόστρωμα, με την προσομοίωση της θέρμανσης του κατά 10°C και κατά 30°C πάνω από την θερμοκρασία του περιβάλλοντος που είχαν διεξαχθεί οι προηγούμενες μελέτες.

4.1 Εξάτμιση σε λείες επιφάνειες

Στην παρούσα ενότητα πραγματοποιούνται υπολογιστικές προσομοιώσεις εξάτμισης σταγόνων σε λείες επιφάνειες. Θα παρασταθούν 2 περιπτώσεις όμοιων σταγόνων που εξατμίζονται σε λείες επιφάνειες διαφορετικής διαβρεκτικότητας. Στην μία η γωνία επαφής είναι 90° και στην άλλη είναι 120°. Σημαντικό είναι να ληφθεί υπόψιν πως στην φύση δεν υπάρχουν επιφάνειες χωρίς τραχύτητα ακόμα και σε κλίμακα νανομέτρων, καθώς όλες εμφανίζουν γεωμετρική ή χημική τραχύτητα. Παρόλα αυτά, τέτοιου τύπου εξάτμιση ευνοείται ιδιαίτερα σε εξαιρετικά υδρόφοβες (υπερυδρόφοβες) επιφάνειες που εμφανίζουν μεγάλη γωνία επαφής της τάξεως των 150°-160°. Η αδιαστατοποιημένη θερμοκρασία που εμφανίζεται παρακάτω υπολογίστηκε από την εξίσωση: $(T - 273.15)/(T_{ambient} - 273.15)$.



Εικόνα 6. Στιγμιότυπα από την εξάτμιση της σταγόνας γωνίας επαφής 90°. Αριστερά η αδιάστατη κατανομή της θερμοκρασίας και δεξιά το πεδίο της ταχύτητας, μαζί με τις ροϊκές γραμμές και τα διανύσματα που απεικονίζουν την κατεύθυνση της ταχύτητας.



Εικόνα 7. Στιγμιότυπα από την εξάτμιση της σταγόνας γωνίας επαφής 120°. Αριστερά η αδιάστατη κατανομή της θερμοκρασίας και δεξιά το πεδίο της ταχύτητας, μαζί με τις ροϊκές γραμμές και τα διανύσματα που απεικονίζουν την κατεύθυνση της ταχύτητας.

Στις δύο παραπάνω εικόνες (*Εικόνα 6* και *Εικόνα 7*) παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση της εξάτμισης των δύο σταγόνων. Οι συνολικοί χρόνοι εξάτμισης της κάθε σταγόνας είναι αρκετά κοντινοί μεταξύ τους. Συγκεκριμένα, για την σταγόνα με γωνία επαφής 90° ο συνολικός χρόνος εξάτμισης είναι 2175s, ενώ για την σταγόνα με γωνία 120° ο χρόνος είναι 2200s. Από την παρατήρηση των στιγμιότυπων, φαίνεται πως καθ' όλη την διάρκεια του φαινομένου η γωνία επαφής της σταγόνας με το υπόστρωμα είναι σταθερή και η διάμετρος της σταγόνας διαρκώς μειώνεται. Ως εκ τούτου, ο παρατηρούμενος μηχανισμός εξάτμισης είναι ο Μηχανισμός Σταθερής Γωνίας Επαφής.

Παράλληλα, παρόλο που η παρατηρούμενη γωνία των 120° δηλώνει την υδροφοβικότητα της επιφάνειας πάνω στην οποία πραγματοποιείται η εξάτμιση και η γωνία επαφής των 90° εκφράζει μία ενδιάμεση κατάσταση, και οι δυο σταγόνες εξατμίζονται με τον ίδιο μηχανισμό. Η τέλεια γεωμετρική και χημική δομή της επιφάνειας, που επικάθονται οι σταγόνες, έχει ως αποτέλεσμα της εμφάνιση αυτού του μηχανισμού εξάτμισης, καθώς στην περίπτωση ύπαρξης τραχύτητας, οι ατέλειες του υποστρώματος δημιουργούν ένα ενεργειακό φράγμα που δεν επιτρέπει την αποκόλληση της γραμμής επαφής, προκειμένου αυτή να προχωρήσει προς τον άξονα συμμετρίας της σταγόνας.

Από τα αποτελέσματα των δύο παραπάνω προσομοιώσεων, απεικονίζεται η ταχύτητα από την χρονική στιγμή των 60s έως και τα 1800s. Παρατηρούνται τα φαινόμενα ανακυκλοφορίας, τα οποία εμφανίζονται εξαιτίας της ανομοιόμορφης εξάτμισης της σταγόνας και, παράλληλα, η αδιάστατη θερμοκρασιακή κατανομή.

Εξαιτίας της υδροφοβικότητας της επιφάνειας, η ακτίνα εξάπλωσης της σταγόνας και το ύψος της κορυφής είναι άμεσα συγκρίσιμα μεγέθη με πολύ κοντινές τιμές. Όσο πιο μεγάλος είναι ο λόγος της ακτίνας της σταγόνας προς το ύψος της, τόσο μεγαλύτερη θα είναι και η θερμοκρασιακή διαφορά μεταξύ της κορυφής και του υποστρώματος. Αυτός είναι ο λόγος που η κορυφή της σταγόνας εμφανίζεται ψυχρότερη, όπως φαίνεται στο αριστερό σκέλος της *Εικόνας 8* και *9*. Συγκεκριμένα, στις δύο παραπάνω περιπτώσεις, ο μεγαλύτερος ρυθμός εξάτμισης εμφανίζεται στην περιοχή της τριφασικής γραμμής επαφής, καθώς το ύψος της σταγόνας είναι αρκετά μεγάλο, ώστε να μην δυνατή η μεταφορά θερμότητας προς την κορυφή. Έτσι, παρόλο που η TPL έχει εντονότερο ρυθμό εξάτμισης, άρα και ψύξης, έχει, παράλληλα, και την υψηλότερη θερμοκρασία.

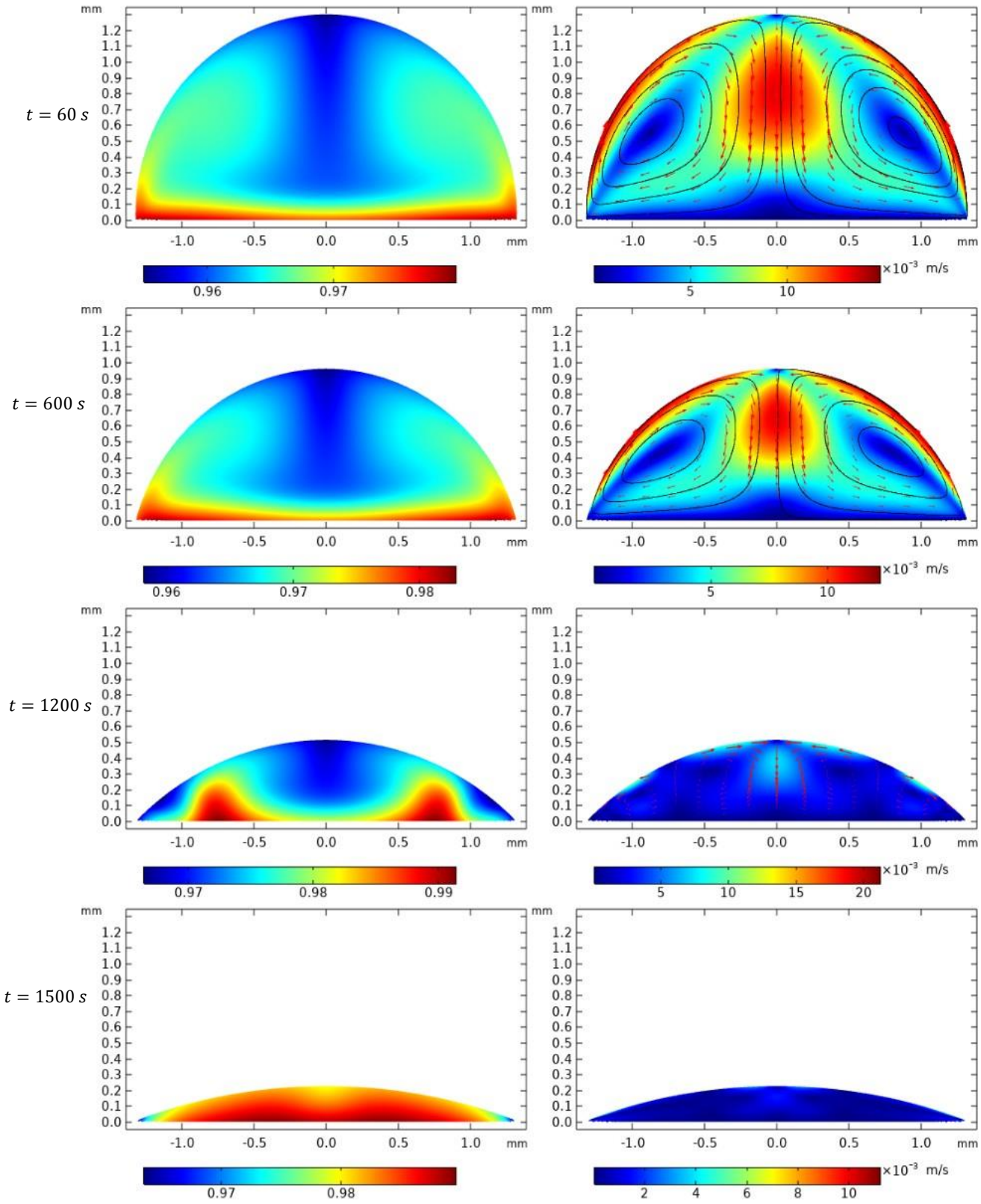
Εντός του ρευστού, όπως εξηγήθηκε παραπάνω, υπάρχουν περιοχές θερμότερες από άλλες. η θερμότερη περιοχή είναι πέριξ της τριφασικής γραμμής επαφής. Η βαθμίδα θερμοκρασίας που αναπτύσσεται εντός της σταγόνας προκαλεί μία αντίστροφη βαθμίδα επιφανειακής τάσης. Συγκεκριμένα, μεγαλύτερη επιφανειακή τάση έχουν οι περιοχές με μικρότερη θερμοκρασία..

Αποτέλεσμα αυτών των βαθμίδων είναι η εκδήλωση της ροής Marangoni, καθώς προκαλείται ροή από περιοχές με μικρότερη επιφανειακή τάση προς περιοχές με μεγαλύτερη. Η ροή Marangoni κινεί το υγρό αρχικά προς την κορυφή και κατόπιν κατά μήκος της διεπιφάνειας στερεού – υγρού προς την θερμότερη γραμμή επαφής, όπως παρατηρείται και στις παραπάνω εικόνες. Η φορά αυτής της ροής είναι αντίθετη από την φορά των δεικτών του ρολογιού.

Τέλος, μετά από την υπολογιστική ανάλυση των δεδομένων της προσομοίωσης υπολογίστηκε, μέσω κώδικα, πως η υπολογισμένη γωνία επαφής είναι πολύ κοντινή στην επιθυμητή. Συγκεκριμένα, για δοθείσα γωνία επαφής 90°, η υπολογισθείσα γωνία ήταν περίπου 88°. Όμοια, για την δεύτερη σταγόνα, η γωνία Young τέθηκε ίση με 120°, ενώ τελικά, από την προσαρμογή των αποτελεσμάτων, υπολογίστηκε ίση με περίπου 117.5°. Η χρονική εξέλιξη της γωνίας και τα υπόλοιπα κρίσιμα μεγέθη της θα παρουσιαστούν παρακάτω, για να συγκριθούν με την συμπεριφορά της εξάτμισης σε τραχείες επιφάνειες.

4.2 Εξάτμιση σε τραχεία επιφάνεια και σύγκριση με την λεία

Σε αυτή την περίπτωση εξετάζεται η εξάτμιση μίας σταγόνας σε τραχεία επιφάνεια, η οποία έχει γωνία Young ίση με 90° και παρατηρούνται οι μηχανισμοί του φαινομένου. Στην προκειμένη, ο χρόνος εξάτμισης είναι σημαντικά μικρότερος από την εξάτμιση σε λεία επιφάνεια και είναι ίσος με 1745s. Ο χρόνος εξάτμισης της ίδιας σταγόνας σε μία λεία επιφάνεια και σε μία τραχεία φαίνεται να ακολουθούν τα συμπεράσματα που προκύπτουν από την βιβλιογραφία.[6] Η συνέπεια των αποτελεσμάτων των μοντέλων με την βιβλιογραφία δείχνουν την αποτελεσματικότητα της πρόβλεψης της συμπεριφοράς του φαινομένου και την εγκυρότητα των υπολογισμών. Για σύγκριση, όπως φάνηκε στην προηγούμενη ενότητα, ο χρόνος εξάτμισης της σταγόνας με γωνία 90° σε λεία επιφάνεια ήταν στα 2175s. Τα αντίστοιχα στιγμιότυπα που ελήφθησαν, ακολουθούν παρακάτω.



Εικόνα 8. Στιγμιότυπα από την εξάτμιση της σταγόνας γωνίας επαφής 90° πάνω σε τραχεία επιφάνεια. Αριστερά η αδιάστατη κατανομή της θερμοκρασίας και δεξιά το πεδίο της ταχύτητας, μαζί με τις ροϊκές γραμμές και τα διανύσματα που απεικονίζουν την κατεύθυνση της ταχύτητας.

Από την παραπάνω εικόνα (*Εικόνα 8*) είναι εμφανής η διαφορά των μηχανισμών εξάτμισης των σταγόνων που εναποτίθενται σε τραχείες και σε λείες επιφάνειες. Τα στιγμιότυπα παρουσιάζουν διάφορα στάδια της εξάτμισης της σταγόνας, η οποία, όπως φαίνεται, διατηρεί σταθερή ακτίνα επαφής με το υπόστρωμα καθ' όλη την χρονική εξέλιξη του φαινομένου. Όπως είναι αντιληπτό, ο μηχανισμός που ακολουθεί η εξάτμιση με τον Μηχανισμό Σταθερής Ακτίνας Επαφής με το υπόστρωμα. Σε αυτό τον μηχανισμό, όπως έχει συζητηθεί, το ύψος της σταγόνας και η φαινόμενη γωνία επαφής διαρκώς μειώνονται, όπως θα παρατηρηθεί στις *Εικόνες 10* και *11* παρακάτω.

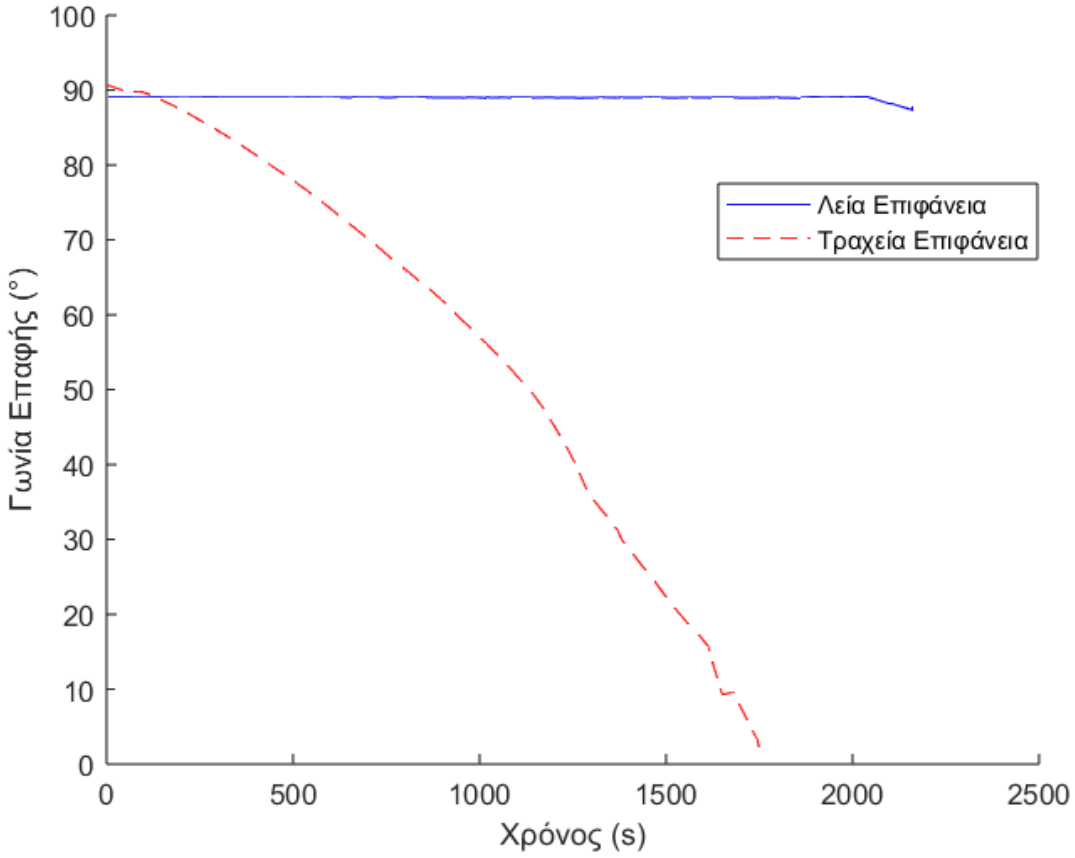
Στην αριστερή πλευρά της *Εικόνας 8* εμφανίζεται η αδιάστατη κατανομή της θερμοκρασίας εντός της σταγόνας. Στα αρχικά στάδια της εξάτμισης, παρατηρείται μία θερμοκρασιακή διαφορά μεταξύ της κορυφής και της τριφασικής γραμμής επαφής (TPL) της σταγόνας. Καθώς η εξάτμιση εξελίσσεται, η κορυφή της σταγόνας μειώνεται σε ύψος και θερμαίνεται. Συγκεκριμένα, η υψηλότερη θερμοκρασία που αποκτά η TPL είναι περίπου $T_{max} = 297.6K$ στην χρονική στιγμή $t = 750s$. Εκείνη την στιγμή, η θερμοκρασία της κορυφής είναι σχεδόν 0.5K χαμηλότερη.

Μετά τα 750s, η θερμοκρασία της TPL ακολουθεί φθίνουσα πορεία, μέχρι να εξισωθεί με την θερμοκρασία της κορυφής, την χρονική στιγμή $t = 1250s$. Από αυτό το σημείο και μετά, παρατηρείται το φαινόμενο αντιστροφής της ανακυκλοφορίας. Η περιοχή της κορυφής εμφανίζεται θερμότερη και η θερμοκρασία της συνεχίζει να αυξάνεται, ενώ στην περιοχή της TPL μειώνεται. Όπως έχει ήδη εξηγηθεί, οι νέες βαθμίδες θερμοκρασίας ωθούν στην αντιστροφή της ροής.

Προκειμένου να είναι κατανοητή η διαφορά μεταξύ των μηχανισμών της εξάτμισης σε μία λεία και μία τραχεία επιφάνεια, παρακάτω ακολουθούν κάποια συγκεντρωτικά διαγράμματα για τα βασικά μεγέθη που διέπουν τους δύο παρατηρούμενους μηχανισμούς. Οι εξατμίσεις που συγκρίνονται αφορούν την ίδια σταγόνα, με γωνία Young ίση με 90° και ίδιες συνθήκες διεξαγωγής της προσομοίωσης.

Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων τροφοδοτήθηκαν στο MATLAB® και έγινε προσαρμογή των δεδομένων μέσω κώδικα. Τα συγκρινόμενα μεγέθη είναι η χρονική εξέλιξη της γωνίας επαφής της κάθε σταγόνας με την επιφάνεια, η χρονική εξέλιξη του ύψους της κάθε σταγόνας αλλά και η εξέλιξη του όγκου της ως προς τον χρόνο. Τα ευρήματα παρουσιάζονται στις εικόνες που ακολουθούν και ευθυγραμμίζονται με την συμπεριφορά που περιγράφεται από την βιβλιογραφία[1,6] και αναλύεται στην Ενότητα 2.3.

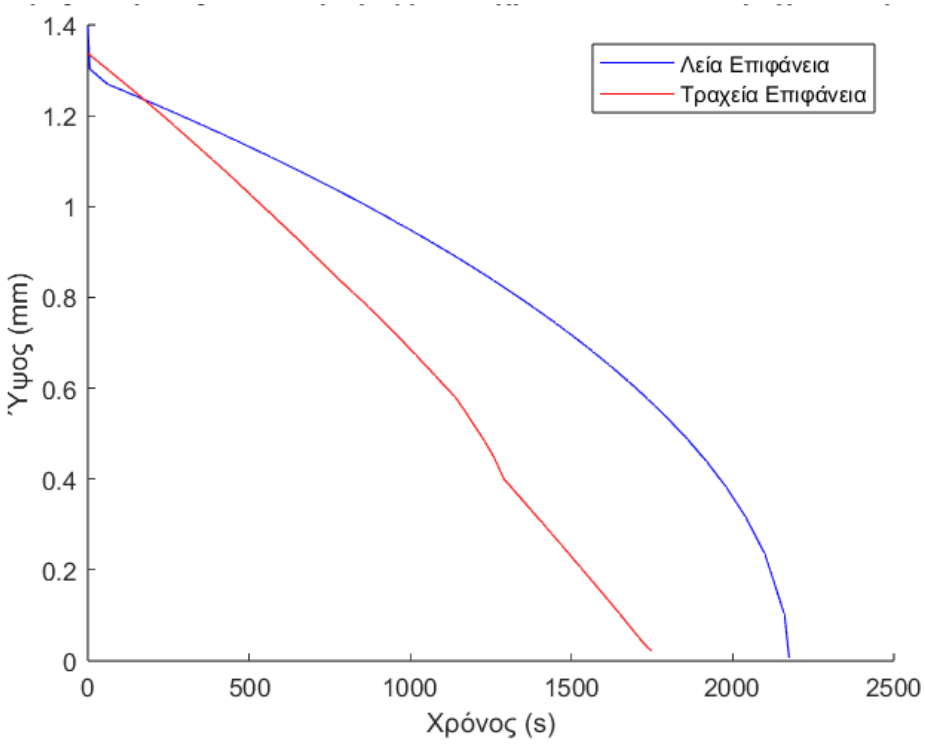
Στην *Εικόνα 9* συγκρίνεται η χρονική εξέλιξη της γωνίας επαφής των δύο σταγόνων. Με συνεχή γραμμή αναπαρίσταται η εξάτμιση στην λεία επιφάνεια, ενώ με διακεκομμένη, στην τραχεία. Και για τις δύο σταγόνες παρατηρείται αρχική γωνία ίση με 90°, αλλά στην λεία επιφάνεια η γωνία επαφής παραμένει σταθερή μέχρι τον ολοκλήρωση της εξάτμισής της. Από την άλλη πλευρά, η σταγόνα που εξατμίζεται στην τραχεία επιφάνεια έχει μεταβαλλόμενη γωνία επαφής σε συνάρτηση με τον χρόνο. Η σχέση που δείχνει να συνδέει τα δύο μεγέθη είναι παραβολική.



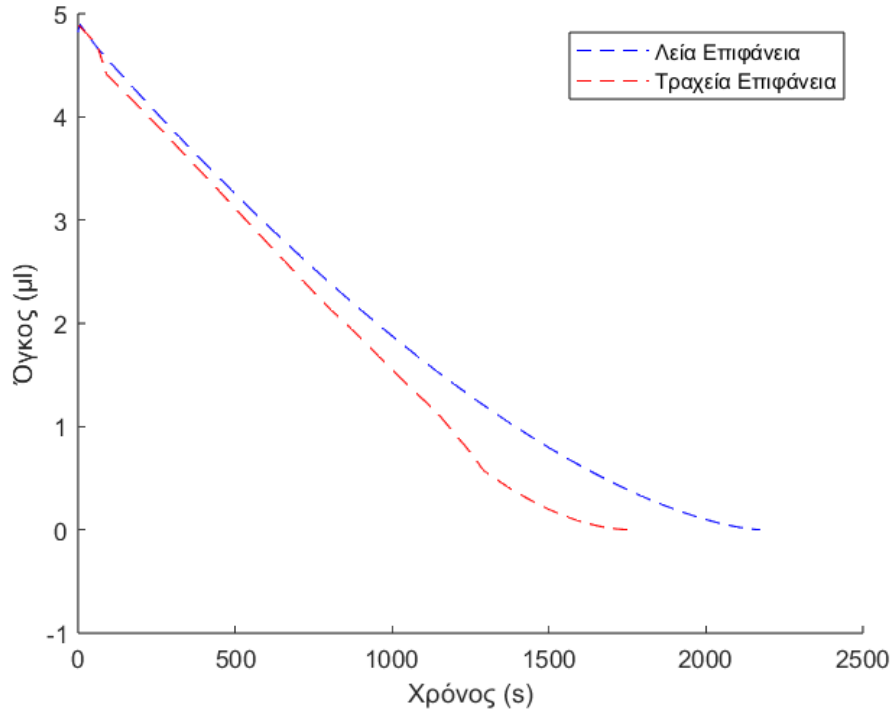
Εικόνα 9. Χρονική εξέλιξη γωνίας επαφής των δύο όμοιων σταγόνων στην λεία και την τραχεία επιφάνεια.

Το διάγραμμα παρουσιάζει τα δύο διαφορετικά μοντέλα εξάτμισης που παρατηρήθηκαν στις προσομοιώσεις, αυτό του Μηχανισμού Σταθερής Γωνίας Επαφής, σύμφωνα με το οποίο εξηγείται πώς εξατμίζονται σταγόνες σε λείες επιφάνειες ή σε εξαιρετικά υπερυδρόφοβες επιφάνειες, και ο Μηχανισμός Σταθερής Ακτίνας επαφής με την επιφάνεια, που ερμηνεύει την συμπεριφορά της εξάτμισης σταγόνων σε τραχείες επιφάνειες. Παράλληλα, επιβεβαιώνεται με την βιβλιογραφία και η βραδύτερη εξάτμιση σε λείες επιφάνειες από ότι σε τραχείες.[6]

Στα δύο επόμενα διαγράμματα που ακολουθούν συγκρίνονται και τα ύψη των κορυφών της κάθε σταγόνας αλλά και ο συνολικός όγκος της κάθε σταγόνας σε συνάρτηση με τον χρόνο. Στο διάγραμμα του ύψους, η τραχεία επιφάνεια δείχνει να έχει μία σχεδόν γραμμική σχέση με τον χρόνο, σε αντίθεση με την λεία που μοιάζει πολυωνυμική, ενώ στο διάγραμμα του όγκου φαίνεται πως στους ίδιους χρόνους, ο όγκος της σταγόνας που εξατμίζεται στο τραχύ υπόστρωμα είναι μικρότερος, συγκριτικά με το αντίστοιχο λείο. Αυτό το αποτέλεσμα είναι αναμενόμενο, καθώς στην τραχεία επιφάνεια παρατηρούνται ταχύτεροι ρυθμοί εξάτμισης, συνεπώς η απώλεια μάζας σε ίδιο χρόνο θα είναι μεγαλύτερη. Τα αποτελέσματα ακολουθούν παρακάτω.



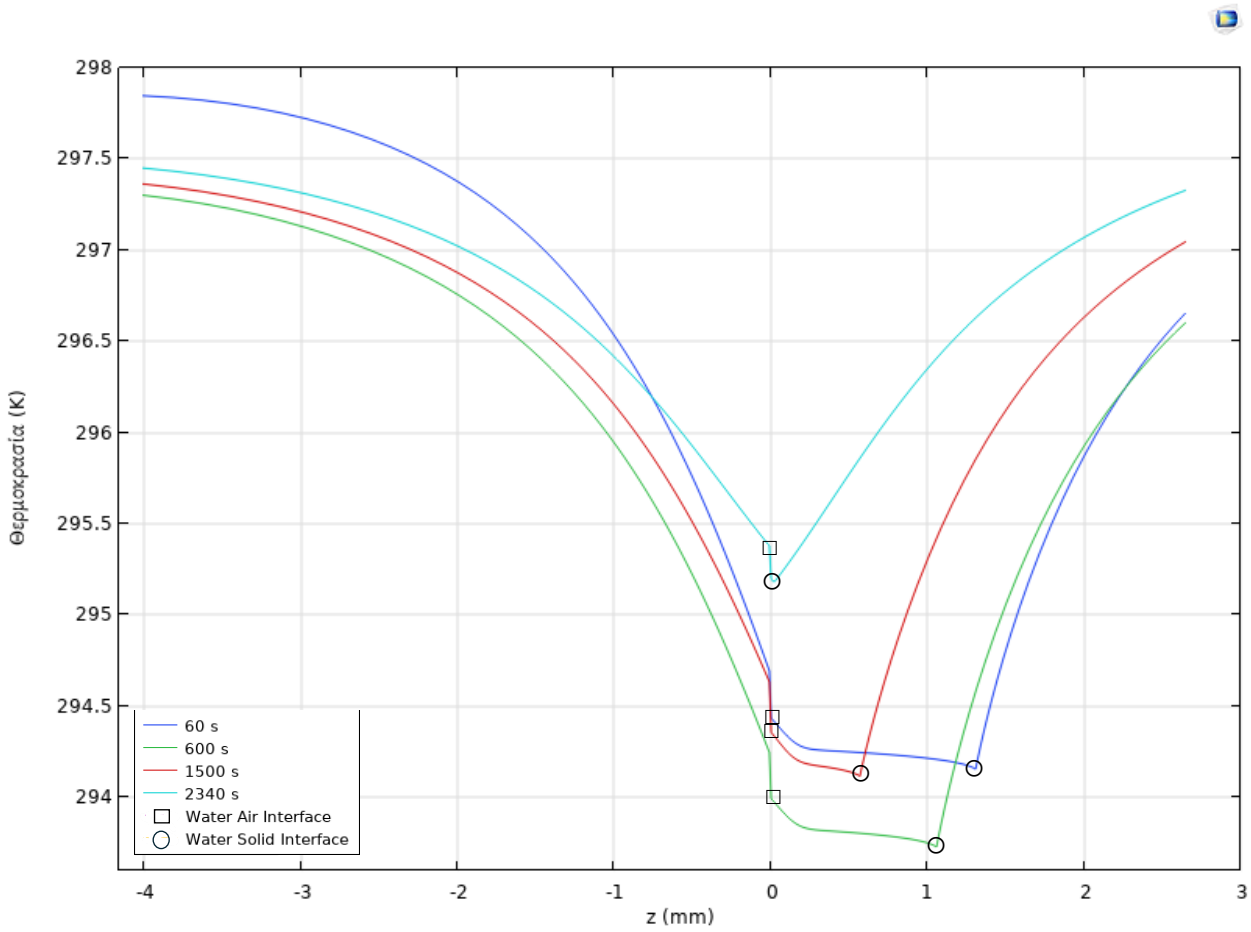
Εικόνα 10. Χρονική εξέλιξη του ύψους των δύο όμοιων σταγόνων στην λεία και την τραχεία επιφάνεια.



Εικόνα 11. Χρονική εξέλιξη του όγκου των δύο όμοιων σταγόνων στην λεία και την τραχεία επιφάνεια

4.3 Ψύξη λόγω της Εξάτμισης

Κατά την εξάτμιση της σταγόνας, η περιοχή από την οποία εξατμίζεται με μεγαλύτερο ρυθμό το ρευστό είναι αυτή της TPL, και παρόλο που αναμένεται να εμφανίζει χαμηλότερη θερμοκρασία, μέχρι και την αναστροφή της ροής, αυτή είναι θερμότερη εξαιτίας της αγωγής θερμότητας όπως έχει αναλυθεί σε προηγούμενο κεφάλαιο. Παρακάτω ακολουθούν δύο διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας σε δύο κάθετες τομές της σταγόνας. Η μία τομή είναι κατά μήκος του άξονα συμμετρίας της και η άλλη κατά μήκος της τριφασικής γραμμής επαφής (*Εικόνα 12* και *Εικόνα 13* αντίστοιχα).



Εικόνα 12. Κατανομή θερμοκρασία κατά μήκος τον άξονα συμμετρίας για επιλεγμένους χρόνους εξάτμισης. Εμφανής επίσης η περιοχή της περιβάλλουσας ατμόσφαιρας γύρω από την σταγόνα.

Η *Εικόνα 12* παρουσιάζει την θερμοκρασιακή κατανομή κατά μήκος του άξονα συμμετρίας ($r = 0$) της σταγόνας για διαφορετικούς χρόνους. Στην εικόνα υπάρχουν τρεις διακριτές περιοχές:

- Η πρώτη περιοχή, στα αριστερά έχει $z < 0\,mm$ και είναι η περιοχή του στερεού υποστρώματος.
- Στο κέντρο, είναι η περιοχή του σταγονιδίου.

- Στα δεξιά είναι η περιοχή του περιβάλλοντα αέρα.

Η εξάτμιση στην περιοχή του σταγονιδίου δείχνει πως το φαινόμενο προκαλεί την ψύξη του, καθώς παρατηρείται μείωση της θερμοκρασίας του. Παράλληλα, και η περιοχή του στερεού υποστρώματος δείχνει να ψύχεται, καθώς η θερμοκρασία του σε βάθος 4mm, που είναι το πιο βαθύ σημείο που παρουσιάζεται στο συγκεκριμένο διάγραμμα, δείχνει να είναι περίπου 3K μεγαλύτερη από ότι στην διεπιφάνεια υγρού-στερεού.

Από την άλλη, ο αέρας που βρίσκεται μέχρι και 2 mm πάνω από τον άξονα συμμετρίας της σταγόνας θερμαίνεται, με την αύξηση της θερμοκρασίας του να ανέρχεται στους περίπου 2K. Η κατανομή της θερμοκρασίας στην υγρή και αέρια φάση, λόγω αγωγής, από την επίλυση της **Ε*ξίσωσης 2.5***, είναι δευτέρου βαθμού. Από την γραφική αναπαράσταση της θερμοκρασίας στην περιοχή του αέρα, παρατηρείται παραβολική κατανομή, που υποδεικνύει πως ο μηχανισμός μεταφοράς θερμότητας μεταξύ της σταγόνας και του αέρα είναι κυρίως μέσω αγωγής.

Μία ακόμα σημαντική, αν και μικρή, περιοχή που παρατηρείται είναι αυτή μεταξύ των διεπιφανειών του στερεού υποστρώματος και της σταγόνας. Αντιστοιχεί στο σχεδόν κατακόρυφο τμήμα που βρίσκεται πολύ κοντά στο $z = 0\ mm$ και αντιστοιχεί στο δ_{min}. Όπως έχει συζητηθεί, η ποσότητα αυτή είναι μία παράμετρος του μοντέλου, που έχει εισαχθεί στην εξίσωση της πίεσης αποκόλλησης για να περιγράψει την αλληλεπίδραση της διεπιφάνειας στερεού-υγρού και συγκεκριμένα το «κόλλημα» της γραμμής επαφής στο υπόστρωμα.

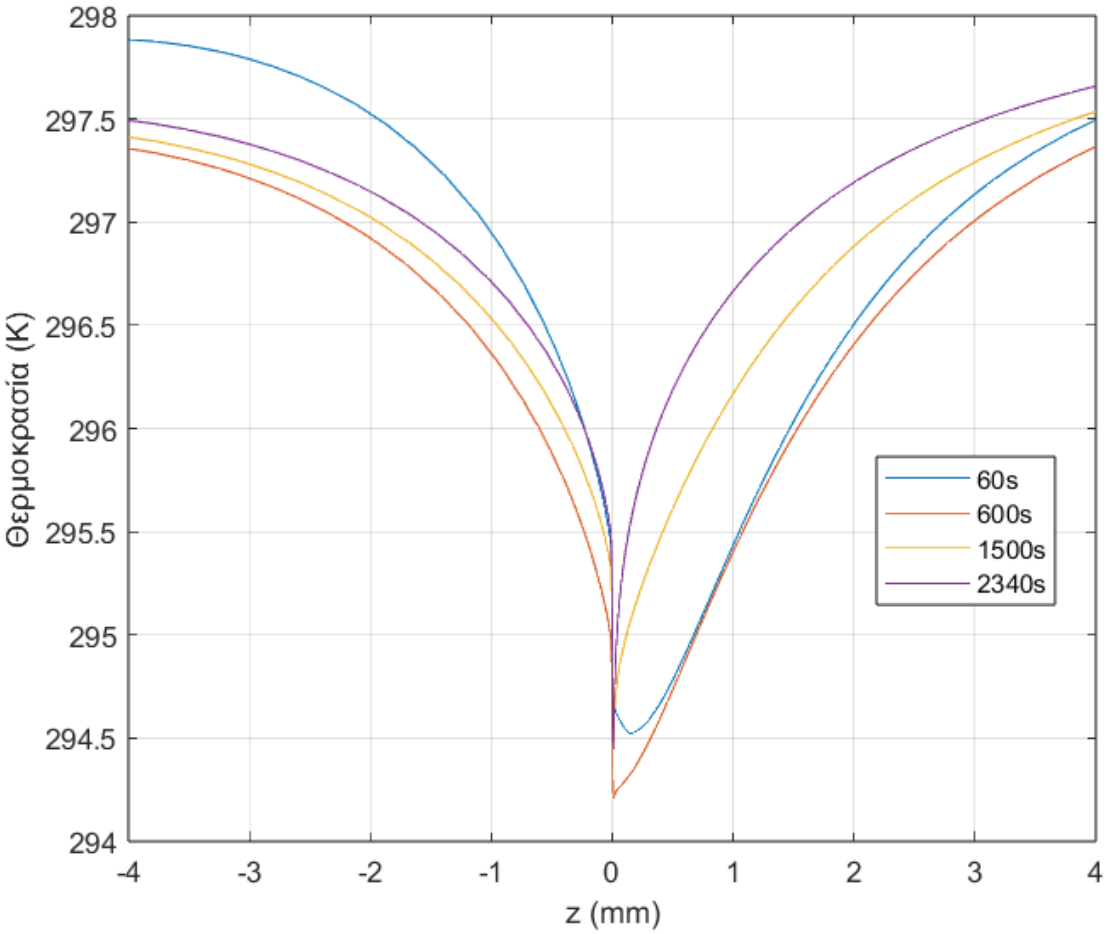
Το παραπάνω διάγραμμα, μετά την χρονική στιγμή των 900s εξάγει παρεμφερή αποτελέσματα σχετικά με την θερμοκρασιακή στο υπόστρωμα. Για τον χρόνο αυτό επιλέγεται να αναζητηθεί το βάθος, στο οποίο επιτυγχάνεται το 95% της θερμοκρασίας περιβάλλοντος. Υπενθυμίζεται πως αυτή είναι ίση με 25°C. Το αποτέλεσμα που προέκυψε είναι πως το στερεό υπόστρωμα αποκτά θερμοκρασία ίση με τουλάχιστον το 95% του περιβάλλοντος σε βάθος μεγαλύτερο των $2.31mm$, Με άλλα λόγια, η ικανότητα της σταγόνας να ψύξει το υπόστρωμα, σύμφωνα με αυτή την προδιαγραφή είναι ίση με $2.2R_0$, όπου R_0 ίσο με την αρχική ακτίνα εξάπλωσης της σταγόνας.

Η εικόνα που ακολουθεί (*Εικόνα 13*) παρουσιάζει την κατανομή της θερμοκρασίας σε μία κάθετη τομή που διέρχεται από την Τριφασική Γραμμή Επαφής (TPL) για διάφορες χρονικές στιγμές (60s, 600s, 1500s, 2340s). Το μεγαλύτερο βάθος ψύξης του υποστρώματος, για τους παρουσιασμένους χρόνους, είναι στα 600s. Η ψύξη οφείλεται στην εναλλαγή θερμότητας, μέσω αγωγής, μεταξύ του στερεού και του υγρού, ενώ το υπόστρωμα έχει θερμοκρασία τουλάχιστον ίση με το 95% της θερμοκρασίας περιβάλλοντος (25°C) σε βάθος $1.96mm$ ή $1.85R_0$.

Παρατηρείται πως το βάθος ψύξης του υποστρώματος είναι μεγαλύτερο στην τομή κατά μήκος του άξονα συμμετρίας από ότι στην τριφασική γραμμή επαφής. Παρόλο που η γραμμή επαφής έχει τον μεγαλύτερο ρυθμό εξάτμισης, από τις υπόλοιπες περιοχές της σταγόνας, εξαιτίας των φαινομένων που έχουν περιγραφεί, έχει και την μεγαλύτερη θερμοκρασία. Η εναλλαγή θερμότητας της σταγόνας με την στερεή επιφάνεια, μέσω αγωγής, έχει ως αποτέλεσμα μικρότερη

ψύξη του υποστρώματος, που οδηγεί σε μικρότερα βάθη ψύξης αλλά και υψηλότερες παρατηρούμενες θερμοκρασίες στο στερεό.

Παράλληλα, υπολογίστηκε και ο ρυθμός απώλειας μάζας για έναν ενδιάμεσο χρόνο του φαινομένου. Την χρονική στιγμή $t = 900s$ βρέθηκε πως ο ρυθμός εξάτμισης ήταν $9.68 \cdot 10^{-4}\, kg/m^2$ και ο ρυθμός απαγωγής θερμότητας από το στερεό $4.6 \cdot 10^{-3} W$.



Εικόνα 13. Θερμοκρασιακή κατανομή σε κάθετη τομή που διέρχεται από την τριφασική γραμμή επαφής.

4.4 Προσομοίωση εξάτμισης για μεταβαλλόμενες τιμές του λόγου k_R

Οι επιλεχθείσες τιμές του λόγου k_R εμπίπτουν στις τρεις κατηγορίες που ορίστηκαν από την έρευνα του Ristenpart et al. Οι συγκεκριμένες μοντελοποιήσεις εξελίχθηκαν με τις εξής παραμέτρους:

- Προσομοίωση 1: λόγος $k_R = 0.4$
- Προσομοίωση 2: λόγος $k_R = 1.9$
- Προσομοίωση 3: λόγος $k_R \gg 2$

Για την πρώτη προσομοίωση ($k_R = 0.4$), το υλικό του υποστρώματος είναι πολυτετραφθοροαιθυλένιο ή, εμπορικά, το γνωστό τεφλόν. Η θερμική αγωγιμότητα του τεφλόν είναι κοντά στο $0.24 W/mK$ και διαιρεμένο με την θερμική αγωγιμότητα του νερού προκύπτει λόγος $k_R = 0.4$. Το επόμενο υλικό που επιλέχθηκε ήταν το γυαλί, το οποίο έχει θερμική αγωγιμότητα περίπου $1.2\ W/mK$ και τελικά θα δώσει λόγο $k_R = 1.9$, ενώ, τέλος, το τρίτο υλικό που επιλέχθηκε για το στερεό υπόστρωμα ήταν το τιτάνιο, το οποίο ως καλός αγωγός της θερμότητας, έχει συντελεστή $7.5\ W/mK$ και δίνει τον επιθυμητό λόγο $k_R = 12$.

Η διαφορά στις αγωγιμότητες των υλικών οδηγεί στο συμπέρασμα της αναμενόμενης χρονικής υστέρησης στην διάδοση της θερμότητας στα μονωτικά υλικά. Αυτό, με την σειρά του, προκαλεί διαφορά στους συνολικούς χρόνους εξάτμισης των σταγόνων στις τρεις διαφορετικές περιπτώσεις. Τα λιγότερο θερμικά αγώγιμα υλικά καθυστερούν να μεταφέρουν την θερμότητα στην περιοχή της σταγόνας, επιβραδύνοντας την διαδικασία της εξάτμισης. Από την άλλη, τα αγώγιμα υλικά προωθούν αυτή την διάδοση θερμότητας, με αποτέλεσμα μικρότερους χρόνους εξάτμισης.

Πράγματι, από τα δεδομένα των προσομοιώσεων φάνηκε πως στο λιγότερο αγώγιμο υλικό, δηλαδή στο τεφλόν, παρατηρήθηκε ο βραδύτερος χρόνος εξάτμισης, στα 2350s. Στο γυαλί ο χρόνος ήταν μικρότερος, δεδομένης της μεγαλύτερης θερμικής αγωγιμότητας του συγκριτικά με το τεφλόν, και εκτιμήθηκε στα 1970s και, τέλος, στο τιτάνιο, ένα μέταλλο-αγωγό της θερμότητας, ο χρόνος προσομοίωσης για την πλήρη εξάτμιση της σταγόνας ήταν στα 1796s.

Παρακάτω θα αποτυπωθούν στιγμιότυπα από την εξάτμιση της σταγόνας πάνω στα τρία αυτά υλικά, θα σχολιαστούν οι ανακυκλοφορίες που εμφανίζονται εντός του υγρού καθώς και σε ποια κρίσιμα χαρακτηριστικά της σταγόνας εμφανίζεται το εκάστοτε φαινόμενο και τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων θα συγκριθούν με την βιβλιογραφία.

<u>Προσομοίωση 1: λόγος $k_R = 0.4$</u>

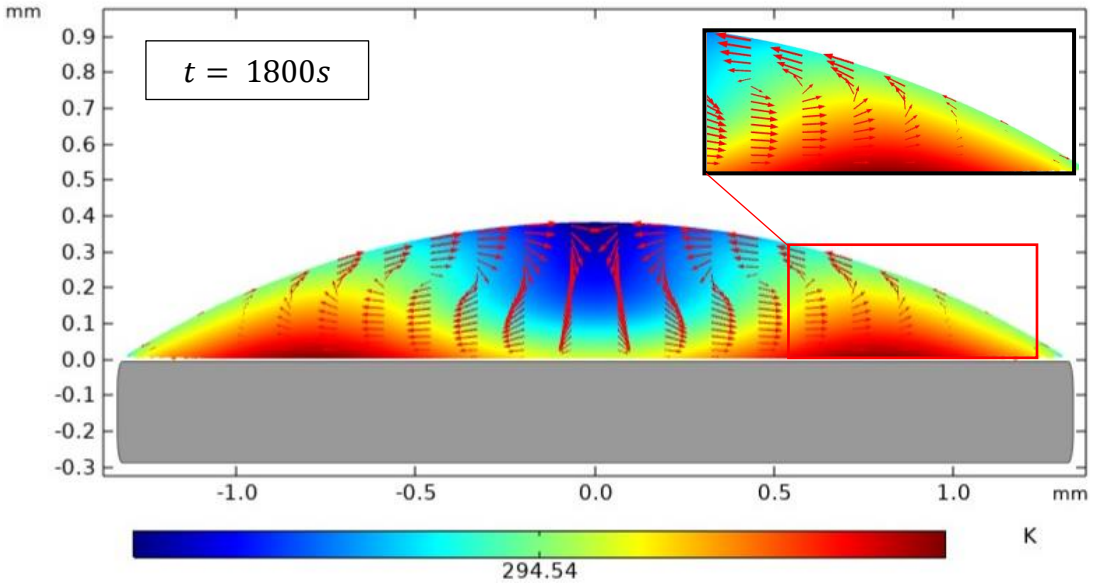
Όπως φάνηκε από την αρχική μελέτη της εξάτμισης σταγόνων σε τραχείες επιφάνειες, ο μηχανισμός είναι αυτός της Σταθερής Ακτίνας Επαφής με την στερεή επιφάνεια, γεγονός που προκαλούσε μείωση της φαινόμενης γωνίας επαφής και ελάττωση του ύψους της κορυφής του υγρού. Όσο η κορυφή ήταν αρκετά υψηλή, ώστε να είναι ψυχρότερη από την βάση, η πορεία της ανακυκλοφορίας ήταν αντίθετη της φοράς των δεικτών του ρολογιού, δηλαδή από την TPL προς την κορυφή και κατόπιν ακτινικά προς τον άξονα συμμετρίας και ξανά στην TPL. Με την εξέλιξη της εξάτμισης, όταν το ύψος γίνει αρκετά χαμηλό, η μέχρι πρότινος, ψυχρότερη κορυφή, πλέον εμφανίζεται θερμότερη και η κυκλοφορία αντιστρέφεται. Αυτή η συμπεριφορά ευθυγραμμίζεται με την βιβλιογραφία, όπως έχει μελετηθεί από τον Ristenpart et al και αναφέρεται και στην ενότητα **2.5.1**. Βέβαια, το ύψος της σταγόνας είναι άμεσα συνυφασμένο με την παρατηρούμενη γωνία επαφής με την στερεή επιφάνεια

Αυτό που παρατηρήθηκε στο μοντέλο ήταν πως από την αρχή της εξάτμισης μέχρι και την χρονική στιγμή των 1800s η μορφή των ανακυκλοφοριών ήταν αυτή που περιεγράφηκε παραπάνω, δηλαδή

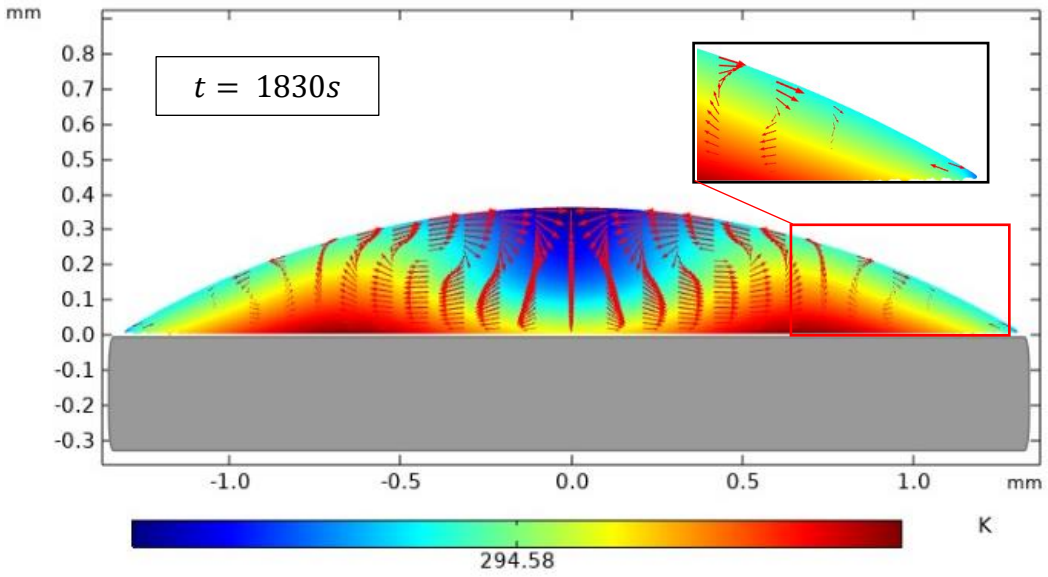
από την TPL προς τον άξονα συμμετρίας και ξανά προς την άκρη της σταγόνας, και παρουσιάζεται στην παρακάτω *Εικόνα 14*. Μετά την χρονική στιγμή των 1800s φαίνεται πως, όταν η εξάτμιση πλησιάζει το κρίσιμο σημείο, όπως παρατηρείται στην *Εικόνα 15*, πραγματοποιείται η αντιστροφή της φοράς των βελών κοντά στην TPL, ορόσημο που σηματοδοτεί την αντιστροφή της φοράς της ροής Marangoni.

Παράλληλα, υπολογίστηκε ο ρυθμός εξάτμισης της σταγόνας μία ενδιάμεση χρονική στιγμή του φαινομένου, $t = 750s$ και βρέθηκε $8.6 \cdot 10^{-4} kg/m^2 s$ και την ίδια στιγμή το βάθος ψύξης της σταγόνας, που επιτυγχάνεται θερμοκρασία ίση από το 95% της θερμοκρασίας του περιβάλλοντος ήταν τα 1.96mm.

Όπως φαίνεται και στην *Εικόνα 14*, την χρονική αυτή στιγμή, η γωνία επαφής με το υπόστρωμα είναι περίπου 32.4°, τιμή που συμβαδίζει με αυτή της βιβλιογραφίας, καθώς, σύμφωνα με τον Ristenpart et al, η κρίσιμη τιμή της γωνίας για την αντιστροφή είναι οι 31°. Παράλληλα, κοντά σε εκείνη την χρονική στιγμή των 1830s (*Εικόνα 15*) φαίνονται να δημιουργούνται και δευτερεύουσες ανακυκλοφορίες, οι οποίες θα παρασταθούν σε μεταγενέστερα στιγμιότυπα.

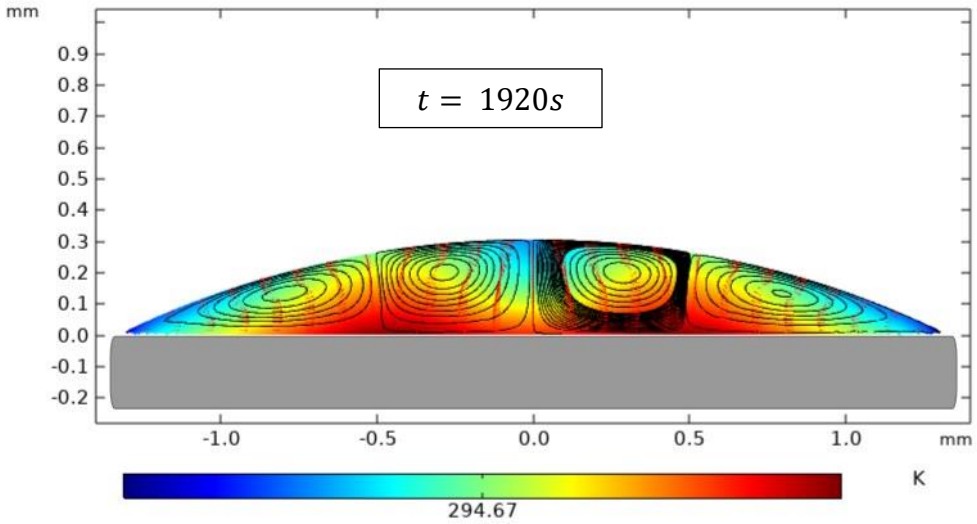


Εικόνα 14. Θερμοκρασιακή κατανομή εντός της σταγόνας και βέλη που δείχνουν την κατεύθυνση της ανακυκλοφορίας πριν το κρίσιμο σημείο της αντιστροφής της ροής Marangoni.

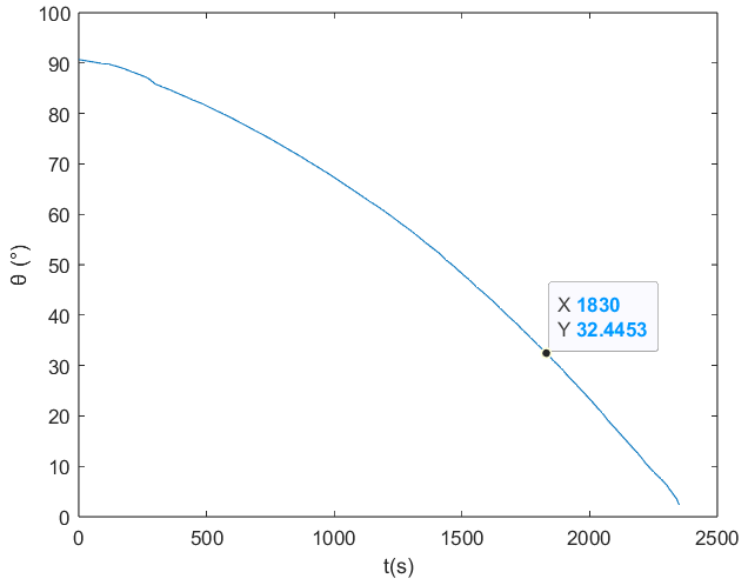


Εικόνα 15. Θερμοκρασιακή κατανομή εντός της σταγόνας μετά την αντιστροφή της ροής και βέλη που δείχνουν νέα ροή Marangoni.

Τέλος, ακολουθεί η αναπαράσταση της κατανομής της θερμοκρασίας και της ταχύτητας, εντός της σταγόνας, μετά τα κρίσιμα σημεία και αφού έχουν εξομαλυνθεί τα φαινόμενα. Γίνεται εμφανές πως, μετά την αναστροφή, η κορυφή εμφανίζεται θερμότερη και, παράλληλα, εμφανίζονται και κάποιες δευτερεύουσες ανακυκλοφορίες μέσα στην σταγόνα.



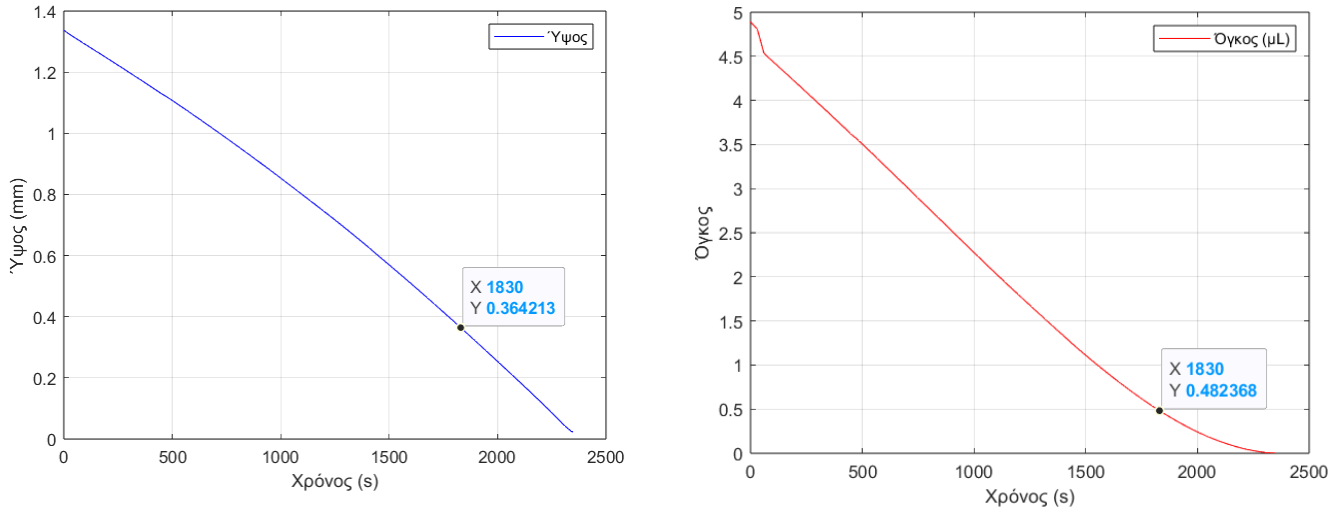
Εικόνα 16. Οπτικοποίηση κατανομής θερμοκρασίας μετά την αντιστροφή της ροής, νέα κατανομή και κατεύθυνση ταχύτητας και παρουσίαση δευτερευουσών ροών Marangoni.



Εικόνα 17. Χρονική εξάρτηση φαινόμενης γωνίας επαφής και εμφάνιση της κρίσιμης γωνίας όταν παρατηρήθηκε η αντιστροφή της ροής.

Το μοντέλο προβλέπει την κρίσιμη τιμή της φαινόμενης γωνίας επαφής την χρονική στιγμή $t = 1830s$ με γωνία ίση με 32.4°. Η προσέγγιση αυτή, αν και όχι ακριβώς ίδια με την θεωρητική τιμή των 31°, είναι ευθυγραμμισμένη με την βιβλιογραφία. Η παρατηρούμενη απόκλιση μπορεί να οφείλεται είτε σε παραδοχές των θεωρητικών μοντέλων της βιβλιογραφίας ως προς τα φαινόμενα μεταφοράς είτε σε αριθμητικό θόρυβο των μεθόδων διακριτοποίησης των διαφορικών εξισώσεων και προσαρμογής για τον υπολογισμό της γωνίας επαφής.

Παρακάτω ακολουθούν και τα αντίστοιχα διαγράμματα της χρονικής εξέλιξης του ύψους και του όγκου της σταγόνας και οι τιμές τους την χρονική στιγμή της αντιστροφής της ανακυκλοφορίας.



Εικόνα 18. Χρονική εξέλιξη ύψους (αριστερά) και όγκου (δεξιά) της σταγόνας που εξατμίζεται σε επιφάνεια από τεφλόν.

Προσομοίωση 2: λόγος $k_R = 1.9$

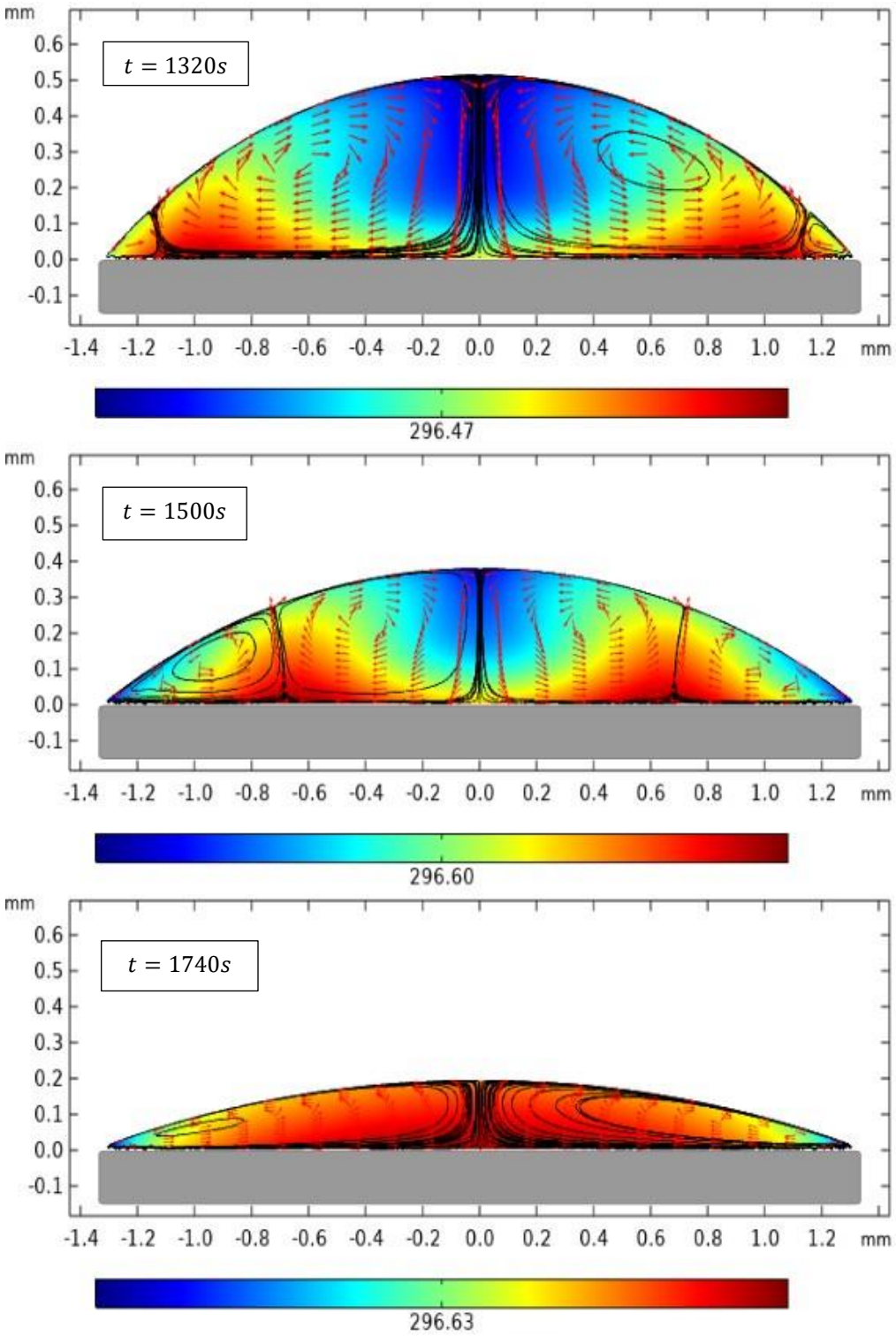
Σύμφωνα με την βιβλιογραφία, όταν ο λόγος της θερμικής αγωγιμότητας, k_R, της στερεής επιφάνειας είναι μεταξύ των τιμών $1.45 < k_R < 2$, τότε η κατεύθυνση της ροής δεν είναι σταθερή. Για συγκεκριμένες γωνίες επαφής η ροή Marangoni μπορεί να αλλάζει από την μία κατεύθυνση στην άλλη και αντίστροφα. Για αυτή την αναλογία θερμικών αγωγιμοτήτων, φαίνεται πως η στερεή επιφάνεια και η σταγόνα έχουν αρκετά κοντινούς συντελεστές, και ως εκ τούτου η ροή Marangoni γίνεται αρκετά ευαίσθητη στην γεωμετρία της σταγόνας και την γωνία επαφής της με το υπόστρωμα.

Από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, έγιναν παρατηρήσεις που συμβαδίζουν με την θεωρία. Συγκεκριμένα, για τα πρώτα 1320s εμφανίζονται εμφανείς ανακυκλοφορίες ίδιου τύπου με τις προηγούμενες περιπτώσεις. Η ψυχρότερη κορυφή και η θερμότερη περιοχή τριφασικής επαφής οδηγούν σε ανακυκλοφορία που ακολουθεί φορά αντίστροφή από αυτήν των δεικτών του ρολογιού. Μετά τα 1320s είναι, ευδιάκριτες οι δευτερεύουσες ανακυκλοφορίες που εμφανίζονται στην άκρη της σταγόνας. Με την πορεία του φαινομένου φαίνεται διαρκής αύξηση της επιφάνειας που καταλαμβάνεται από την δευτερεύουσα ανακυκλοφορία. . Η αύξηση αυτή σταματάει στα 1740s, όπου πλέον η ροή είναι πλήρως ανεστραμμένη και οι δευτερεύουσες ανακυκλοφορίες έχουν αντικατασταθεί από την καινούρια, με φορά από την κορυφή, ασυμπτωτικά στον άξονα συμμετρίας προς την TPL και ξανά στην κορυφή.

Στα παρακάτω στιγμιότυπα φαίνονται τα φαινόμενα που περιγράφονται παραπάνω. Στο πρώτο σκέλος της *Εικόνας 19* φαίνεται η αρχική φάση εμφάνισης των δευτερευουσών ανακυκλοφοριών, στην μέση φαίνεται η επέκταση των δευτερευουσών ανακυκλοφοριών από την περιοχή κοντά στην TPL προς το υπόλοιπο του σώματος της σταγόνας, ενώ στο τέλος αναπαρίσταται η πλήρης αναστροφή της ανακυκλοφορίας, που πλέον κινείται από την κορυφή προς τα άκρα της σταγόνας.

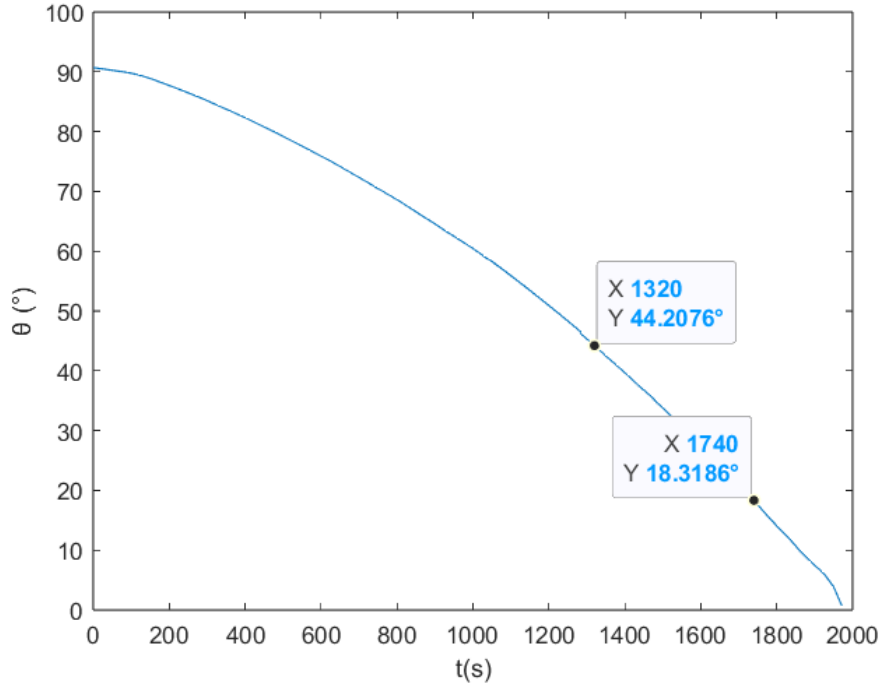
Στην *Εικόνα 20* αποτυπώνεται η χρονική εξέλιξη της γωνίας επαφής της σταγόνας για τους χαρακτηριστικούς χρόνους που αναφέρθηκαν. Συγκεκριμένα, την χρονική στιγμή εμφάνισης των ανακυκλοφοριών ($t = 1320s$) η γωνία επαφής υπολογίστηκε στις 44°, ενώ όταν η ροή είχε αντιστραφεί πλήρως ($t = 1740s$), η γωνία είχε μειωθεί περίπου στις 18°. Σύμφωνα με την μελέτη των Hua Hu et al, στην εξάτμιση σταγόνας σε υπόστρωμα από γυαλί, παρατηρείται πλήρης αναστροφή της ανακυκλοφορίας σε γωνία επαφής ίση με 14°.[19] Συνεπώς, τα αποτελέσματα της παρούσας προσομοίωσης ευθυγραμμίζεται με τα ευρήματα της βιβλιογραφίας.

Υπολογίζεται, και σε αυτή την περίπτωση, ο ρυθμός εξάτμισης της σταγόνας για έναν ενδιάμεσο χρόνο ($t = 750s$) και αυτός είναι ίσος με $11 \cdot 10^{-4} kg/m^2 s$.

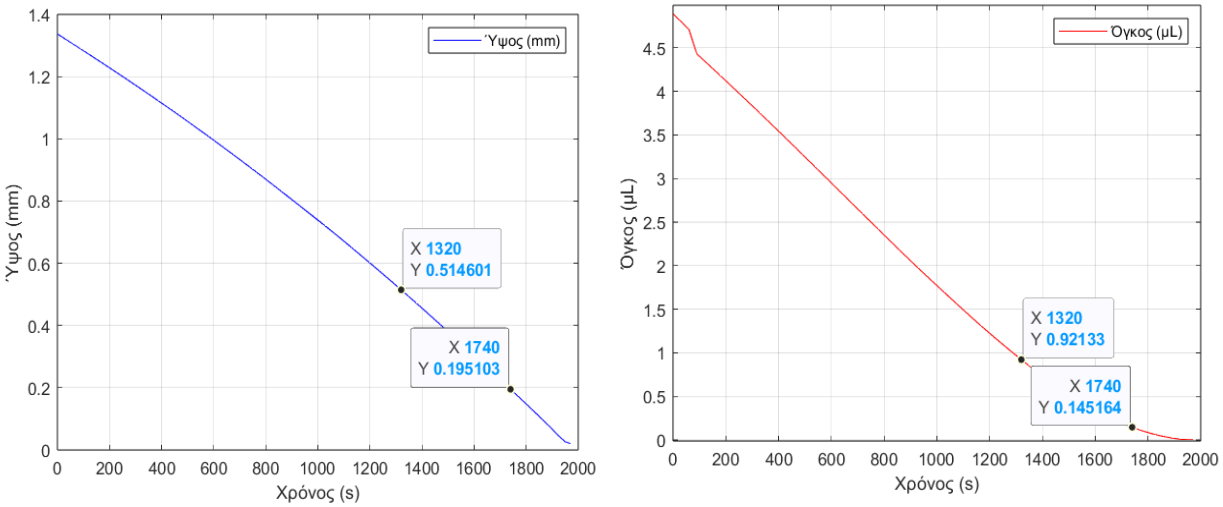


Εικόνα 19. Εξέλιξη κατανομής θερμοκρασίας και ροών ανακυκλοφορίας στην σταγόνα κατά την διάρκεια της εξάτμισης. Στα αρχικά στάδια παρατηρούνται πρωτεύουσες κυκλοφορίες με ροή από την TPL προς την κορυφή. Μετά τα 1320s, αναπτύσσονται δευτερεύουσες ανακυκλοφορίες, οι οποίες, τελικά, οδηγούν στην πλήρη αναστροφή της ροής μετά τα 1740s, με ροή πλέον από την κορυφή προς την TPL.

Σύμφωνα με την βιβλιογραφία[11], για αυτόν τον λόγο k_R η συμπεριφορά της ροής εντός της σταγόνας είναι ευαίσθητη στην αλλαγή της γωνίας επαφής της με το υπόστρωμα. Παρακάτω παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη της γωνίας επαφής της σταγόνας και έχουν επισημανθεί οι χρονικές στιγμές που παρατηρείται η έναρξη των ανακυκλοφοριών αλλά και η στιγμή που γίνεται αντιστροφή της ροής εντός της σταγόνας.



Εικόνα 20. Χρονική εξέλιξη φαινόμενης γωνίας επαφής της εξατμιζόμενης σταγόνας με το γυάλινο στερεό υπόστρωμα.

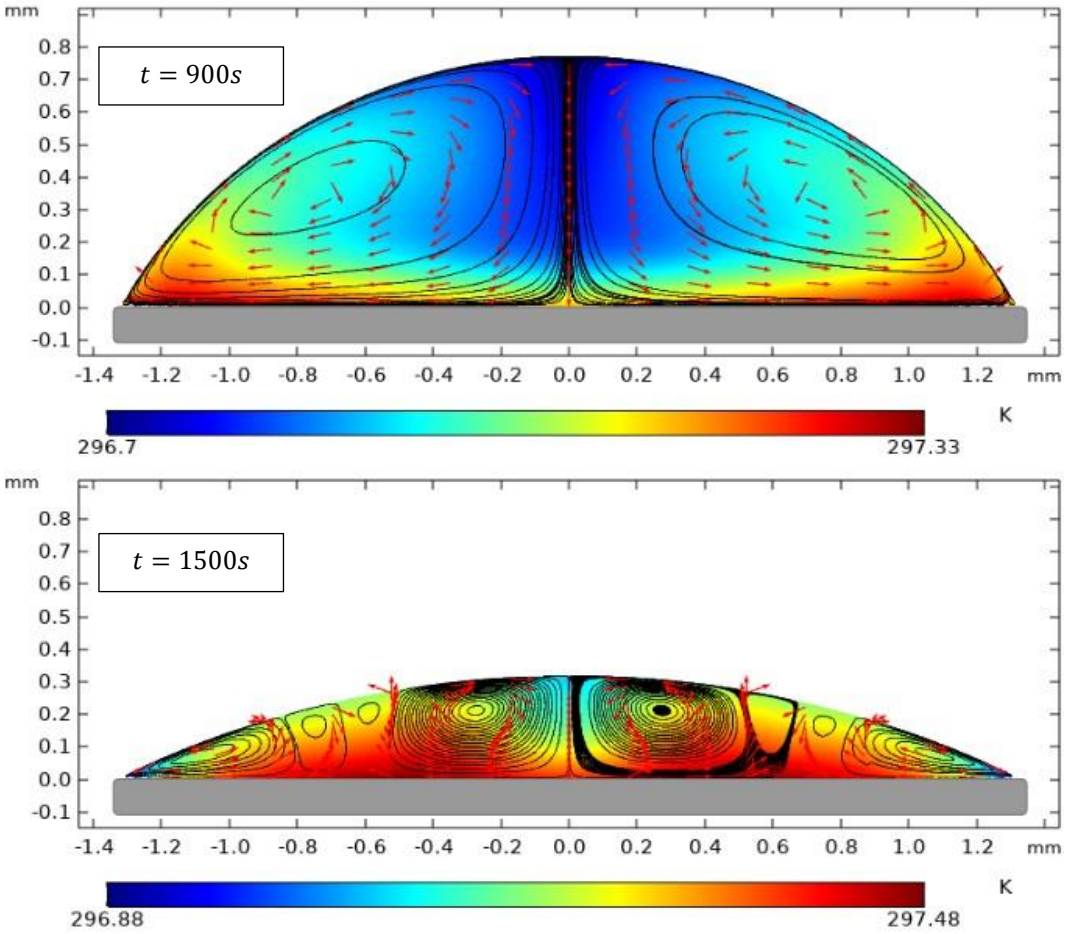


Εικόνα 21. Χρονική εξέλιξη ύψους (αριστερά) και όγκου (δεξιά) της σταγόνας που εξατμίζεται σε στερεή επιφάνεια απο γυαλί.

Προσομοίωση 3: λόγος $k_R \gg 2$

Στην περίπτωση που η θερμική αγωγιμότητα της στερεής επιφάνειας είναι τουλάχιστον διπλάσια της αγωγιμότητας του υγρού, όπως αναφέρθηκε, η ροή δεν επηρεάζεται την γωνία επαφής, αλλά από την βαθμίδα επιφανειακής τάσης και επακόλουθα από την κατανομή της θερμοκρασίας. Για την προσομοίωση έχει επιλεγεί το υλικό του υποστρώματος να είναι το τιτάνιο, το οποίο ως μέταλλο είναι εξαιρετικός αγωγός της θερμότητας και, κατά συνέπεια, εμφανίζει μεγάλο συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας. Ο λόγος των αγωγιμοτήτων του τιτανίου και της σταγόνας νερού είναι ίσος με $k_R = 12$.

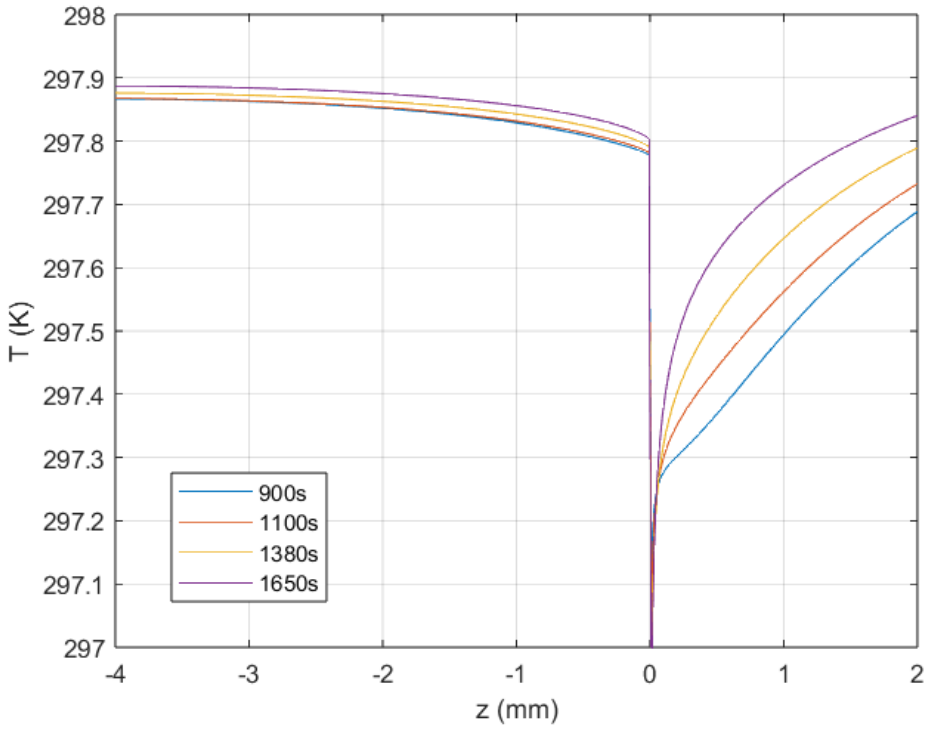
Η συμπεριφορά της σταγόνας καθ' όλη την εξάτμιση ακολουθεί την τυπική συμπεριφορά που έχει περιγραφεί παραπάνω όταν σε περίπτωση εξάτμισης πάνω σε τραχεία επιφάνεια, όπου ακολουθείται ο μηχανισμός Σταθερής Ακτίνας Επαφής με το υπόστρωμα. Οι ανακυκλοφορίες εκδηλώνονται για πρώτη φορά περίπου $1110s$ μετά την έναρξη της προσομοίωσης εξάτμισης και στα $1380s$ είναι έκδηλες, για πρώτη φορά, πολλαπλές δευτερεύουσες ανακυκλοφορίες, με την μεγαλύτερη έκταση τους να παρατηρείται στα $1500s$, όπως και φαίνεται στην *Εικόνα 22*.



Εικόνα 22. Κατανομή θερμοκρασίας, ροϊκές γραμμές και κατεύθυνση ανακυκλοφοριών για την εξάτμιση σταγόνας πάνω σε επιφάνεια από τιτάνιο. Στο πρώτο στιγμιότυπο φαίνεται η ροή μία αρχική χρονική στιγμή, ενώ στο δεύτερο αναπαρίστανται οι πολλαπλές δευτερεύουσες ανακυκλοφορίες Benard-Marangoni.

Σε όλες τις προηγούμενες περιπτώσεις, παρατηρούνταν η ανάπτυξη μίας δευτερεύουσας ανακυκλοφορίας τύπου Benard-Marangoni που εμφανίζεται σε μετέπειτα στάδια της εξάτμισης. Αυτές οι αστάθειες τύπου Benard-Marangoni ήταν ορατές σε κάθε εξάτμιση σε μία μόνο περιοχή και όσο αυξανόταν η θερμοκρασία της κορυφής αυτές καταλάμβαναν μεγαλύτερη έκταση εντός της σταγόνας, μέχρι που τελικά μετατρέπονταν στην πρωτεύουσα ανεστραμμένη ροή. Το ενδιαφέρον στην περίπτωση της μεγάλης τιμής του k_R είναι πως αυτές οι δευτερεύουσες ανακυκλοφορίες ήταν πολλαπλές και τελικά συνενώθηκαν και οδήγησαν στην ανεστραμμένη ροή. Η μελέτη των δευτερευουσών ανακυκλοφοριών είναι εκτός των ορίων της έρευνας αυτής της εργασίας, και η παρουσίαση τους, που ακολουθεί παρακάτω, γίνεται για λόγους πληρότητας.

Στην *Εικόνα 23*, που ακολουθεί παρακάτω, παρουσιάζεται η κατανομή της θερμοκρασίας στο υπόστρωμα και στον αέρα που περιβάλλει την σταγόνα, ως προς μία κάθετη τομή που διέρχεται από την γραμμή επαφής.



Εικόνα 23. Κατανομή θερμοκρασίας στο υπόστρωμα και τον αέρα κατά μήκος τομής που διέρχεται από την τριφασική γραμμή επαφής.

Παρατηρώντας την παραπάνω εικόνα μπορεί να διαπιστωθούν τα εξής:

Στην αριστερή πλευρά της εικόνας ($z < 0$) αντιστοιχεί η περιοχή μέσα στο υπόστρωμα από τιτάνιο. Η θερμοκρασία παραμένει σχεδόν σταθερή, κοντά στην θερμοκρασία του περιβάλλοντος που ορίστηκε στο μοντέλο (25°C). Η μικρή πρώτη της θερμοκρασίας, η οποία παρατηρείται πολύ

κοντά στο $z = 0$ υποδηλώνει πως το υπόστρωμα δεν ψύχεται σε βάθος, καθώς το τιτάνιο, λόγω της υψηλής του θερμικής αγωγιμότητας, διαχέει αποτελεσματικά την θερμότητα από το περιβάλλον και δείχνει πως η ψύξη που υφίσταται είναι επιφανειακή.

Στη θέση $z = 0$ παρατηρείται απότομη πτώση της θερμοκρασίας. Αυτό το σημείο αντιπροσωπεύει την περιοχή του σταγονιδίου που έρχεται σε άμεση επαφή με τον αέρα και η ψύξη είναι έντονη, εξαιτίας της εξάτμισης, όπου η θερμότητα μεταφέρεται από την σταγόνα προς τον αέρα γύρω της. Όσο το z μεγαλώνει, δηλαδή περιγράφεται η θερμοκρασιακή κατανομή στον αέρα, υπάρχει αύξηση της θερμοκρασίας. Καθώς απομακρύνεται η περιοχή παρατήρησης από το σταγονίδιο στον αέρα, η θερμότητα μεταφέρεται από το περιβάλλον στον αέρα και η θερμοκρασία σταδιακά επανέρχεται στην θερμοκρασία περιβάλλοντος.

Τέλος, όπως και στις προηγούμενες περιπτώσεις διερεύνησης του λόγου k_R, έτσι και σε αυτήν, για τον ίδιο ενδιάμεσο χρόνο ο ρυθμός εξάτμισης που υπολογίστηκε ήταν ίσος με $11.7 \cdot 10^{-4} kg/m^2 s$.

4.5 Σύγκριση αποτελεσμάτων των τριών προσομοιώσεων μεταβαλλόμενου λόγου k_R

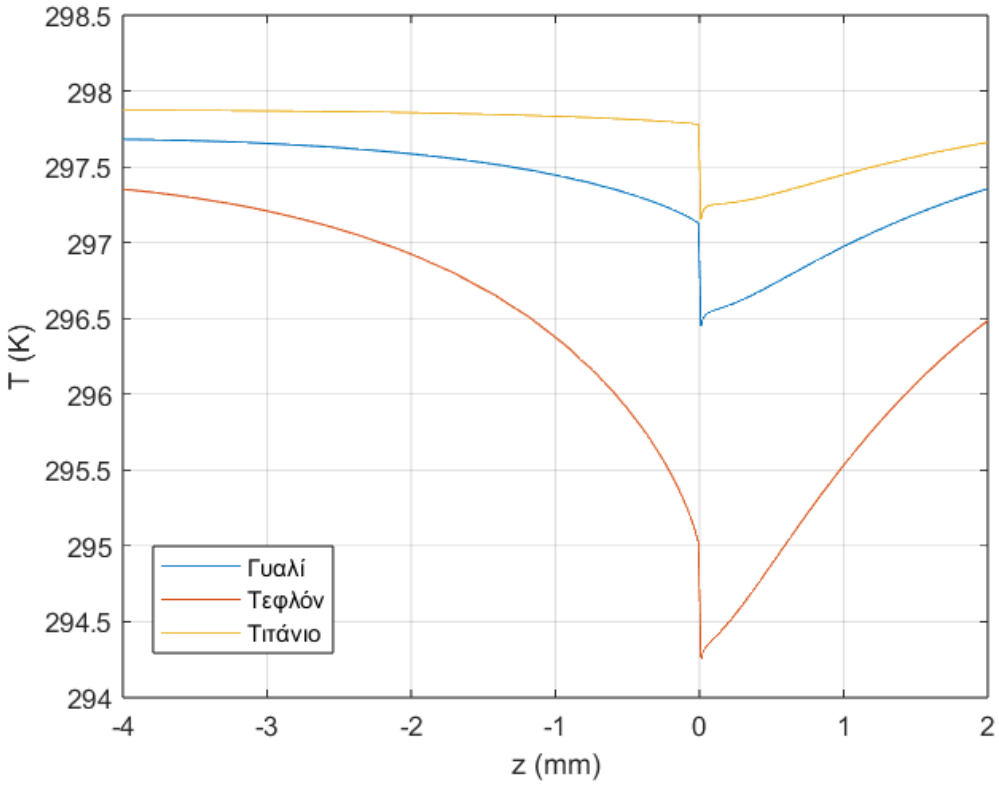
Προκειμένου να γίνει αντιληπτή η επιρροή της θερμικής αγωγιμότητας στην ψύξη που επιφέρει η εξάτμιση των σταγόνων σε τραχείες επιφάνειες, παρουσιάζονται συγκεντρωτικά οι διαφορές που παρατηρήθηκαν για έναν ενδιάμεσο χρόνο εξάτμισης $t = 750s$.

Αρχικά, συγκρίνεται ο ρυθμός εξάτμισης της σταγόνας στο κάθε διαφορετικό υλικό καθώς και ο συνολικός χρόνος εξάτμισης. Το τεφλόν, που έχει την χαμηλότερη θερμική αγωγιμότητα, και συνεπώς και τον χαμηλότερο λόγο k_R, ως μονωτής της θερμότητας, την μεταφέρει με τον βραδύτερο ρυθμό. Αυτό διαπιστώνεται και από τον συνολικό χρόνο εξάτμισης, ο οποίος είναι ο μεγαλύτερος εκ των τριών υλικών, καθώς και από τον μικρότερο ρυθμό εξάτμισης. Στην συνέχεια, ακολουθεί το γυαλί, το οποίο εμφανίζει τον ενδιάμεσο λόγο k_R, και η εξάτμιση της σταγόνας απαιτεί λιγότερο χρόνο από το τεφλόν, αλλά περισσότερο συγκριτικά με το τιτάνιο, στο οποίο, με την σειρά του, εμφανίζεται ο ταχύτερος χρόνος και ρυθμός εξάτμισης.

Πίνακας 1. Συγκεντρωτικός πίνακας συνολικού χρόνου εξάτμισης, ρυθμού εξάτμισης της σταγόνας και απαγωγής θερμότητας από το στερεό για κάθε μελετώμενο λόγο k_R.

Υλικό / k_R	**Συνολικός Χρόνος Εξάτμισης (s)**	**Ρυθμός εξάτμισης ($\times 10^{-4} kg/m^2 s$)**	**Ρυθμός Απαγωγής θερμότητας από το στερεό ($\times 10^{-4}$W)**
Τεφλόν ($k_R = 0.4$)	2350	8.6	4.7
Γυαλί ($k_R = 1.9$)	1970	11	6.1
Τιτάνιο ($k_R = 12$)	1796	11.7	6.6

Παράλληλα, στην εικόνα που ακολουθεί φαίνεται η θερμοκρασιακή κατανομή κατά μήκος μίας τομής που διέρχεται από την τριφασική γραμμή επαφής, καλύπτοντας τόσο το υπόστρωμα όσο και τον αέρα πάνω από την σταγόνα. Οι τρεις καμπύλες αντιπροσωπεύουν τα τρία διαφορετικά υλικά που χρησιμοποιήθηκαν για την παραμετροποίηση των προσομοιώσεων.



Εικόνα 24. Θερμοκρασιακή κατανομή κατά μήκος της TPL κατά την εξάτμιση σταγονιδίου σε υπόστρωμα από τεφλόν, γυαλί και τιτάνιο.

Σε όλες τις περιπτώσεις, παρατηρείται μία απότομη πτώση της θερμοκρασίας, αφού μελετάται η περιοχή που εμφανίζεται ο μεγαλύτερος ρυθμός εξάτμισης. Η εξάτμιση είναι μία διαδικασία που απορροφά θερμότητα (λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης), γεγονός που προκαλεί την ψύξη στην περιοχή της τριφασικής γραμμής επαφής.

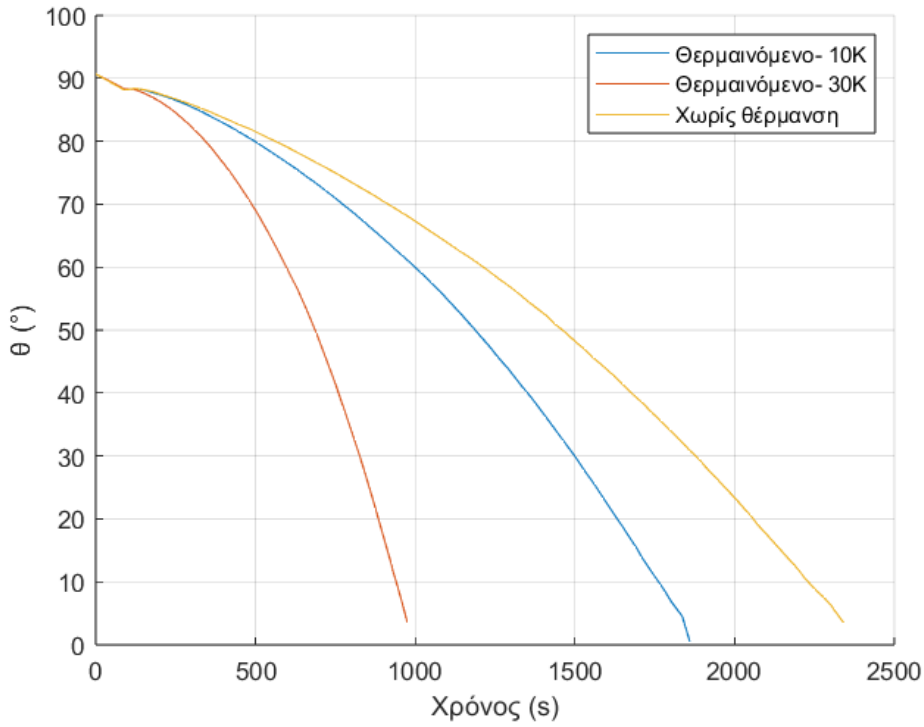
Από τα τρία υλικά, ωστόσο, το τεφλόν είναι αυτό που παρουσιάζει την μεγαλύτερη πτώση θερμοκρασίας, με την ψύξη να φτάνει κοντά στα 294.3K (περίπου 21°C). Παράλληλα, η ψύξη που προκαλεί η εξάτμιση της σταγόνας διεισδύει και σε μεγαλύτερο βάθος εντός του υλικού, σε αντίθεση με τι συμβαίνει στο γυαλί και το τιτάνιο, όπου η ψύξη είναι επιφανειακή. Η αρκετά χαμηλή θερμική αγωγιμότητα του τεφλόν εμποδίζει την διάχυση θερμότητας από το υπόστρωμα, καθώς η θερμότητα δεν μπορεί να διαφύγει εύκολα από αυτό, οδηγώντας σε έντονη τοπική ψύξη κοντά στην τριφασική γραμμή επαφής. Εν αντιθέσει, το τιτάνιο, που εμφανίζει τον μεγαλύτερο

λόγο θερμικών αγωγιμοτήτων με την σταγόνα, εξαιτίας της γρήγορης διάχυσης της θερμότητας εντός του, διατηρεί σχετικά σταθερή θερμοκρασία, έχοντας ψυχθεί επιφανειακά και με μικρή θερμοκρασιακή διαφορά από το περιβάλλον.

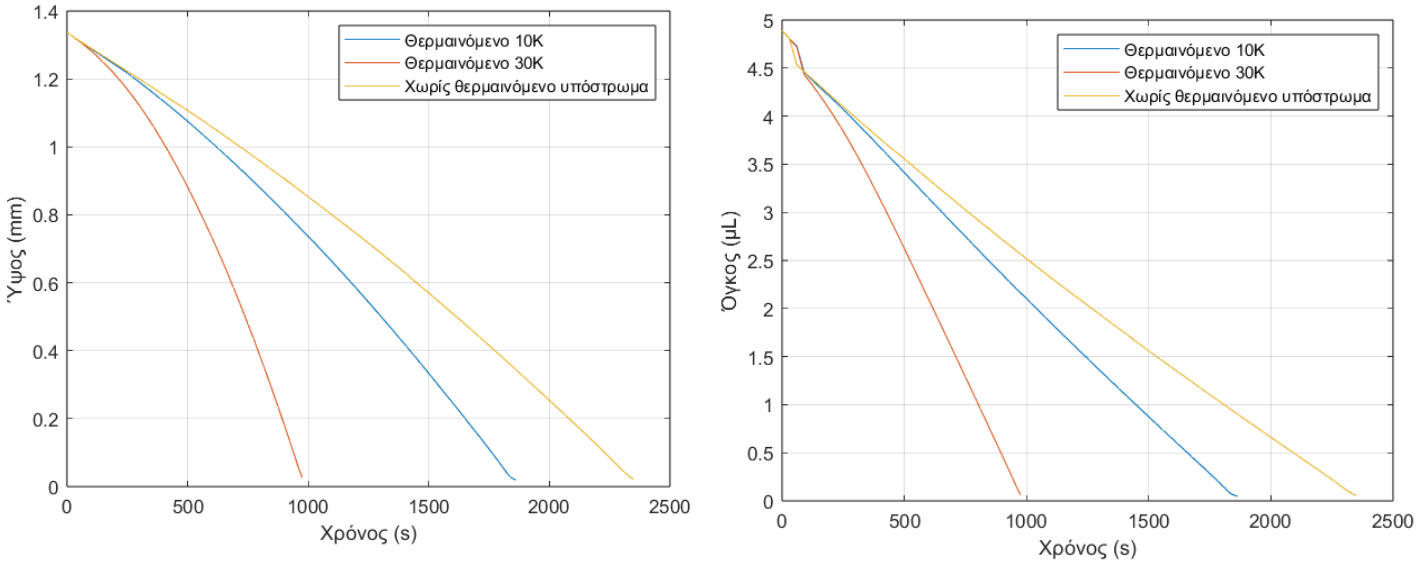
4.6 Προσομοίωση εξάτμισης σε τραχεία επιφάνεια με θερμαινόμενο υπόστρωμα

Σε αυτή την ενότητα μελετάται η εξάτμιση σταγόνων πάνω σε θερμαινόμενα τραχεία υποστρώματα. Εξετάστηκαν δύο διαφορετικές θερμοκρασίες υποστρώματος: 10°C και 30°C πάνω από την θερμοκρασία του περιβάλλοντος. Τα αποτελέσματα συγκρίνονται τόσο μεταξύ τους, όσο και με την περίπτωση που το υπόστρωμα δεν έχει θερμανθεί. Το υλικό της επιφάνειας που μελετάται είναι το τεφλόν και υπενθυμίζεται πως ο συνολικός χρόνος εξάτμισής του ήταν 2350s. Όταν η θερμοκρασία του υποστρώματος ήταν κατά 10°C μεγαλύτερη από την θερμοκρασία του περιβάλλοντος, ο συνολικός χρόνος εξάτμισης ήταν 1864.4s, ενώ όταν η θερμοκρασία αυξανόταν κατά 30°C, τότε ο συνολικός χρόνος μειωνόταν στα 975.6s, δείχνοντας ότι η αύξηση της θερμοκρασίας του υποστρώματος επιταχύνει την διαδικασία της εξάτμισης.

Παρακάτω παρατηρείται η γωνία επαφής της σταγόνας με την κάθε περίπτωση υποστρώματος και μπορεί να παρατηρηθεί η ραγδαία μείωση της γωνίας στην επιφάνεια που είχε θερμανθεί περισσότερο. Παράλληλα, ακολουθεί και η χρονική εξέλιξη του όγκου και του ύψους της.



Εικόνα 25. Χρονική εξέλιξη γωνίας επαφής της σταγόνας σε θερμαινόμενο υπόστρωμα κατά 10 και 30°C και σε υπόστρωμα χωρίς θέρμανση.



Εικόνα 26. Χρονική εξέλιξη ύψους και όγκου σταγόνας στα δύο θερμαινόμενα υποστρώματα σε σύγκριση με το μη θερμαινόμενο.

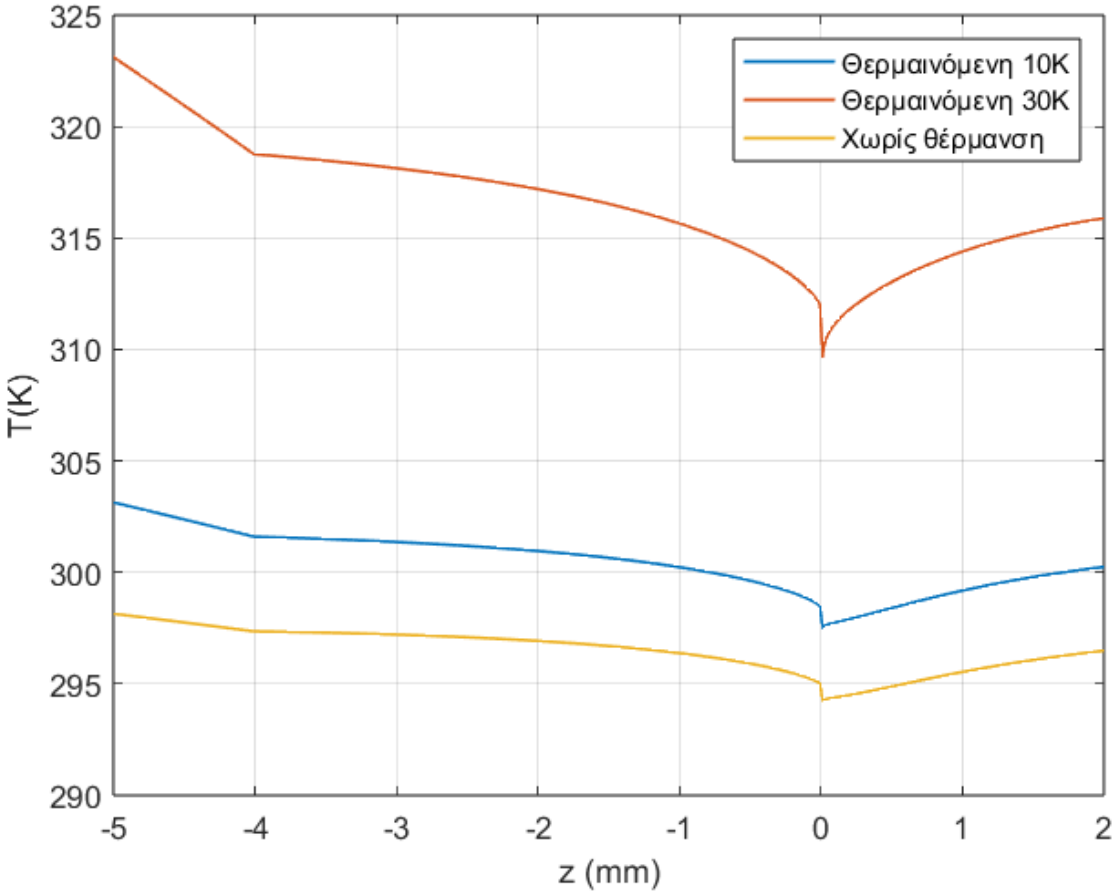
Στην *Εικόνα 26* παρατηρείται η μείωση του ύψους και του όγκου της σταγόνας σε σχέση με τον χρόνο. Η σταγόνα πάνω στο υπόστρωμα που θερμαίνεται κατά 30°C παρουσιάζει την ταχύτερη πτώση, ακολουθούμενη από την σταγόνα στο υπόστρωμα που θερμαίνεται κατά 10°C. Παράλληλα, παρατηρείται και η μεγάλη διαφορά στους χρόνους αλλά και στην εξέλιξη των φαινομένων σε ένα υπόστρωμα που έχει την θερμοκρασία περιβάλλοντος, χωρίς περαιτέρω θέρμανση.

Παράλληλα, υπολογίζεται και ο ρυθμός της εξάτμισης της σταγόνας σε κάθε εξεταζόμενη περίπτωση. Συγκεκριμένα, στο υπόστρωμα που είχε θερμανθεί κατά 10° ο ρυθμός εξάτμισης της σταγόνας σε έναν ενδιάμεσο χρόνο $t = 750s$ είναι ίσος με $12.7 \cdot 10^{-4}\ kg/m^2s$ και ο ρυθμός απαγωγής θερμότητας ίσος με $6.1 \cdot 10^{-3}\ W$. Υπενθυμίζεται πως στον ίδιο χρόνο, στην μη θερμαινόμενη επιφάνεια, ο ρυθμός ήταν $8.6 \cdot 10^{-4}\ kg/m^2s$ και $4.7 \cdot 10^{-3}\ W$ αντίστοιχα. Στην περίπτωση της επιφάνειας που θερμαίνεται κατά 30°C, την ίδια χρονική στιγμή, η ρυθμός είναι $51 \cdot 10^{-4}\ kg/m^2s$. Για πληρότητα, επειδή η χρονική στιγμή $t = 750s$ είναι πολύ κοντινή στο τέλος της εξάτμισης της σταγόνας, υπολογίστηκε και ο ρυθμός για μία χρονική στιγμή κοντά στην μέση του φαινομένου. Σε εκείνη την στιγμή ($t = 450s$) ο ρυθμός απώλειας μάζας υπολογίστηκε στα $26 \cdot 10^{-4}\ kg/m^2s$ και απαγωγής θερμότητας στα $11.7 \cdot 10^{-3}\ W$.

Στην εικόνα που ακολουθεί θα παρατηρηθεί και η επίδραση της θερμοκρασίας του υποστρώματος στο βάθος ψύξης του υποστρώματος και στην θερμοκρασία του περιβάλλοντος αέρα κοντά στην τριφασική γραμμή επαφής.

Αξίζει επίσης να σημειωθεί πως εξαιτίας της φύσης του υλικού (τεφλόν) φαίνεται πως η επίδραση των 10 παραπάνω βαθμών δεν επιφέρει κάποια ραγδαία διαφορά, συγκριτικά με την μη θερμαινόμενη επιφάνεια. Παρόλο που παρατηρείται επιτάχυνση της εξάτμισης, επειδή το τεφλόν

έχει πολύ χαμηλή θερμική αγωγιμότητα, η θερμοκρασιακή επιβολή στο κάτω μέρος της επιφάνειας του δεν είναι αρκετή ώστε να διαχυθεί η θερμότητα προς της σταγόνα, εξαιτίας της μονωτικής ικανότητας του τεφλόν. Ως εκ τούτου, οι παρατηρήσεις δεν αποκλίνουν κατά πολύ από αυτές που έγιναν στην μη θερμαινόμενη επιφάνεια.



Εικόνα 27. Κατανομή θερμοκρασίας κατά μήκος μίας κάθετης τομής που διέρχεται από την γραμμή επαφής.

Στην παραπάνω εικόνα παρουσιάζεται η κατανομή της θερμοκρασίας σε μία κάθετη τομή που διέρχεται από την τριφασική γραμμή επαφής και εκτείνεται τόσο εντός του υποστρώματος όσο και στην υπερκείμενη περιοχή που καταλαμβάνει ο αέρας. Συγκεκριμένα, η τομή καλύπτει 1mm κάτω από την επιφάνεια του υποστρώματος, όπου επιβάλλεται η θέρμανση, και 2mm πάνω από την γραμμή επαφής, στην περιοχή του αέρα. Η ζώνη των 1 mm κάτω από το υπόστρωμα αντιστοιχεί στην περιοχή εφαρμογής της πηγής θερμότητας, γεγονός που προσομοιώνεται αριθμητικά και αντιστοιχεί και στις συνθήκες μίας πραγματικής πειραματικής διαδικασίας. Στο εν λόγω πείραμα[6], το υπόστρωμα αποτελείται από ένα υλικό τρισδιάστατης εκτύπωσης, με μικρές βάσεις στο κάτω μέρος της επιφάνειας του για τη στήριξή του. Η προσομοίωση αυτή στοχεύει στην επαλήθευση των θεωρητικών ευρημάτων.

Κεφάλαιο 5: Συμπεράσματα και Μελλοντική Έρευνα

Η εργασία μελέτησε την σύνθετη διαδικασία της εξάτμισης μικροσταγόνων και της ψύξης που προκαλείται ως αποτέλεσμα της εξάτμισης. Εξετάστηκαν τα φαινόμενα μεταφοράς μάζας και θερμότητας, η επιρροή των φυσικοχημικών και γεωμετρικών ιδιοτήτων της στερεής επιφάνειας και συγκρίθηκαν οι μηχανισμοί εξάτμισης που παρατηρούνταν ανά περίπτωση. Μέσω της χρήσης του COMSOL Multiphysics®, έγινε η μοντελοποίηση του προβλήματος, εισήχθησαν παραδοχές και γεωμετρικές δομές που η αναπαράσταση τους σε κάποιο πείραμα δεν είναι εφικτή, όπως η εισαγωγή της λείας επιφάνειας, οπτικοποιήθηκαν τα φαινόμενα ανακυκλοφορίας, παρατηρήθηκε η ταχύτητα εντός του ρευστού και ελήφθησαν θερμοκρασιακά δεδομένα τόσο για την σταγόνα, όσο και για την στερεή επιφάνεια, καθώς ήταν δυνατή η παράσταση της θερμοκρασιακής κατανομής κατά μήκος του στερεού και να βρεθεί το βάθος ψύξης του.

Αρχικά, διαπιστώνεται η αποτελεσματικότητα του μοντέλου στην πρόβλεψη της ρεαλιστικής συμπεριφοράς της τριφασικής γραμμής επαφής σε τραχείες επιφάνειες, μέσω της ενσωμάτωσης των αλληλεπιδράσεων του στερεού με το υγρό, ως έναν όρο πίεσης. Η πίεση αυτή, όπως αναφέρθηκε, είναι η πίεση αποκόλλησης και με την εισαγωγή της στην συνοριακή συνθήκη της διεπιφάνειας στερεού-υγρού, δίνει λύση στον μη ικανοποιητικό περιορισμό της κίνησης της τριφασικής γραμμής επαφής κατά την χρήση άλλων συνοριακών συνθηκών.

Από τις αρχικές διαπιστώσεις που έγιναν ήταν η επιρροή των χαρακτηριστικών της επιφάνειας στην συμπεριφορά της εξάτμισης. Συγκεκριμένα, η τραχύτητα της επιφάνειας επηρεάζει σημαντικά την εξάτμιση, καθώς καθορίζει τον μηχανισμό της. Οι λείες επιφάνειες, στις οποίες παρατηρείται εξάτμιση με τον Μηχανισμό Σταθερής Γωνίας Επαφής, οδηγούν σε βραδύτερη εξάτμιση, ενώ οι τραχείες επιφάνειες, στις οποίες παρατηρείται ο Μηχανισμός Σταθερής Ακτίνας επαφής, επιτρέπουν ταχύτερους ρυθμούς εξάτμισης, λόγω της προσκόλλησης της τριφασικής γραμμής επαφής.

Παράλληλα, η θερμοκρασιακή βαθμίδα που αναπτύσσεται μέσα στην σταγόνα, λόγω της εξάτμισης, ωθεί στην δημιουργία επιφανειακών τάσεων που οδηγούν στην εμφάνιση ανακυκλοφοριών (ροή Marangoni). Αυτές οι ανακυκλοφορίες εξαρτώνται άμεσα από τον λόγο θερμικής αγωγιμότητας της στερεής επιφάνειας προς του νερού και μπορούν να αντιστραφούν όταν αυτός ο λόγος φτάσει σε κρίσιμη τιμή.

Η θερμική αγωγιμότητα του υλικού του υποστρώματος έχει καθοριστική επίδραση στη θερμοκρασιακή κατανομή γύρω από το σταγονίδιο. Υλικά με υψηλή θερμική αγωγιμότητα, όπως το Τιτάνιο, επιτρέπουν την ταχεία διάχυση της θερμότητας και αποτρέπουν την έντονη ψύξη, ενώ υλικά με χαμηλή αγωγιμότητα, όπως το Τεφλόν, οδηγούν σε σημαντική τοπική ψύξη λόγω της μειωμένης ικανότητας της επιφάνειας να διαχέουν την θερμότητα. Η παρατήρηση της επιφανειακής ψύξης παρατηρήθηκε και στην περίπτωση του θερμαινόμενου υποστρώματος. Από

την άλλη, στο τιτάνιο παρατηρήθηκε ο εντονότερος ρυθμός εξάτμισης, σε αντίθεση με το τεφλόν και το γυαλί.

Σε συνέχεια αυτής της μελέτης, στο μέλλον προτείνεται η διερεύνηση της επίδρασης διαφορετικών υγρών και υποστρωμάτων. Η εξέταση της συμπεριφοράς διαφορετικών υλικών με διαφορετικές φυσικοχημικές ιδιότητες, καθώς και η επίδραση διαφορετικών θερμικών αγωγιμοτήτων, θα μπορούσε να επεκταθεί σε εφαρμογές εξάτμισης όπου χρησιμοποιούνται διαφορετικά υλικά. Τέλος, στο μέλλον θα μπορούσε να πραγματοποιηθεί η μελέτη μίας πιο σύνθετης γεωμετρικής δομής στην μοντελοποίηση. Για παράδειγμα η εναπόθεση πολλών σταγόνων σε επιλεγμένες αποστάσεις η μία από την άλλη και η εξέταση του βάθους ψύξης αλλά και του ρυθμού εξάτμισής τους θα μπορούσε να προσφέρει πολύ σημαντικές γνώσεις για την ψυκτική ικανότητα των σταγόνων.

Βιβλιογραφία

1. Bazargan, V. (2014). Effect of substrate cooling and droplet shape and composition on the droplet evaporation and the deposition of particles.
2. Schofield, F. G. (2021). Mathematical modelling of droplet evaporation.
3. Chen, F., Cai, J., Chamakos, N.T., Papathanasiou, A.G., Gong, Z., & Li, Q. (2023). Simulation of asymmetric evaporation of inclined droplets considering natural convection. Chemical Engineering Science.
4. F. Chen, J. Cai, N. T. Chamakos, A. G. Papathanasiou, Z. Gong and Q. Li (2024), "Evaporation of nonspherical droplets on chemically patterned substrate considering gravity: A computational study", Applied Thermal Engineering
5. Sliz, R., Czajkowski, J., & Fabritius, T. (2020). Taming the Coffee Ring Effect: Enhanced Thermal Control as a Method for Thin-Film Nanopatterning. Langmuir : the ACS journal of surfaces and colloids, 36(32), 9562–9570.https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.0c01560
6. A. G. Sourais, I. E. Markodimitrakis, N. T. Chamakos and A. G. Papathanasiou, "Droplet evaporation dynamics on heterogeneous surfaces: Numerical modeling of the stick-slip motion", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **207**, 123992 (2023)
7. Nikolaos T. Chamakos, Michail E. Kavousanakis, Andreas G. Boudouvis, Athanasios G. Papathanasiou; Droplet spreading on rough surfaces: Tackling the contact line boundary condition. *Physics of Fluids* 1 February 2016; 28 (2): 022105.
8. Chamakos, N. T. (2017). *Design of micro- and nano-structured surfaces with tunable wettability* (Doctoral thesis, National Technical University of Athens, School of Chemical Engineering).
9. IGL Coatings Blog. "How Liquid Works with Hydrophobic & Hydrophilic Surfaces." Accessed July 26, 2024. https://blog.iglcoatings.com/how-liquid-works-with-hydrophobic-hydrophilic-surfaces/.
10. Mesh element quality and size. COMSOL Documentation. Retrieved August 2, 2024, from https://doc.comsol.com/5.5/doc/com.comsol.help.comsol/comsol_ref_mesh.15.18.html
11. Ristenpart, W. D., Kim, P. G., Domingues, C., Wan, J., & Stone, H. A. (2007). Influence of substrate conductivity on circulation reversal in evaporating drops. Physical Review Letters, 99(23). https://doi.org/10.1103/physrevlett.99.234502
12. Yang, K., Hong, F., & Cheng, P. (2014). A fully coupled numerical simulation of sessile droplet evaporation using Arbitrary Lagrangian–Eulerian formulation. International Journal of Heat and Mass Transfer, 70, 409–420. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2013.11.017
13. Cai, Jiejin & Chen, Facheng & Chamakos, Nikolaos & Papathanasiou, Athanasios & Ta, Bin & Li, Qiong. (2023). Asymmetric droplet evaporation on inclined surfaces. Progress in Nuclear Energy.

14. Michigan Tech Surface Interface Group. (2019, March 17). *Correcting contact angles*. http://www.surfi.mtu.edu/2019/03/17/correcting-contact-angles/
15. Schönfeld, F. (2008). Droplet Evaporation. In: Li, D. (eds) Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics. Springer, Boston, MA. https://doi.org/10.1007/978-0-387-48998-8_364
16. Putnam, S. A., Briones, A. M., Byrd, L. W., Ervin, J. S., Hanchak, M. S., White, A., & Jones, J. G. (2012). Microdroplet evaporation on superheated surfaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(21-22), 5793-5807. http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.05.076
17. Putnam, S. A., Briones, A. M., Ervin, J. S., Hanchak, M. S., Byrd, L. W., & Jones, J. G. (2012). Interfacial heat transfer during microdroplet evaporation on a laser heated surface. *International Journal of Heat and Mass Transfer, 55*(25-26), 6307–6320. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.05.067
18. Peters, A.M., Pirat, C., Sbragaglia, M. *et al.* Cassie-Baxter to Wenzel state wetting transition: Scaling of the front velocity. *Eur. Phys. J. E* **29**, 391–397 (2009). https://doi.org/10.1140/epje/i2009-10489-3
19. Hu H, Larson RG. Analysis of the effects of Marangoni stresses on the microflow in an evaporating sessile droplet. Langmuir. 2005 Apr 26;21(9):3972-80. https://doi.org/10.1021/la0475270.
20. Gui Lu, Yuan-Yuan Duan, Xiao-Dong Wang, Duu-Jong Lee, Internal flow in evaporating droplet on heated solid surface, International Journal of Heat and Mass Transfer, Volume 54, Issues 19–20, 2011, Pages 4437-4447, ISSN 0017-9310, https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.04.039.