

Μικροσταγόνες σε αυλακωτές επιφάνειες: ισορροπία και ευστάθεια καταστάσεων διαβροχής

Γ. Πάσχος¹, Γ. Κόκκορης^{1,2}, Α.Γ. Μπουντουβής¹

¹Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ

²Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος

gprashos@chemeng.ntua.gr, g.kokkoris@inn.demokritos.gr, boudouvi@chemeng.ntua.gr

Θεματική περιοχή: Φαινόμενα Μεταφοράς

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

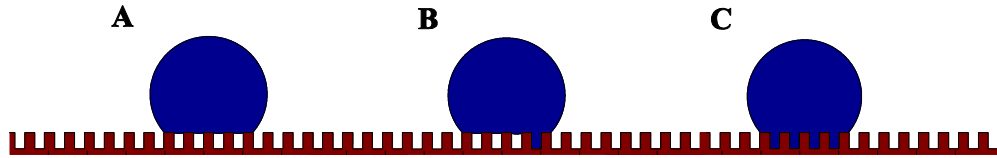
Σταγόνες που διαβρέχουν υπερυδρόφοβες επιφάνειες με σχεδιασμένη μορφολογία τείνουν να επικάθονται στις προεξοχές της μορφολογίας [Σχ. 1Α, κατάσταση διαβροχής Cassie-Baxter (CB)], ελαχιστοποιώντας έτσι την διεπιφάνεια τους με το στερεό. Η μικρή διεπιφάνεια επιτρέπει στις επικαθήμενες σταγόνες να ολισθαίνουν εύκολα, που είναι ιδιαίτερα επιθυμητό σε διάφορες τεχνολογικές εφαρμογές (αυτοκαθαριζόμενες επιφάνειες, μικρο-βαλβίδες, κτλ.). Όμως η κατάσταση διαβροχής CB συχνά καταρρέει με την επιβολή διαταραχών, καθώς το σύστημα μεταπίπτει σε καταστάσεις όπου η σταγόνα διαβρέχει πλήρως τη μορφολογία [Σχ. 1C, κατάσταση διαβροχής Wenzel (W)], είτε μικρότερο τμήμα της (Σχ. 1B). Οι καταστάσεις όπου η σταγόνα διαβρέχει εσοχές της μορφολογίας είναι ανεπιθύμητες, αφού η σταγόνα είναι πρακτικά πακτωμένη (droplet pinning) λόγω της τοπικής προσκόλλησης στις εσοχές.

Για τη μελέτη των καταστάσεων διαβροχής επιφανειών με σχεδιασμένη μορφολογία (π.χ. μικρο-αυλάκια ή μικρο-κολώνες) προτείνεται υπολογιστική μέθοδος που βασίζεται σε μία τροποποιημένη μέθοδο phase-field (Pashos et al., 2014) για την αναπαράσταση συνόρων τριφασικών συστημάτων (αέρας-υγρό-στερεό). Η τελευταία συνδυάζεται με τη μέθοδο χορδής (string method) για την εύρεση των μονοπατιών ελάχιστης ενέργειας (Minimum Energy Paths – MEPs) (Weinan et al., 2007). Το MEP αναπαριστά την οιονεί στατική μετάπτωση του συστήματος από μια αρχική κατάσταση ευσταθούς ισορροπίας (π.χ. σταγόνα επικαθήμενη σε προεξοχές) σε μια τελική κατάσταση ευσταθούς ισορροπίας (π.χ. πλήρης διαβροχή). Το MEP στο N -διάστατο χώρο της ενέργειας του συστήματος – όπου N οι βαθμοί ελευθερίας του συστήματος (DOFs) – συμπίπτει με την κοιλάδα που συνδέει τις καταστάσεις ευσταθούς ισορροπίας, οι οποίες αντιστοιχούν σε τοπικά ελάχιστα (Σχ. 2). Η ενέργεια που απαιτείται για τη μετάβαση $A \rightarrow B$, ονομάζεται ενεργειακό φράγμα και υπολογίζεται ως η διαφορά των ενεργειών: $E_S - E_A$, όπου S το ενεργειακό σάγμα – τα σάγματα αντιστοιχούν σε ασταθείς καταστάσεις ισορροπίας. Υψηλές τιμές του ενεργειακού φράγματος υποδηλώνουν υψηλή αντίσταση σε διαταραχές που οδηγούν σε μετάπτωση καταστάσεων ισορροπίας. Οι εύρωστες υπερυδρόφοβες επιφάνειες χαρακτηρίζονται από υψηλά ενεργειακά φράγματα για τη μετάβαση από την κατάσταση CB στην W και ο στόχος της εργασίας είναι ο υπολογισμός αυτού του ενεργειακού φράγματος για σταγόνα επί σχεδιασμένης μορφολογίας (π.χ. αυλάκι).

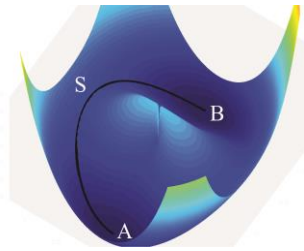
Στο Σχ. 3 φαίνεται το MEP της μετάβασης σταγόνας σε συστοιχία αυλακιών ορθογωνικής διατομής από την κατάσταση CB στη W: Η σταγόνα ξεκινά από την κατάσταση CB (κατάσταση 1) και εισχωρεί σταδιακά στις υποκείμενα αυλάκια. Οι καταστάσεις 2-4-6-8 είναι ενδιάμεσες ευσταθείς καταστάσεις μερικής διαβροχής που περιέρχεται το σύστημα κατά την οιονεί στατική μετάβαση από την 1 στην 9. Τα ενδιάμεσα ενεργειακά φράγματα ορίζονται κατά σειρά εμφάνισης ως: $E_2 - E_1$, $E_4 - E_3$, $E_6 - E_5$, $E_8 - E_7$ και η συνολικά απαιτούμενη ελάχιστη ενέργεια της μετάβασης $1 \rightarrow 9$ μπορεί να προσεγγιστεί ως το άθροισμα των ενεργειακών φραγμάτων – υποθέτοντας ότι κατά την κάθοδο από τα σάγματα (2-4-6-8), στο σύστημα δεν επιδρούν δυνάμεις αδράνειας (π.χ. παχύρευστη σταγόνα).

Η αριθμητική επίλυση είναι ταχεία αφού η εξίσωση phase-field επιλύεται με ένα ημιπεπλεγμένο αριθμητικό σχήμα (Vollmayr-Lee et al., 2003), μετασχηματισμένο στο χώρο των συχνοτήτων – με χρήση FFT (Fast Fourier Transform) σε κάρτες γραφικών. Ενδεικτικά αναφέρεται ότι η εκτέλεση 1000 χρονικών βηματισμών σε κάρτα γραφικών Tesla M2050, ενός συστήματος 1,048,576 DOFs, διαρκεί

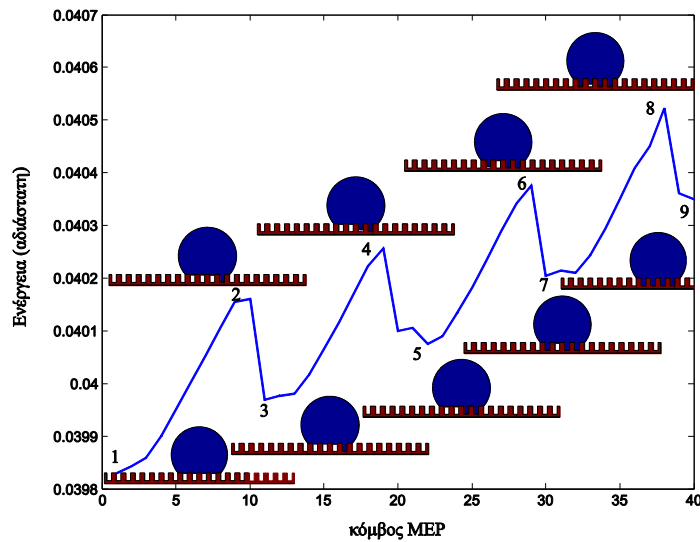
μόλις ~ 3 s. Το MEP διακριτοποιείται ως μια κατά τμήματα γραμμική καμπύλη στο N -διάστατο χώρο με M ισαπέχοντες κόμβους, N βαθμών ελευθερίας έκαστος. Χρησιμοποιήθηκαν 40 κόμβοι για την αναπαράσταση του MEP, δίνοντας στο σύνολο 41,943,040 ($40 \times 1,048,576$) DOFs.



Σχ. 1. Διάφορες καταστάσεις ισορροπίας σταγόνας πάνω σε επιφάνεια με μορφολογία. Α) επικαθήμενη σταγόνα (κατάσταση Cassie-Baxter), Β) εισχώρηση σε ένα αυλάκι και C) πλήρης διαβροχή (κατάσταση Wenzel).



Σχ. 2. Διάγραμμα απεικόνισης της ενέργειας συστήματος 2 βαθμών ελευθερίας. Το MEP παρουσιάζεται με μαύρη γραμμή και συνδέει τις καταστάσεις ισορροπίας A και B μέσω του σάγματος S.



Σχ. 3. Ενέργεια του MEP για σταγόνα πάνω σε επιφάνεια με αυλάκια. Οι καταστάσεις ισορροπίας 1-3-5-7-9 και 2-4-6-8 είναι ευσταθείς (ενεργειακά ελάχιστα) και ασταθείς (ενεργειακά σάγματα), αντίστοιχα.

Pashos G., Kokkoris G. and Boudouvis A.G. (2015), A modified phase-field method for the investigation of wetting transitions of droplets on patterned surfaces, *J. Comp. Phys.* 283, 258-270.

Vollmayr-Lee B.P. and Rutenberg A.D. (2003), Fast and accurate coarsening simulation with an unconditionally stable time step, *Physical Review E* 68, 0066703.

Weinan E., Weiqing R. and Vanden-Eijnden E. (2007), Simplified and improved string method for computing the minimum energy paths in barrier-crossing events, *J. Chem. Phys.* 126, 164103.