

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΙΙ

**“ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ (ΗΛΕΚΤΡΟ-) ΔΙΑΒΡΟΧΗΣ ΣΕ ΜΙΚΡΟ-/ΝΑΝΟ-ΔΟΜΗΜΕΝΕΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ”**

**Χαμάκος Νικόλαος**

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗΣ ΔΙΑΤΡΙΒΗΣ

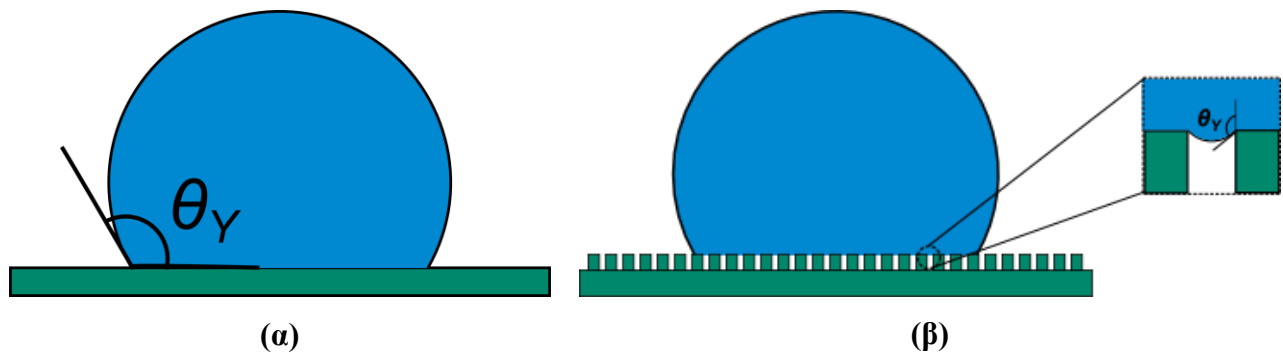
ΤΙΤΛΟΣ: “Σχεδιασμός μικρο- και νανοδομημένων επιφανειών με ελεγχόμενη διαβρεκτικότητα”  
Συμβουλευτική Επιτροπή: Α. Γ. Παπαθανασίου, Επικ. Καθηγητής Σχολής ΧΜ ΕΜΠ (επιβλέπων)  
Α. Γ. Μπουντουβής, Καθηγητής Σχολής ΧΜ ΕΜΠ  
Δρ Ε. Γογγολίδης, Δ/ντής Ερευνών ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”  
Ημερομηνία Εναρξης: 23 Μαΐου 2012

ΕΚΤΕΤΑΜΕΝΗ ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Το αντικείμενο της διδακτορικής διατριβής του κ. Χαμάκου είναι η μελέτη των φαινομένων διαβροχής σε μικρο- και νανοδομημένες επιφάνειες. Η αύξηση της τραχύτητας μιας επιφάνειας έχει ως αποτέλεσμα την ενίσχυση των διαβρεκτικών της ιδιοτήτων (π.χ. μια επιφάνεια υδρόφοβου υλικού μετατρέπεται σε υπερ-υδρόφοβη ενώ μια επιφάνεια υδρόφιλου υλικού σε υπερ-υδρόφιλη, αντίστοιχα). Για το δυναμικό έλεγχο της διαβρεκτικότητας απαιτείται και η επιβολή εξωτερικής δράσης (π.χ. εφαρμογή ηλεκτρικού (φαινόμενο ηλεκτροδιαβροχής) ή μαγνητικού πεδίου, θέρμανση της επιφάνειας κ.α.). Στη παρούσα διδακτορική διατριβή μελετάται η συνεισφορά τόσο της επιφανειακής τραχύτητας (π.χ. ύψος, πλάτος, απόσταση, σχήμα μικρο-δομών της επιφάνειας κ.α.) όσο και της εξωτερικής δράσης, στη μεταβολή των διαβρεκτικών ιδιοτήτων. Απώτερος σκοπός είναι ο κατάλληλος σχεδιασμός των δομών της τραχύτητας για την επίτευξη μεγάλης μεταβολής στη διαβρεκτικότητα με το ελάχιστο δυνατό ενεργειακό κόστος. Μία τέτοια διερεύνηση είναι πολύ σημαντική για πλήθος τεχνολογικών εφαρμογών όπως συσκευές διακίνησης υγρών χωρίς μηχανικά κινούμενα μέρη, εύκαμπτες οθόνες κ.α. Η ανάπτυξη υπολογιστικών μοντέλων για την πρόβλεψη του σχήματος σταγόνων σε επιφάνειες με τραχύτητα είναι το αντικείμενο της παρούσας φάσης της διδακτορικής διατριβής. Ακολουθεί σύντομη παρουσίαση των προτεινόμενων υπολογιστικών τεχνικών.

Το σχήμα της διεπιφάνειας υγρού/αέρα σε κατάσταση ισορροπίας διέπεται από την ισορροπία τριχοειδών και βαρυτικών δυνάμεων που εκφράζεται με την μη-γραμμική διαφορική εξίσωση Young-Laplace. Οι διαβρεκτικές ιδιότητες του στερεού εισάγονται στην εξίσωση Young-Laplace με τη μορφή μιας συνοριακής συνθήκης που καθορίζει τη γωνία επαφής της

επιφάνεια της σταγόνας με το στερεό (γωνία Young ή  $\theta_Y$ ) (βλ. σχήμα 1α). Η μεθοδολογία αυτή είναι επαρκής για περιπτώσεις ισορροπίας σταγόνων σε λείες επίπεδες επιφάνειες, υστερεί όμως στην περίπτωση επιφανειών με τραχύτητα (βλ. Σχήμα 1β) όπου απαιτείται η επιβολή της εν λόγω συνοριακής συνθήκης σε πολλά και άγνωστα σε πλήθος και θέση σημεία τριπλής επαφής υγρού /στερεού/ αέρα. Είναι εμφανές ότι η προσομοίωση των φαινομένων διαβροχής σε τραχιές επιφάνειες απαιτεί ειδική αντιμετώπιση. Η μέθοδος που προτείνουμε για την εύρεση τέτοιων καταστάσεων είναι η χρήση μιας τροποποιημένης εξίσωσης Young-Laplace που ενσωματώνει αλληλεπιδράσεις μικρο-κλίμακας (δυνάμεις van der Waals) μεταξύ υγρού και στερεού και καθιστά μη αναγκαία την εφαρμογή της συνοριακής συνθήκης της γωνίας επαφής<sup>1</sup>. Η διαβρεκτικότητα του στερεού εισάγεται στην τροποποιημένη εξίσωση Young-Laplace μέσω ενός όρου πίεσης αποκόλλησης (disjoining pressure).



Σχήμα 1 – Ισορροπία σταγόνας (α) σε λεία επιφάνεια και (β) σε επιφάνεια με τραχύτητα όπου παρατηρείται παγίδευση αέρα κάτω από τη σταγόνα.

Η μεθοδολογία αυτή εφαρμόστηκε και σε συστήματα ηλεκτροδιαβροχής (electrowetting) με σταγόνες που διαβρέχουν τραχιές επιφάνειες. Σε αυτή την περίπτωση, η υπολογιστική διαδικασία περιλαμβάνει την επίλυση των εξισώσεων ηλεκτροϋδροστατικής, δηλαδή των εξισώσεων κατανομής του ηλεκτρικού πεδίου γύρω από τη σταγόνα, καθώς επίσης και της τροποποιημένης εξίσωσης Young-Laplace επαυξημένης με έναν ηλεκτροστατικό όρο<sup>2</sup>. Επιπλέον, οι αλληλεπιδράσεις μικρο-κλίμακας (δυνάμεις van der Waals) μεταξύ υγρού και στερεού ενσωματώθηκαν και στη δυναμική μοντελοποίηση, δηλαδή στην επίλυση των εξισώσεων Navier-Stokes, μέσω της εφαρμογής της πίεσης αποκόλλησης (disjoining pressure) στην επιφάνεια της σταγόνας. Αξίζει να αναφερθεί ότι προσομοιώσεις μέσο- (Lattice-Boltzmann) ή νάνο- (Molecular-Dynamics) κλίμακας, που χρησιμοποιούνται συνήθως για τέτοιου είδους

προβλήματα, έχουν απαγορευτικά μεγάλο υπολογιστικό κόστος για σταγόνες ρεαλιστικού μεγέθους (ακτίνας μερικών χιλιοστών), σε σχέση με την μονοδιάστατη εξίσωση Young-Laplace.

Με τη χρήση των παραπάνω υπολογιστικών εργαλείων καθίσταται δυνατή η μοντελοποίηση φαινομένων (ηλεκτρο-) διαβροχής σε επιφάνειες με τραχύτητα καθώς και η μελέτη την δυναμικής τους συμπεριφοράς. Στη επόμενη φάση της παρούσας διδακτορικής διατριβής θα εξεταστεί η επίδραση των γεωμετρικών χαρακτηριστικών της τραχύτητας στις διαβρεκτικές ιδιότητες των επιφανειών. Επιπλέον, θα χρησιμοποιηθούν αλγόριθμοι βελτιστοποίησης για την κατάλληλη σχεδίαση των δομών της επιφανειακής τραχύτητας με σκοπό την ελεγχόμενη μεταβολή της διαβρεκτικότητας με το ελάχιστο δυνατό ενεργειακό κόστος. Στην τελική φάση της διδακτορικής διατριβής θα πραγματοποιηθεί σύγκριση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων με αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις ώστε να επιβεβαιωθεί η αξιοπιστία των προτεινόμενων υπολογιστικών μοντέλων.

Η εκπόνηση της διδακτορικής διατριβής χρηματοδοτείται από το Ευρωπαϊκό Συμβούλιο Έρευνας στα πλαίσια του έργου “HYDROFAKIR: Roughness design towards reversible non- / full- wetting surfaces: From Fakir Droplets to Liquid Films”.

Αναφορές (που έχουν προκύψει από την διδακτορική διατριβή μέχρι τώρα)

- 1) N. T. Chamakos, M. E. Kavousanakis and A. G. Papathanasiou “Enabling efficient energy barrier computations of wetting transitions on geometrically patterned surfaces.” *Soft Matter*, 9, 9624, 2013.
- 2) N. T. Chamakos, M. E. Kavousanakis and A. G. Papathanasiou “Neither Lippmann nor Young: Enabling electrowetting modeling on structured dielectric surfaces.” *Langmuir*, accepted for publication, 2014.