

پسته تماس

انجمن علوم و تکنولوژی سطح ایران



Iranian Society of Surface Science & Technology (ISSST)

تاریخ: ۱۳۸۷/۱/۲۴

جناب آقای محمد مقیمان

دانشکده مهندسی - دانشگاه فردوسی مشهد

احتراماً، به استحضار می‌رساند مقاله جنابعالی و همکاران تحت عنوان تأثیر زاویه تماس در برخورد قطره با سطح جامد در نشریه شماره ۶ به چاپ رسیده است. شایان ذکر است نشریه فوق در نیمسال دوم ۱۳۸۷ به چاپ رسیده است و توزیع نشریه مذکور در سال ۱۳۸۸ صورت پذیرفته است.

با تشکر و احترام

مهدی صالحی

سرپرست نشریه علوم و مهندسی سطح

Address:
Department of Materials Engineering
Ferdowsi University of Technology
Tehran 84156-1344
Tel: +98 311-3912787, Fax: +98 311 3912757
E-mail: issst@ipc.fut.ac.ir

نشانی:
دانشکده مهندسی مواد
دانشگاه فردوسی مشهد
اصفهان کد پستی ۸۲۱۵۶
تلفن / فاکس: +۹۸ ۳۱۱ ۳۹۱۲۷۸۷
پست الکترونیکی: issst@ipc.fut.ac.ir

تأثیر زاویه تماس در برخورد قطره با سطح جامد

سعید اسدی، محمد پسندیده‌فرد و محمد مقیمان

گروه مکانیک پژوهشکده علوم و صنایع غذایی خراسان

گروه مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد

چکیده

زاویه تماس تأثیر بسیار مهمی در رفتار قطره به هنگام برخورد با سطح جامد، از جمله تغییر شکل، پخش شدن و یا حتی جدا شدن قطره از روی سطح دارد. در این مقاله اثر زاویه تماس در برخورد قطره با سطح، مطالعه و مدل‌سازی شده است. ابتدا با استفاده از تئوری سینتیک مولکولی و بر پایه تحقیقات جدید، رابطه‌ای برای تعیین زاویه تماس دینامیکی قطره با سطح به دست آمده است. این رابطه سپس در شبیه‌سازی عددی قطره با سطح به کار رفته و بر پایه آن مدل عددی اصلاح گردیده است. نتایج مدل با نتایج آزمایشگاهی و همچنین با نتایج حاصل از مدل‌های قبلی (استفاده از زاویه تماس تعادلی، زوایای تماس پیشروی و پسروی)، مقایسه و مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. مقایسه مدل با نتایج آزمایشگاهی نشان‌دهنده دقت بالای مدل و همچنین شبیه‌سازی دقیق رفتار قطره در برخورد با سطح می‌باشد. نتایج نشان می‌دهد که استفاده از تئوری سینتیک مولکولی در مقایسه با مدل زاویه تعادلی، از نوسانات جمع و پخش شدن قطره بر روی سطح خصوصاً سطوح رطوبت‌پذیر، جلوگیری کرده و همچنین پیش‌بینی دقیق‌تری از مقدار و زمان حداکثر و حداقل قطر قطره پخش شده بر روی سطح، نسبت به مدل زوایای پیشروی و پسروی دارد. بر اساس نتایج حل عددی، منطقه پخش و منطقه جدا شدن قطره از روی سطح مشخص و مقدار حداکثر پخش بحرانی تعریف و تعیین گردیده است. در ادامه، مدلی تحلیلی برای بررسی تأثیر زاویه تماس در تعیین مقدار حداکثر پخش قطره بر روی سطح، ارائه شده است. نتایج بدست آمده از مدل تحلیلی در اعداد موشننگی (Ca) کم، نشان می‌دهد که با افزایش زاویه تماس تعادلی و یا کاهش عدد We، مقدار حداکثر پخش قطره کاهش یافته و وابستگی کمتری به عدد Re پیدا می‌کند. در مقابل، مقدار حداکثر پخش در مقادیر زیاد We با مقادیر کم زاویه تماس تعادلی افزایش پیدا کرده و به عدد Re وابستگی بیشتری دارد.

واژه‌های کلیدی: زاویه تماس، زاویه تماس تعادلی، زاویه تماس دینامیکی، تئوری سینتیک مولکولی، پخش قطره، برخورد قطره، شبیه‌سازی عددی، مدل تحلیلی

The effect of contact angle on droplet impact onto a solid surface

S. Asadi, M. Passandideh-Fard and M. Moghiman

Mechanical Engineering Department of Khorasan Research Institute for Food Science and Technology
Department of Mechanical Engineering, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

Abstract: Contact angle has an important effect on the dynamic behavior of a droplet during its impact onto a solid surface; this behavior includes deformation, spreading and even rebounding of the droplet from the surface. In this paper, the effect of contact angle during droplet impact is studied and numerically simulated. First, using molecular-kinetic theory and based on the newly available research in this field, a correlation for determining the dynamic contact angle during droplet impact is obtained. This correlation is then implemented in the numerical model used to simulate the process. The results of the numerical model are compared with those of the experiments and those of the previous models (using an equilibrium contact angle; two advancing and receding contact angles). Model predictions agreed well with experimental measurements; this validated the model results for the droplet deformation during the impact. The results show that using the molecular-kinetic theory in modeling contact angle prevents the spreading-and-recoiling oscillations of the droplet that are seen when an equilibrium contact angle is used. Compared to the model with advancing and receding contact angles, the molecular-kinetic theory results in a better prediction of the time and value of the maximum and minimum spread of the droplet on the solid surface. Based on the results of the developed model, a critical maximum spread and two regions of droplet spreading or rebounding from the surface are defined. Next in the paper, an analytical model is presented to study the effect of contact angle on the droplet maximum spread. The results of this model show that for low Capillary numbers (Ca) with an increase of the equilibrium contact angle or a decrease of We number, the maximum spread of the droplet is decreased and becomes less dependent on Re number. In contrast, the maximum spread for high We numbers or low equilibrium contact angles is increased and becomes more dependent on Re number

Keywords: contact angle, equilibrium contact angle, dynamic contact angle, molecular-kinetic theory, droplet spreading, droplet impact, numerical simulation, analytical model.

E-mail of corresponding author (s): asadi@krfjst.ir

تأثیر زاویه تماس در برخورد قطره با سطح جامد

سعید اسدی، محمد پسندیده فرد و محمد مقیمان

گروه مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد

چکیده

زاویه تماس تأثیر بسیار مهمی در رفتار قطره به هنگام برخورد با سطح جامد، از جمله تغییر شکل، پخش شدن و یا حتی جدا شدن قطره از روی سطح دارد. در این مقاله اثر زاویه تماس در برخورد قطره با سطح، مطالعه و مدل‌سازی شده است. ابتدا با استفاده از تئوری جنبشی مولکولی و برپایه تحقیقات جدید، رابطه‌ای برای تعیین زاویه تماس دینامیکی قطره با سطح به دست آمده است. این رابطه سپس در شبیه‌سازی عددی قطره با سطح به کار رفته و برپایه آن مدل عددی اصلاح گردیده است. نتایج مدل با نتایج آزمایشگاهی و همچنین با نتایج حاصل از مدل‌های قبلی (استفاده از زاویه تماس تعادلی، زوایای تماس پیشروی و پسروی)، مقایسه و مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. مقایسه مدل با نتایج آزمایشگاهی نشان‌دهنده دقت بالای مدل و همچنین شبیه‌سازی دقیق رفتار قطره در برخورد با سطح می‌باشد. نتایج نشان می‌دهد که استفاده از تئوری جنبشی مولکولی در مقایسه با مدل زاویه تعادلی، از نوسانات جمع و پخش شدن قطره بر روی سطح خصوصاً سطوح رطوبت پذیر، جلوگیری کرده و همچنین پیش‌یابی دقیقتری از مقدار و زمان حداکثر و حداقل قطر قطره پخش شده بر روی سطح، نسبت به مدل زوایای پیشروی و پسروی دارد. بر اساس نتایج حل عددی، منطقه پخش و منطقه جدا شدن قطره از روی سطح مشخص و مقدار حداکثر پخش بحرانی تعریف و تعیین گردیده است. در ادامه، مدلی تحلیلی برای بررسی تأثیر زاویه تماس در تعیین مقدار حداکثر پخش قطره بر روی سطح، ارائه شده است. نتایج بدست آمده از مدل تحلیلی در اعداد موئینگی (Ca) کم، نشان می‌دهد که با افزایش زاویه تماس تعادلی و یا کاهش عدد We، مقدار حداکثر پخش قطره کاهش یافته و وابستگی کمتری به عدد Re پیدا می‌کند. در مقابل، مقدار حداکثر پخش در مقادیر زیاد We یا مقادیر کم زاویه تماس تعادلی افزایش پیدا کرده و به عدد Re وابستگی بیشتری دارد.

واژه‌های کلیدی: زاویه تماس، زاویه تماس تعادلی، زاویه تماس دینامیکی، تئوری جنبشی مولکولی، پخش قطره، برخورد قطره، شبیه‌سازی عددی، مدل تحلیلی

رفتار قطره در برخورد با سطح جامد، تحت تأثیر رطوبت پذیری سطح می‌باشد [۳]. رطوبت پذیری هر سطح بوسیله زاویه تماس بین مایع با سطح جامد مشخص می‌گردد. شکل ۱ نشان‌دهنده زاویه تماس مایع - جامد در حالت سکون قطره بر روی سطح می‌باشد. زاویه تماس در مدل‌سازی عددی و تحلیلی به عنوان یک شرط مرزی مهم بکار برده می‌شود. خصوصاً نقش آن در برخوردهایی با انرژی اینرسی کم نسبت به انرژی ویسکوز یا موئینگی، بسیار اساسی است [۴]. زاویه تماس تعادلی (θ_e) به تنشهای سطحی جامد- گاز، جامد- مایع و مایع - گاز بستگی

مقدمه

برخورد قطره با سطح جامد نقش مهمی در بسیاری از فرآیندهای صنعتی دارد. فرآیندهایی همانند پاشش حرارتی پلاسمایی، ایجاد پوشش رنگها بوسیله پاشش، خشک‌کن‌های پاششی، برخورد ذرات سوخت با دیواره در محفظه‌های احتراق، چاپگرهای ink jet و بسیاری از موارد صنعتی دیگر نیاز به شناخت دینامیک برخورد قطرات مایع با سطح جامد دارد [۱، ۲]. بنابراین شبیه‌سازی اینگونه فرآیندها به صورت عددی و یا تحلیلی دارای ارزش فراوانی است.

دارد و در حالت ایستایی کامل قطره بر روی سطح، اندازه گیری می‌شود. زاویه تماس تعادلی منحصراً به خواص فیزیکی سطح بستگی دارد [۵،۳]. زاویه تماسی که در حین حرکت خط تماس مشاهده می‌گردد را، زاویه تماس دینامیکی (θ_d) می‌نامند. خط تماس در شکل ۱ نشان داده شده است. زاویه تماس دینامیکی به وجود آمده را در حین پخش شدن قطره بر روی سطح (و حرکت خط تماس به سمت فاز گاز)، زاویه تماس پیشروی (θ_a)، و در حین جمع شدن قطره (و حرکت خط تماس به سمت فاز مایع)، زاویه تماس پسروی (θ_r)، می‌نامند. زاویه تماس دینامیکی، برخلاف زاویه تماس تعادلی، خاصیت فیزیکی و مادی نبوده بلکه به سرعت خط تماس بستگی دارد [۶]. در مراحل مختلف برخورد قطره با سطح، زاویه تماس دینامیکی به عنوان شرط مرزی مهم در مدل‌سازی‌ها نقش بسزایی دارد.

پدیده برخورد قطره با سطح مورد توجه بسیاری از محققین بوده است [۶-۹،۳]. در اولین مدل‌های عددی ارائه شده در این زمینه، از اثر تنش سطحی و زاویه تماس صرف‌نظر شده بود [۷]. در مدل‌های بعدی زاویه تماس بصورت یک زاویه ثابت در طول فرآیند برخورد قطره در نظر گرفته شده بود که نسبت به مدل‌های اولیه دقت بیشتری داشت [۸]. سپس به وسیله عکسبرداری و اندازه گیری تغییرات زاویه تماس در هر مقطع زمانی، و بکارگیری آنها در شرایط مرزی حل عددی، جواب‌های بهتری نسبت به حل عددی با زاویه تماس ثابت، بدست آمد [۹،۳]. بعد از آن یک مدل عددی سه بعدی برای برخورد قطرات با الگوریتم ردیابی حجمی (volume tracking) بدست آمد که در آن، از دو مقدار ثابت اندازه‌گیری شده توسط عکسبرداری برای زاویه تماس پیشروی و پسروی قطرات، استفاده شده بود [۶].

چنانکه ملاحظه می‌شود در مطالعات عددی انجام شده تا کنون، یا از یک زاویه تماس تعادلی و یا دو زاویه تماس پیشروی و پسروی در حل عددی استفاده شده است. این زاویه‌ها توسط آزمایش تعیین شده و سپس در مدل بکار گرفته شده‌اند. تاکنون مدلی که در آن زاویه تماس دینامیکی مستقیماً و به

کمک سرعت خط تماس تعیین شده باشد ارائه نشده است.

از طرفی مدل‌سازی‌های تحلیلی بر روی تخمین مقدار حداکثر پخش قطره که مهمترین و کاربردی ترین شاخص رفتار قطره در برخورد با سطح می‌باشد، متمرکز بوده است. ابتدا با اصلاح مدل Madejski [۱۰]، مدلی تحلیلی برای حداکثر مقدار پخش ارائه گردید که در آن از زاویه تماس پیشروی استفاده شده بود و درصد خطای بالایی که تا برخی موارد به ۵۰٪ می‌رسید داشت [۱۱]. در ادامه یک مدل تحلیلی بر اساس موازنه انرژی‌های جنبشی، سطحی و کار انجام شده توسط لزجت قطره مایع در هنگام برخورد عمودی قطره با سطح ارائه گردید که در آن از زاویه تماس پیشروی استفاده گردیده بود [۳]. پس از آن، معادله حرکت لبه قطره که براساس موازنه جرم و انرژی بدست آمده بود، برای تخمین مقدار حداکثر پخش قطره، با استفاده از زاویه تماس پیشروی، بکار برده شد [۱۲]. مدل تحلیلی برخورد مایل قطره به یک سطح جامد نیز براساس موازنه‌های انرژی به دست آمده که در آن از زاویه تماس پیشروی استفاده گردیده است [۱۳]. در تمامی مدل‌های تحلیلی گذشته، از زاویه تماس پیشروی در معادله تخمین حداکثر پخش قطره بر روی سطح استفاده شده است.

در این مقاله، زاویه تماس دینامیکی به وسیله تئوری جنبشی مولکولی (Molecular-kinetic theory)

تعیین و در شبیه سازی عددی اعمال شده است. همچنین اثر زاویه تماس تعادلی، پیشروی و پسروی و زاویه تماس دینامیکی به دست آمده از تئوری جنبشی مولکولی، در رفتار قطره در طول برخورد با سطح، مطالعه گردیده است. برای مقایسه جواب‌های بدست آمده از حل عددی با نتایج آزمایشگاهی، از جدیدترین نتایج آزمایشگاهی که در مرجع [۴] ارائه گردیده، استفاده شده است. در ادامه مدلی تحلیلی ارائه گردیده که در آن به جای زاویه تماس پیشروی، از زاویه تماس تعادلی استفاده شده است. در این مدل، با داشتن اعداد بدون بعد We ، Re و زاویه

تماس تعادلی، مقدار حداکثر پخش قطره تخمین زده می‌شود که برای محاسبات سریع مناسب می‌باشد.

شبیه‌سازی عددی

الف - معادلات حاکم

شکل ۲ طرح کلی از برخورد قطره با سطح را نشان می‌دهد. معادلات حاکم شامل بقاء جرم و ممنتوم و معادله ای برای حرکت سطح آزاد می‌باشند. توضیح ریاضی مسئله بر اساس فرض‌های زیر انجام شده است.

سیال، مایع تراکم ناپذیر و نیوتنی با دانسیته، لزجت و تنش سطحی ثابت بوده و جریان در طول برخورد آرام باشد (مطالعات قبلی [۱۴، ۱۳، ۶] نشان می‌دهد که در طول برخورد یک قطره مایع با سطح، فرض جریان آرام قابل قبول می‌باشد. لازم به ذکر است که همه مطالعاتی که تا کنون بر روی برخورد قطره با سطح جامد انجام شده با استفاده از این فرض بوده است)؛ تاثیر فاز گازی اطراف قطره بر روی فاز مایع در طول برخورد ناچیز باشد (تنش‌های لزجی در سطح تماس قطره با هوا یا گاز اطراف آن صفر فرض می‌شود [۱، ۲، ۶]. با توجه به اینکه تنش لزجی متناسب با لزجت دینامیکی می‌باشد و لزجت دینامیکی هوا بسیار پایینتر از لزجت دینامیکی سیال مایع است، بنابراین از مقدار تنش‌های لزجی در سطح تماس قطره با گاز صرف نظر می‌گردد. تطابق نتایج شبیه سازی عددی با نتایج آزمایشگاهی در تحقیقات قبلی، این فرض را تایید می‌کند [۱-۳، ۱۵].

معادلات حاکم بقاء جرم و ممنتوم برای جریان سیال درون قطره به شکل زیر نوشته می‌شود [۱، ۶]:

سیال درون قطره به شکل زیر نوشته می‌شود [۱، ۶]:

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}\mathbf{V}) = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \tilde{\tau} + \mathbf{g} + \frac{1}{\rho} \mathbf{F}_b \quad (2)$$

که \mathbf{V} نمایشگر بردار سرعت، P فشار، ρ دانسیته مایع، $\tilde{\tau}$ تنسور تنش، \mathbf{g} شتاب ثقل و \mathbf{F}_b نیروهای جسمی (بر واحد حجم) موثر روی سیال می‌باشند. با توجه به نیوتنی بودن سیال:

$$\tilde{\tau} = \mu (\nabla \mathbf{V} + (\nabla \mathbf{V})^T) \quad (3)$$

که μ نشاندهنده لزجت دینامیکی سیال است. به همراه معادلات فوق، یک معادله دیگر برای ردیابی سطح مشترک مایع-گاز و مدل سازی تبادل جرم بین آنها لازم است. در روش سیر حجمی سیال، حرکت مرز مشترک بین دو سیال به وسیله تابع نشانگر f مدل می‌شود:

$$f = \begin{cases} 1 & \text{در مایع} \\ > 0, < 1 & \text{در سطح مشترک مایع-گاز} \\ 0 & \text{در گاز} \end{cases} \quad (4)$$

از آنجا که متغیر f بوسیله جریان سیال جابجا می‌شود می‌توان معادله جابجایی زیر را برای آن نوشت [۱، ۶]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) f = 0 \quad (5)$$

با توجه به در نظر گرفتن کشش سطحی در مرز مشترک مایع-گاز، با فرض صفر بودن تنش برشی و ثابت بودن کشش سطحی معادله لاپلاس بعنوان یک شرط در این مرز بصورت زیر نوشته می‌شود:

$$\Delta P_s = P_l - P_g = \gamma J \quad (6)$$

در این معادله γ کشش سطحی در سطح مشترک و ΔP_s نشاندهنده اختلاف فشار بین مایع و گاز بخاطر وجود کشش سطحی می‌باشد. J انحناى سطح آزاد در محل موردنظر است که به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$J = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \quad (7)$$

که در آن R_1 و R_2 شعاعهای انحناء سطح در نقطه مورد نظر می‌باشند. بجای جایگذاری مستقیم معادله (۶) برای فشار به عنوان یک شرط مرزی در معادلات حاکم، از روش بهتری استفاده می‌شود که در آن تنش سطحی به عنوان یک نیروی حجمی در ترم \mathbf{F}_b از معادله (۲) فرمولبندی می‌گردد. این روش به مدل CSF (Continuum Surface Force) معروف بوده و توسط Brackbill [۱۵] ارائه گردیده است.

حل معادلات حاکم نیاز به تعیین شرایط مرزی بکار برده شده در سطح جامد و در مرزهای متقارن و سطح آزاد مایع دارند. برای سطح جامد، سرعت سیال بدون لغزش (no-slip) و بدون نفوذ

واحد سطح جامد بوده و با λ ، به صورت $\lambda \sim n^{-1/2}$ بستگی دارد. همچنین فرکانس پرش تعادلی (κ_w) به تاثیر انرژی فعالیت مولی در مرطوب شدن سطح یا ΔG_w مربوط است که به شکل زیر است:

$$\kappa_w = \frac{kT}{h} \exp\left(\frac{-\Delta G_w}{N_A kT}\right) \quad (10)$$

که N_A عدد آوگادرو و h ثابت پلانک است. برای جریان لزج در مایعات ساده ΔG_w در حدود 10 kJ mol^{-1} است. مقادیر زیاد یا کم ΔG_w دلالت بر وابستگی قوی یا ضعیف زاویه تماس به سرعت خط تماس دارد. بهترین تقریب برای نشان دادن مکانیزم واقعی اتلاف در خط تماس، مخلوط کردن تاثیر لزجت و تاثیر متقابل مایع-جامد با نوشتن معادله $\Delta G_w = \Delta G_s + \Delta G_v$ می باشد که ΔG_s تاثیر سطح جامد و ΔG_v تاثیر متقابل مولکولهای مایع را نشان می دهد. از ترکیب این تعریف با معادله ۱۰، معادله زیر بدست می آید:

$$\kappa_w = \frac{kT}{h} \exp\left(\frac{-\Delta G_s - \Delta G_v}{N_A kT}\right) \quad (11)$$

مازاد انرژی اکتیواسیون گیبس (ΔG_v) از معادله زیر بدست می آید:

$$\mu = \frac{h}{v} \exp\left(\frac{\Delta G_v}{N_A kT}\right) \quad (12)$$

که v حجم مخصوص قطره مایع است. علاوه بر آن، اگر فرکانس برهم کنش مایع - جامد را به شکل زیر تعریف کنیم:

$$\kappa_s = \frac{kT}{h} \exp\left(\frac{-\Delta G_s}{N_A kT}\right) \quad (13)$$

با استفاده از معادلات ۱۱، ۱۲ و ۱۳ خواهیم داشت:

$$\kappa_w = \kappa_s \left(\frac{h}{\mu v}\right) \quad (14)$$

بنابراین رابطه ۹ به شکل زیر در می آید:

$$V_{CL} = \frac{2\kappa_s h \lambda}{\mu v} \sinh\left[\frac{\gamma}{2nkT} (\cos \theta_e - \cos \theta_d)\right] \quad (15)$$

طبق تئوری ذکر شده، اگر برهم کنش مولکولهای مایع ضعیف باشد، آنگاه $\kappa_s \approx \kappa_w$ می باشد. اگر برهم کنش جامد-مایع ضعیف باشد، κ_s بزرگ بوده و θ_d برآورد شده از معادله (۱۵) وابستگی ضعیفی به V_{CL}

(no-penetration) و برای مرز متقارن، سرعت سیال دارای شرایط لغزش (slip) و بدون نفوذ می باشد. در سطح آزاد مایع نیز تنش برشی صفر فرض می شود. یکی از شرایط مرزی بسیار مهم دیگر اعمال زاویه تماس در خط تماس (محل تلاقی سطح آزاد و سطح جامد) می باشد. این زاویه نمایانگر مقدار رطوبت پذیری سطح جامد بوده و در این مقاله مطابق قسمت ب (که در ادامه خواهد آمد)، از تئوری جنبشی مولکولی برای اعمال کردن آن در حل عددی استفاده شده است.

شرایط ابتدایی برخورد قطرات با دیواره یا جداره ها، سرعت و فشار آن می باشد که به شکل زیر است.

$$\dot{V} = \dot{V}_0, \quad P_0 = 4 \frac{\gamma}{D_0} \quad (8)$$

که \dot{V}_0 سرعت اولیه برخورد قطره با سطح، D_0 قطر اولیه قطره و P_0 فشار اولیه داخل قطره می باشد. P_0 توسط معادله لاپلاس بدست می آید [۶، ۱].

ب - تئوری جنبشی مولکولی

در این تئوری فرض می شود که مولکولهای مایع به محل های جذب در سطح جامد چسبیده و مولکولهای گاز را از این محل ها دفع می نمایند [۱۶]. بررسی این جذب و دفع سطحی به صورت آماری، نشان دهنده رفتار ماکروسکوپی خط تماس در منطقه سه فازی مایع-گاز-جامد می باشد. شکل ۳ نشان دهنده مدل تئوری جنبشی مولکولی است. طبق این تئوری، سرعت خط تماس بوسیله فرکانس جابجایی مولکول ها κ و طول λ که نشان دهنده جابجایی های مولکولی می باشد، تعیین می شود. با تلفیق این ایده و استفاده از تئوری نرخ فعال شده انتقال مایعات (Fernkel-Eyring activated rate theory of transport in liquids)، رابطه زیر بین V_{CL} و θ_d ، θ_e بوسیله مرجع [۴] بدست آمده است:

$$V_{CL} = 2\kappa_w \lambda \sinh\left[\frac{\gamma}{2nkT} (\cos \theta_e - \cos \theta_d)\right] \quad (9)$$

که k و T به ترتیب ثابت بولتزمن و دمای مطلق می باشند. مقدار n تعداد محل های جذب سطحی در

دارد. مقادیر کم زاویه تماس تعادلی (θ_e) برای یک سطح نشان‌دهنده برهم کنش یا اثر متقابل شدید مایع - جامد است. در صورتی که مقادیر زیاد زاویه تماس تعادلی به معنی اثر متقابل ضعیف مایع - جامد می‌باشد. جدول ۱ مربوط به پارامترهای جنبشی مولکولی تماس قطرات آب با سطوح رطوبت‌پذیر و رطوبت‌پذیر جزئی (partial wetting) است. مقادیر ΔG_w ارائه شده در جدول ۱ نشان‌دهنده انرژی لازم برای حرکت خط تماس در طول سطح جامد می‌باشد. در مقادیر بالای زاویه تماس تعادلی ($\theta_e \gg 140^\circ$)، برای مثال سطوح کم انرژی (و یا سطوح رطوبت‌ناپذیر) در حین تغییر سرعت خط تماس در طول برخورد قطره، زاویه تماس دینامیکی تقریباً ثابت و معادل زاویه تماس تعادلی باقی‌ماند که به دلیل عدم رطوبت‌پذیر بودن سطح است [۴]. به عبارتی در سطوحی که فرا هیدروفوبیک (ultra-hydrophobic) هستند، قطره با سطح، بدون اینکه آنرا خیس کند برخورد می‌کند و با الاستیسیته قابل توجهی از روی سطح بلند شده و جدا می‌گردد. با توجه به عدم تغییر زاویه تماس دینامیکی، در برخورد قطره با سطوح رطوبت‌ناپذیر، نیازی به تغییرات خاص در حل عددی (برای مثال استفاده از تئوری جنبشی مولکولی) نمی‌باشد و نتایج رضایت‌بخش با همان زاویه تماس تعادلی مایع- جامد بدست می‌آید.

ج- روش حل

معادلات حاکم با استفاده از روش عددی حجم محدود گسسته سازی می‌شوند. در هر سلول مقادیر سرعت در وسط وجوه و فشار و مقدار تابع f در مرکز سلول در نظر گرفته می‌شوند. شکل ۴ یک سلول دو بعدی را بر این اساس نشان می‌دهد. معادله ممنتم ۲ به روش اولر پیشرو (Forward Euler) منفصل و به دو قسمت تقسیم می‌شود:

$$\frac{\mathbf{V}' - \mathbf{V}^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\mathbf{V}\mathbf{V})^n + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \tilde{\tau}^n + \mathbf{g}^n + \frac{1}{\rho} \mathbf{F}_b^n \quad (۱۶)$$

$$\frac{\mathbf{V}^{n+1} - \mathbf{V}'}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho^n} \nabla P^{n+1} \quad (۱۷)$$

ابتدا برای میدان مشخص \mathbf{V}^n و در مرحله زمانی n مقدار میانی \mathbf{V}' به صورت صریح از ترمهای مربوط به جابجائی، لزجت، جاذبه و نیروی جسمی، از معادله (۱۶) محاسبه می‌شود. در مرحله بعد از ترکیب کردن معادله (۱۷) با معادله (۱) در مرحله جدید زمانی $n+1$ ، معادله پواسون (Poisson) برای فشار بدست می‌آید:

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho^n} \nabla P^{n+1} \right) = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{V}' \quad (۱۸)$$

معادله (۱۶) توسط روش حجم کنترلی منفصل می‌گردد. از انتگرال گیری این معادله بر روی حجم کنترل $\Omega_{i,j,k}$ ، معادله زیر بدست می‌آید:

$$\frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega_{i,j,k}} (\mathbf{V}' - \mathbf{V}^n) d\Omega = - \int_{\Omega_{i,j,k}} \nabla \cdot (\mathbf{V}\mathbf{V})^n d\Omega + \frac{1}{\rho} \int_{\Omega_{i,j,k}} \nabla \cdot \tilde{\tau}^n d\Omega + \int_{\Omega_{i,j,k}} \mathbf{g}^n d\Omega + \frac{1}{\rho} \int_{\Omega_{i,j,k}} \mathbf{F}_b^n d\Omega \quad (۱۹)$$

دو ترم اول سمت راست معادله (۱۹) توسط تئوری گوس (Gauss' theorem) به انتگرال بر روی سطح حجم کنترلی $S_{i,j,k}$ تبدیل شده و فرض می‌شود بقیه انتگرال‌ها بر روی حجم $\Omega_{i,j,k}$ ثابت هستند. بنابر این معادله حاصله بدین شکل است:

$$\frac{\mathbf{V}' - \mathbf{V}^n}{\Delta t} = - \frac{1}{\Omega_{i,j,k}} \int_{S_{i,j,k}} \mathbf{V}^n (\mathbf{V}^n \cdot \hat{n}_s) dS + \frac{1}{\rho \Omega_{i,j,k}} \int_{S_{i,j,k}} (\tilde{\tau}^n \cdot \hat{n}_s) dS + \mathbf{g}^n + \frac{1}{\rho} \mathbf{F}_b^n \quad (۲۰)$$

که \hat{n}_s بردار واحد، به سمت خارج و عمود بر سطح $S_{i,j,k}$ است. معادلات ذکر شده در سه جهت x ، y ، z به صورت جداگانه بسط داده می‌شوند. بعد از انفصال معادلات، الگوریتم زیر در هر مرحله زمانی برای مشابه سازی برخورد قطره با سطح به کار برده شده است [۶]:

۱- تعیین \mathbf{V}' از معادله (۱۶)

۲- حل معادله (۱۸) بطور ضمنی برای تعیین P^{n+1} به همراه شرایط مرزی موثر در P

۳- محاسبه \mathbf{V}^{n+1} از معادله (۱۷)

۴- به کار بردن شرایط مرزی برای \mathbf{V}^{n+1}

۵- تعیین توزیع نسبت حجمی جدید سیال f^{n+1} بوسیله معادله (۵) و بدست آوردن شکل جدید سطح آزاد مایع-گاز به کمک الگوریتم Youngs [۱۷] (در این روش، سطح آزاد مایع-گاز در هر سلول با یک سطح صاف که سلول را قطع می‌کند، تخمین زده می‌شود)

۶- به کار بردن مجدد شرایط مرزی برای \hat{V}^{n+1} .

د- روش اعمال زاویه تماس در حل عددی

برای اعمال زاویه تماس دینامیکی، ابتدا مقادیر $\hat{h} = \nabla f$ مشخص می‌گردد. نرمالهای رئوس و مرکز یک سلول در شکل ۵ نشان داده شده است. ∇f طبق رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\Delta x} \{0.368 \times (f_{i,j} + f_{i,j-1} - f_{i-1,j} - f_{i-1,j-1}) + 0.1510(f_{i+1,j} + f_{i+1,j-1} - f_{i-2,j} - f_{i-2,j-1}) + 0.0949(f_{i,j+1} + f_{i,j-2} - f_{i-1,j+1} - f_{i-1,j-2}) + 0.281(f_{i+1,j+1} + f_{i+1,j-2} - f_{i-2,j+1} - f_{i-2,j-2})\} \quad (21)$$

برای $\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ رابطه‌ای مشابه (۲۱) نوشته

میشود. ضرایب رابطه (۲۱) از روش هموارسازی peskin با الگوی $4 \times 4 \times 4$ بدست می‌آید [۱۸]. بعد از محاسبه مقادیر $\hat{h}_{i\pm\frac{1}{2},j\pm\frac{1}{2}}$ مقدار $\hat{h}_{i,j}$ در مرکز سلول با متوسط گیری محاسبه می‌شود (شکل ۵). پس از محاسبه بردارهای واحد $\hat{n}_{i,j}$ و $\hat{n}_{i\pm\frac{1}{2},j\pm\frac{1}{2}}$ اگر خط تماس بر روی گره سلول مجاور سطح جامد قرار گیرد، بردار واحد آن گره به گونه‌ای تعیین می‌گردد که زاویه ایجاد شده آن با بردار عمود بر سطح، معادل زاویه تماس دینامیکی بدست آمده از تئوری جنبشی مولکولی شود. این مقدار جدید در ادامه حل عددی اعمال می‌گردد. شکل ۶ نشان‌دهنده سلول حاوی خط تماس است. برای تعیین زاویه تماس دینامیکی به وسیله تئوری جنبشی مولکولی، از سرعت خط

تماس واقع در این سلول استفاده می‌شود. اگر خط تماس همانند شکل ۶، بین دو گره سلول مجاور سطح جامد باشد، آنگاه دو بردار $\hat{n}_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ و $\hat{n}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ بدست آمده از مرحله قبل به گونه‌ای تعیین می‌شوند که زاویه بین هر یک از این دو بردار و بردار واحد عمود بر سطح، معادل زاویه تماس دینامیکی گردد. مقادیر جدید $\hat{n}_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ و $\hat{n}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ در حل عددی اعمال گردیده و در هر تکرار از حل عددی به همین روش اصلاح می‌گردند. بعد از اصلاح بردارهای واحد در سلول حاوی خط تماس، انحناء یا خمیدگی سطح مایع از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$J_{i,j} = -(\hat{n}_{x_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}} + \hat{n}_{x_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}} - \hat{n}_{x_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}} - \hat{n}_{x_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}}) / 2\Delta x - (\hat{n}_{y_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}} + \hat{n}_{y_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}} - \hat{n}_{y_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}} - \hat{n}_{y_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}}) / 2\Delta y \quad (22)$$

مقدار J بدست آمده از رابطه (۲۲) در رابطه (۶) گذاشته شده و ΔP_s به دست می‌آید. سپس مقدار \hat{F}_b از مدل CSF تعیین و در رابطه (۲) گذاشته می‌شود. سطح مایع در هر سلول $(A_{i,j})$ از مقادیر $f_{i,j}$ و $\hat{h}_{i,j}$ محاسبه شده و این روش برای هر گام زمانی تکرار می‌گردد.

روش VOF بسته به نوع روشی که برای ساخت سطح استفاده می‌شود (مثلاً روش Youngs)، قابلیت بالایی در پیش‌یابی تغییرات سطح آزاد دارد که در مقالات مختلفی انطباق نتایج این روش با نتایج آزمایشگاهی اثبات شده است [۱-۳، ۵، ۶، ۱۴]. در شبیه سازی انجام شده اندازه شبکه بر اساس مطالعه تصحیح اندازه شبکه، تعیین گردیده است، به گونه‌ای که اندازه سلول‌ها آنقدر کوچک شده تا کاهش بیشتر آن، تغییر محسوسی در پیش‌یابی شکل تغییرات قطره در طول فرآیند برخورد آن با سطح، نداشته باشد. گسسته سازی در شبکه محاسباتی یکنواخت انجام گردیده که در آن اندازه هر سلول معادل $1/2$ شعاع قطره بوده است. محاسبات عددی با کامپیوتر پنتیوم ۴ انجام گردیده است. زمان تقریبی CPU، محدوده‌ای از ۲ تا ۳ ساعت داشته است.

$$\xi_{\max} = \frac{D_{\max}}{D_0} =$$

$$\sqrt{\frac{We + 12}{3(1 - \cos \theta_e (1 - 4.96 (\frac{We}{Re})^{0.702})) + 8 We \frac{1}{\sqrt{Re}}}}$$

(۲۶)

به وسیله رابطه (۲۶) و با زاویه تماس تعادلی، عدد رینولدز و عدد وبر، مقدار حداکثر پخش قطره بر روی سطح بدست می‌آید.

نتایج و بحث

الف- اعتبار مدل عددی

در شکل ۷ نتایج حل عددی برای برخورد قطره آب به قطر ۱/۴ mm و سرعت ۱ m/s، به سطح صاف رطوبت ناپذیر ($\theta_e = 135^\circ$)، نشان داده شده است. این شکل نشان‌دهنده تاثیر قابل توجه زاویه تماس در رفتار قطره به هنگام برخورد با سطح می‌باشد. در این شکل قطره پس از برخورد با سطح، بر روی آن پخش شده و در مدت ۲ms به حداکثر مقدار پخش خود بر روی سطح می‌رسد. بعد از آن دوباره جمع شده و این جمع شدن تا حدود ۶ms ادامه یافته و سپس قطره از روی سطح بلند شده و از آن جدا می‌گردد. به عبارتی قطره آب سطح رطوبت ناپذیر را، مرطوب نمی‌کند. در این شکل شروع زمان از لحظه برخورد قطره با سطح در نظر گرفته شده است.

برای مقایسه نتایج حل عددی توسعه یافته توسط تئوری جنبشی ملکولی، با نتایج آزمایشگاهی، از آزمایش‌های مرجع [۴] استفاده شده است. در آزمایش‌های آنها، قطرات آب توسط سرنگی به ظرفیت ۱ ml و با فشار پمپ ایجاد شده و با تغییر فاصله بین نوک سرنگ و سطح زیرین، سرعت برخورد تنظیم می‌گردیده است. از انواع سطوح مختلف رطوبت پذیر ($\theta_e < 40^\circ$) تا رطوبت ناپذیر ($\theta_e > 140^\circ$) در آزمایش استفاده شده و از برخورد قطره و پخش آن بر روی سطح توسط دوربین دیجیتال سرعت بالا (۱۰۰۰ الی ۳۰۰۰ فرم در ثانیه) با وضوح 168×1280 پیکسل تصویر برداری گردیده

مدل سازی تحلیلی

پارامتر مهم و مورد توجه در فرآیند پخش قطره بر روی سطح، مقدار حداکثر پخش (D_{\max}) می‌باشد که با D_0 (قطر اولیه قطره) نرمال گردیده و با ξ_{\max} نشان داده می‌شود. مدل تحلیلی ارائه شده توسط مرجع [۳]، به شکل زیر می‌باشد:

$$\xi_{\max} = \frac{D_{\max}}{D_0} = \sqrt{\frac{We + 12}{3(1 - \cos \theta_a) + 8 We \frac{1}{\sqrt{Re}}}}$$

(۲۳)

که در آن $Re = U_0 D_0 / \nu$ ، $We = \frac{\rho U_0^2 D_0}{\sigma}$ و ρ ، ν ، U_0 و σ ، به ترتیب، سرعت قطره قبل از برخورد با سطح، ویسکوزیته سینماتیکی، دانسیته و کشش سطحی سیال می‌باشند.

برای تبدیل زاویه تماس پیشروی (θ_a) به تعادلی (θ_e) از رابطه ارائه شده توسط مرجع [۱۸] استفاده می‌کنیم که به شکل زیر است:

$$\frac{\cos(\theta_e) - \cos(\theta_a)}{\cos(\theta_e) + 1} = \tanh(4.96 Ca^{0.702})$$

(۲۴)

که در آن $Ca = \frac{We}{Re}$ عدد موئینگی می‌باشد. برای

اعداد Ca با درجه 0.001 الی 0.1 ، رابطه (۲۳) با استفاده از رابطه (۲۴) به شکل زیر بدست می‌آید:

$$\xi_{\max} = \frac{D_{\max}}{D_0} =$$

$$\sqrt{\frac{We + 12}{3(1 - \cos \theta_e (1 - 4.96 (\frac{We}{Re})^{0.702})) + 4.96 (\frac{We}{Re})^{0.702} + 8 We \frac{1}{\sqrt{Re}}}}$$

(۲۵)

به دلیل کوچک بودن $Ca = \frac{We}{Re}$ ، از جمله سوم در مخرج کسر صرف نظر شده بنابراین معادله بالا به صورت زیر نوشته می‌شود:

است. جزئیات بیشتر چیدمان دستگاهها و آزمایشها در مرجع [۴] آمده است.

در شکل ۸ نتایج حل عددی با نتایج آزمایشگاهی [۴] مقایسه گردیده است. در این شکل برخورد قطره آب به قطر $1/4$ mm و با سرعت 0.7 m/s به سطح رطوبت پذیر جزئی ($We=10$) نشان داده شده است. همانگونه که مقایسه شکلها نشان می‌دهد، حل عددی توانسته است نتایج قابل قبولی بدست آورد. در این شکل قطره پس از برخورد با سطح، در زمان $5/8$ ms به حداکثر پخش خود بر روی سطح می‌رسد. بعد از آن قطره جمع شده و در زمان $15/4$ ms به حداکثر ارتفاع خود در حالت جمع شدن می‌رسد. پس از آن دوباره بر روی سطح پخش شده و در زمان 25 ms به حداکثر پخش در مرحله دوم پخش شدن بر روی سطح رسیده که از مقدار حداکثر پخش در مرحله اول پخش شدن بر روی سطح کمتر است. شروع زمان از لحظه برخورد قطره با سطح در نظر گرفته شده است. مقایسه بهتر و دقیقتر حل عددی توسعه یافته، با نتایج تجربی در شکل‌های ۹ الی ۱۰ نشان داده شده است.

شکل ۹ تغییرات زاویه تماس دینامیکی با زمان را برای برخورد قطره آب به قطر $1/4$ mm و با سرعت 0.77 m/s به سطح رطوبت پذیر جزئی نشان می‌دهد. در این شکل نتایج حاصل از آزمایش مرجع [۴] با نتایج استخراج شده از حل عددی توسعه یافته توسط تئوری جنبشی مولکولی، مقایسه گردیده است که نشان‌دهنده پیش‌بینی خوب تئوری جنبشی مولکولی از تغییرات زاویه تماس دینامیکی می‌باشد.

در شکل ۱۰ مقدار پخش قطره که توسط قطر اولیه آن نرمال شده ($\xi=D/D_0$)، نسبت به زمان نشان داده شده است. قطر اولیه قطره $1/4$ mm و سرعت برخورد 0.77 m/s بوده است. سطح دارای خاصیت رطوبت پذیری جزئی می‌باشد. مقدار زاویه تماس تعادلی قطره با سطح، 74° است. با ثابت گرفتن زاویه تماس دینامیکی و معادل قراردادن آن با زاویه تماس تعادلی در طول حل عددی، دو منحنی برای زوایای تعادلی 74° و 90° بدست آمده است. هر دو منحنی بدست آمده با زوایای تعادلی 74° و 90° ، نشان می‌دهد که قطره پس از برخورد به سطح، و

پس از رسیدن به حداکثر پخش خود (بر روی سطح) دوباره جمع شده و این پخش و جمع شدن بر روی سطح بطور نوسانی تا رسیدن به حالت تعادل ادامه دارد. با معادل قرار دادن زاویه تماس دینامیکی با زوایای تماس پیشروی و پسروی 110° و 40° ، منحنی دیگری بدست می‌آید که برای مقایسه بهتر در شکل ۱۰ نشان داده شده است. زوایای پیشروی و پسروی طبق مرجع [۶] انتخاب گردیده‌اند. اگرچه منحنی بدست آمده با زوایای پیشروی و پسروی، نوسانات دو منحنی مربوط به زوایای تعادلی 74° و 90° را ندارد ولی دقت بالایی نداشته و بر داده‌های آزمایشگاهی خصوصاً در نقاط حداکثر و حداقل مقدار پخش قطره بر روی سطح، منطبق نمی‌باشد. در حل عددی توسعه یافته توسط تئوری جنبشی مولکولی، قطره پس از به حداکثر رسیدن پخش خود بر روی سطح، جمع شده و پس از به حداقل رسیدن (پخش بر روی سطح)، دوباره باز شده و سریعاً به حالت تعادل می‌رسد. دقت بالای حل عددی توسعه یافته، نشان‌دهنده برآورد خوب تئوری جنبشی مولکولی از تغییرات زاویه تماس دینامیکی در طول برخورد می‌باشد.

در شکل‌های ۱۱ الی ۱۶ تغییرات زاویه تماس دینامیکی با زمان برای برخورد قطره آب به قطر $1/4$ mm با سرعت‌های 0.77 m/s و 0.45 m/s، به سطوح رطوبت پذیر جزئی و رطوبت پذیر، به همراه آهنگ پخش قطره (ξ) نسبت به زمان نشان داده شده است. در این شکل‌ها نتایج استخراج شده از حل عددی توسعه یافته توسط تئوری جنبشی مولکولی با نتایج حاصل از آزمایش‌های مرجع [۴]، مقایسه گردیده است.

در شکل ۱۲ برخورد قطره آب به قطر اولیه $1/4$ mm و با سرعت 0.45 m/s به سطح رطوبت پذیر جزئی ($\theta_e=74^\circ$) نشان داده شده است. حل عددی توسعه داده شده توسط تئوری جنبشی مولکولی بر داده‌های تجربی انطباق دارد. منحنی حل عددی، با زاویه تعادلی ثابت و برابر 74° نیز در این شکل آورده شده است که نوسان آن نسبت به نتایج تجربی و حل عددی توسعه یافته مشهود می‌باشد. شکل ۱۴ تغییرات ξ نسبت به زمان را برای برخورد قطره به

است [۳]. در اعداد کم Ca ، برای سیالاتی که دارای خواص نزدیک به آب هستند، مقدار این انرژی در مقابل انرژی سطح قطره، قابل نظر می‌باشد. در این صورت با دوباره طی کردن مسیر بدست آوردن معادله (۲۶) در اعداد کم Ca ، معادله زیر بدست می‌آید:

$$\xi_{\max} = \frac{D_{\max}}{D_0} = \sqrt{\frac{1}{3(1-\cos\theta_e)/We + \frac{4}{\sqrt{Re}}}} \quad (27)$$

این معادله برای مطالعه تاثیر اعداد بدون بعد Re و We و همچنین زاویه تماس تعادلی، مناسب می‌باشد که رسم آن در شکل ۱۷ آمده است. طبق این شکل با افزایش زاویه تماس تعادلی و یا کاهش We ، مقدار حداکثر پخش قطره بر روی سطح کاهش یافته، و حداکثر پخش قطره، وابستگی کمتری به عدد Re پیدا می‌کند. در مقادیر زیاد We و یا مقادیر کم زاویه تماس تعادلی، مقدار حداکثر پخش قطره بر روی سطح افزایش یافته و وابستگی بیشتری به عدد Re دارد. همچنین در اعداد Re بزرگتر، مقدار حداکثر پخش قطره بر روی سطح زیادتر بوده و تغییرات آن در مقادیر We زیاد و یا زاویه تماس تعادلی کم، تاثیر زیادی بر روی مقدار حداکثر پخش قطره بر روی سطح می‌گذارد.

ج - تعیین مناطق پخش یا جدا شدن قطره از روی سطح به وسیله مدل عددی

منطقه‌ای که در آن قطره پس از برخورد، بر روی سطح باقی‌می‌ماند و یا جمع شده و از روی سطح جدا می‌گردد، توسط حل عددی مشخص گردیده است. اجرای حل عددی برای انواع سیالات و سطوح گوناگون، این دو منطقه را مجزا و مشخص کرده که در شکل ۱۸ آمده است. بنابراین با داشتن زاویه تماس تعادلی و مقدار حداکثر پخش قطره بر روی سطح، باقی‌ماندن قطره و یا جدا شدن آن از روی سطح توسط شکل ۱۸ مشخص می‌گردد. معادله خطی که دو منطقه پخش قطره و یا جدا شدن آن را از روی سطح مشخص می‌کند از شکل ۱۸ بدست می‌آید:

قطر $1/4\text{mm}$ و سرعت 0.77m/s نشان می‌دهد. این شکل را می‌توان با شکل ۱۰ مقایسه نمود زیرا در هر دو شکل، قطره دارای قطر اولیه و سرعت برخورد یکسانی بوده‌اند. این شکل نشان می‌دهد که منحنی حل عددی با زاویه تماس ثابت و معادل زاویه تماس تعادلی، اختلاف بیشتری نسبت به نتایج واقعی پیدا می‌کند. پس در واقع در سطوح رطوبت پذیر، حل عددی توسعه یافته توسط تئوری جنبشی مولکولی، تمایز بیشتری نسبت به حل عددی در زاویه تماس ثابت پیدا می‌کند و دلیل آن این است که در سطوح رطوبت پذیر انرژی سطح غلبه بیشتری داشته و بنابراین پیش‌یابی تغییرات زاویه تماس دینامیکی ارزش بیشتری دارد. همچنین این شکل و نتایج آن نشان می‌دهد که سطوح رطوبت پذیر به علت انرژی سطحی بالا سعی می‌کنند از نوسان پخش قطره بر روی سطح جلوگیری نمایند. شکل ۱۶ نیز تغییرات ξ نسبت به زمان را در برخورد قطره $1/4\text{mm}$ و سرعت 0.45m/s با سطح رطوبت پذیر نشان می‌دهد. همچنین با مقایسه شکل ۱۶ با ۱۴ مشاهده می‌شود که کم شدن سرعت برخورد قطره باعث کاهش حداکثر پخش قطره بر روی سطح گردیده و قطره زودتر به حالت تعادل خود می‌رسد. دلیل این امر کاهش انرژی جنبشی و غلبه بیشتر انرژی سطح می‌باشد. آزمایش‌های مرجع [۴] نشان می‌دهد که در سطوح غیر رطوبت پذیر به علت عدم وابستگی زاویه تماس به سرعت خط تماس، در حالت پیشروی و پیشروی قطره بر روی سطح، پسماند زاویه تماس صفر است. بنابراین در اینگونه سطوح نیازی به استفاده از تئوری جنبشی مولکولی نمی‌باشد.

ب - اعتبار مدل تحلیلی و ارزیابی تاثیر اعداد بدون بعد و زاویه تماس تعادلی

برای مقایسه رابطه تحلیلی (۲۶) با نتایج آزمایشات، از نتایج مرجع [۴] استفاده شده است. این مقایسه در جدول ۲ آمده است. رابطه (۲۶) برای محاسبات سریع مناسب می‌باشد.

برای بدست آوردن معادله (۲۳)، از انرژی جنبشی قطره قبل از برخورد با سطح، استفاده گردیده

$$\xi_{\max_{cr}} = \frac{5 \times 10^{23}}{\theta_e^{12}} + 1.45 \quad (28)$$

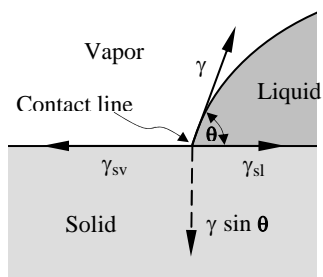
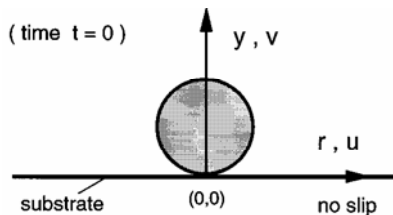
برای اولین بار در این مقاله است که مقدار $\xi_{\max_{cr}}$ تعریف گردیده و آن عبارت از مقداری است که حد باقی ماندن و یا جدا شدن قطره پس از برخورد با سطح را مشخص می‌کند. با توجه به شکل ۱۸ و رابطه (۲۸)، در زوایای تعادلی زیاد، مقدار $\xi_{\max_{cr}}$ کم شده بنابراین قطره تمایل بیشتری به جدا شدن از روی سطح دارد. در صورتی که مقدار حداکثر پخش قطره از $\xi_{\max_{cr}}$ زیادتر گردد، به علت پخش شدن بیشتر قطره بر روی سطح، مقدار انرژی سطحی آن زیادتر بوده بنابراین در حالت جمع شدن قطره، باعث جدا شدن آن از روی سطح می‌گردد. به عبارتی قطره سطح را خیس نمی‌کند.

با توجه به شکل ۱۸، برای زوایای تماس تعادلی کمتر از 80° ، قطره پس از برخورد، بر روی سطح باقی مانده و از روی آن جدا نمی‌شود. در زوایای تماس تعادلی بیش از 80° احتمال جدا شدن قطره از روی سطح وجود داشته که بستگی به Re و We آن قبل از برخورد با سطح دارد. با داشتن مقادیر Re و We و زاویه تماس تعادلی (θ_e) ، مقدار ξ_{\max} از شکل ۱۷ تعیین شده و سپس از شکل ۱۸ مشخص می‌گردد که قطره پس از برخورد با سطح، بر روی آن باقی مانده و یا از روی آن بلند شده و جدا می‌گردد. برای زوایای تماس تعادلی بیش از 150° مقدار ξ_{\max} به سمت عدد ثابت یک، میل می‌کند.

نتیجه گیری

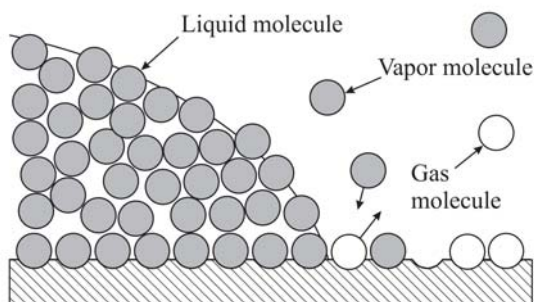
در این مقاله، تاثیر زاویه تماس در رفتار دینامیکی قطره به هنگام برخورد با سطح، به وسیله اصلاح مدل عددی توسط تئوری جنبشی مولکولی، مطالعه و بررسی شده است. در این مدل، معادلات پیوستگی و ممنتم سیال به کمک معادله سطح آزاد مایع-گاز، برای ردیابی حجمی سیال، به روش حجم محدود، گسسته سازی و در هر گام زمانی حل می‌شوند. تنش سطحی به عنوان یک نیروی حجمی در نظر گرفته شده و شکل جدید سطح آزاد مایع-گاز به کمک الگوریتم Youngs تخمین زده می‌شوند. زاویه

تماس دینامیکی به عنوان شرط مرزی بسیار مهم به وسیله سرعت خط تماس و از روابط تئوری جنبشی مولکولی تعیین، و در حل عددی به وسیله تصحیح بردارهای واحد گره‌های سلول حاوی خط تماس، اعمال می‌گردد. مقایسه نتایج مدل با حل عددی که در آن از زاویه تماس تعادلی یا زوایای پیشروی و پسروی استفاده گردیده، نشان می‌دهد که مدل، پیش یابی دقیقتری از رفتار دینامیکی برخورد قطره با سطح داشته و تطابق خوبی با جدیدترین نتایج آزمایشگاهی دارد. با توجه به نتایج به دست آمده مقدار حداکثر پخش بحرانی تعریف شده که حد بین پخش شدن و یا جدا شدن قطره از روی سطح می‌باشد. در ادامه، مدلی تحلیلی برای تعیین میزان حداکثر پخش قطره بر روی سطح ارائه گردیده که براساس مقدار زاویه تماس تعادلی و اعداد بدون بعد We و Re می‌باشد. با داشتن زاویه تماس تعادلی که در اکثر منابع موجود می‌باشد، و دو عدد Re و We ، مقدار حداکثر پخش قطره بر روی سطح سریعاً تخمین زده می‌شود. مقایسه مقدار به دست آمده با مقدار حداکثر پخش بحرانی، باقی ماندن قطره بر روی سطح یا جدا شدن آنرا از روی سطح مشخص می‌کند. نتایج حاصل از مدل تحلیلی در اعداد Ca کم، نشان می‌دهد که در عدد Re ثابت، با افزایش زاویه تماس تعادلی و یا کاهش عدد We مقدار حداکثر پخش قطره بر روی سطح کاهش یافته و وابستگی آن به عدد Re کم می‌گردد. با کاهش زاویه تماس تعادلی و یا افزایش عدد We مقدار حداکثر پخش افزایش یافته و وابستگی آن به عدد Re زیاد می‌شود.



شکل ۲- طرح کلی از برخورد قطره با سطح.

شکل ۱- زاویه تماس تعادلی (θ_c) و خط تماس. γ ، γ_{sv} و γ_{sl} به ترتیب کشش سطحی مایع-گاز، جامد-گاز و جامد-مایع می‌باشند.

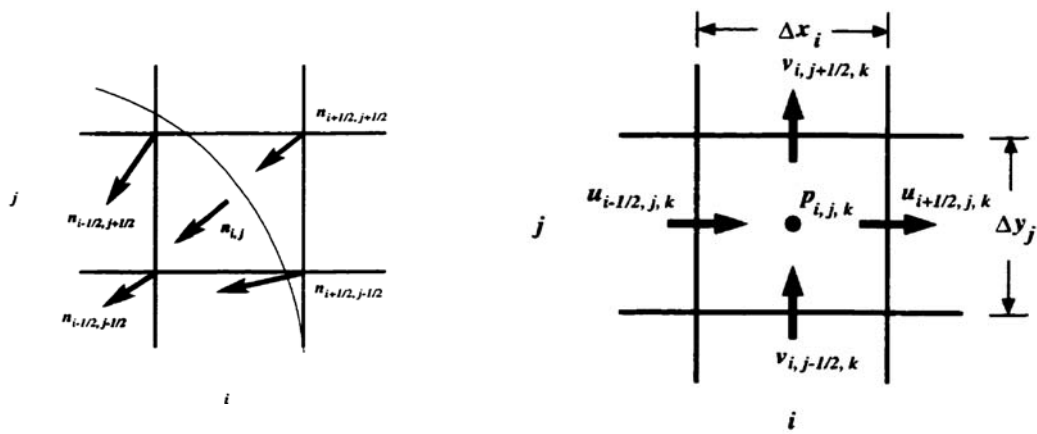


شکل ۳- توضیح مدل تئوری جنبشی مولکولی.

جدول ۱- پارامترهای تئوری جنبشی مولکولی ارائه شده توسط مرجع [۴]، برای تماس قطرات آب با سطوح رطوبت پذیر و رطوبت پذیر

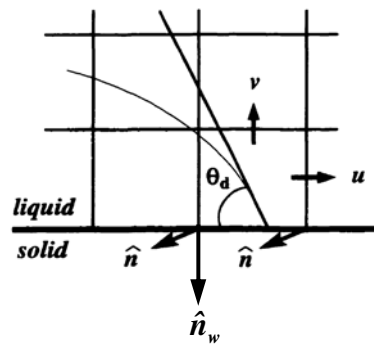
۴۰۸

ΔG_w (kJ mol ⁻¹)	θ_c (deg.)	λ (nm)	k_s (s ⁻¹)	k_w (s ⁻¹)	سطح
۱۸	۲۰	۲/۹	$۱/۳ \times ۱۰^۶$	$۲/۷ \times ۱۰^۶$	رطوبت پذیر
۲۳/۲	۷۳	۱	۲۷×۱۰^۶	$۲/۱ \times ۱۰^۶$	رطوبت پذیر جزئی

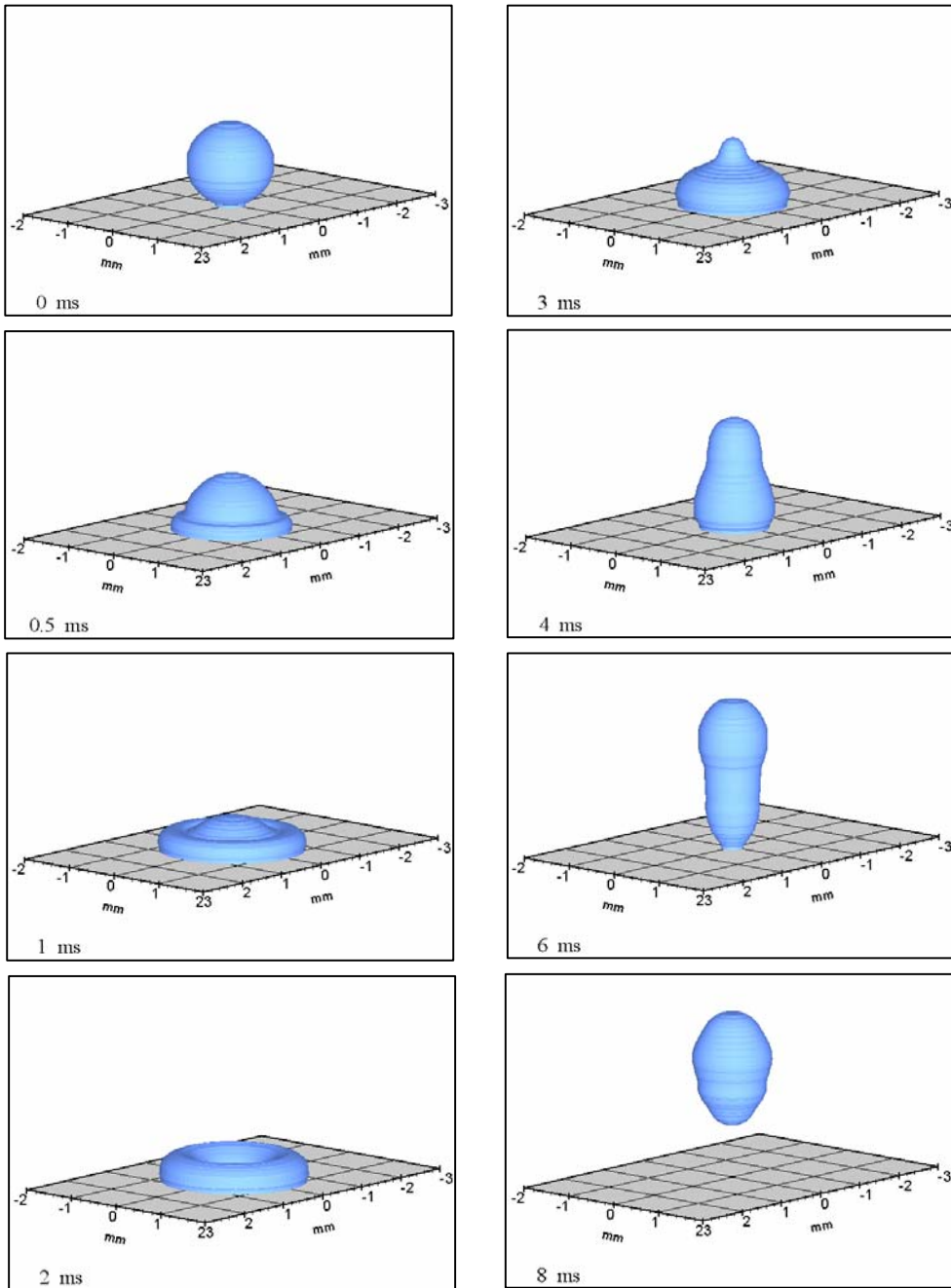


شکل ۴- نمای دوبعدی از سلول (i,j,k) . سرعت‌های u و v و w (سرعت عمود بر صفحه است) در وسط وجوه هر سلول می‌باشند. فشار P در مرکز سلول در نظر گرفته می‌شود.

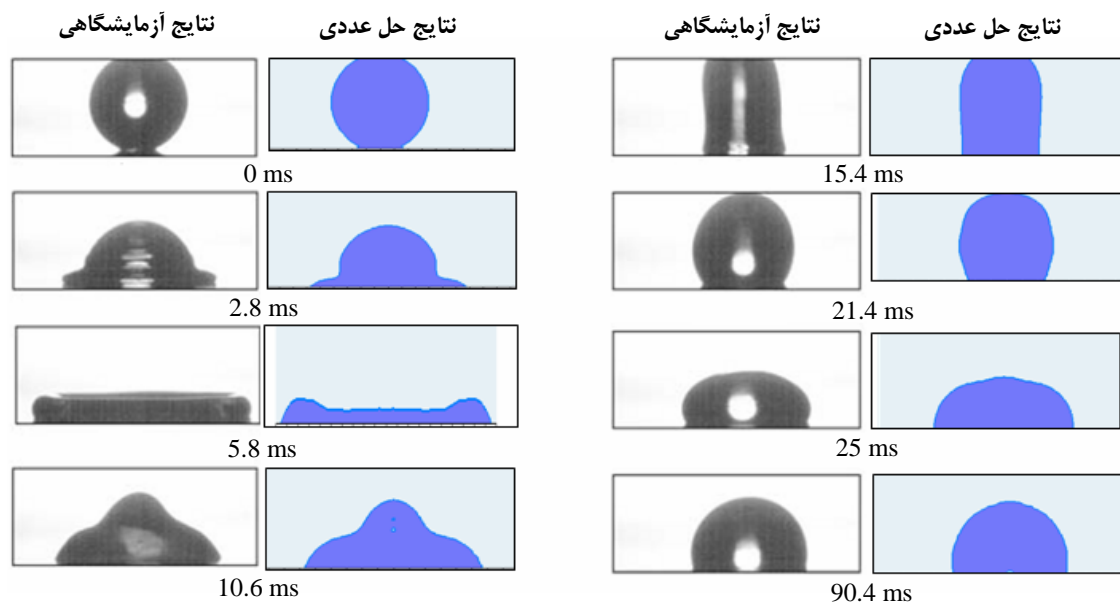
شکل ۵- بردارهای عمود در رئوس و مرکز سلول.



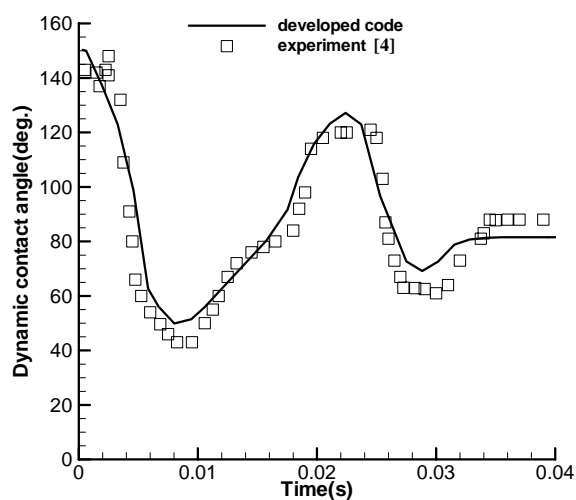
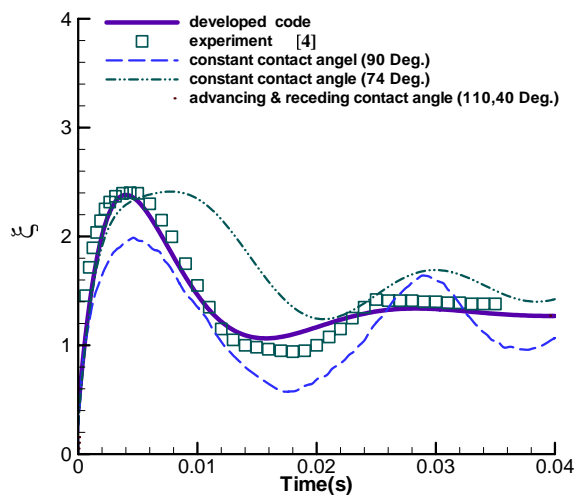
شکل ۶- روش اعمال زاویه تماس دینامیکی در حل عددی.



شکل ۷- تصاویر بدست آمده از حل عددی برای برخورد عمودی قطره آب به قطر $1/4$ mm و سرعت 1 m/s، به سطح صاف رطوبت ناپذیر ($\theta_e = 135^\circ$).

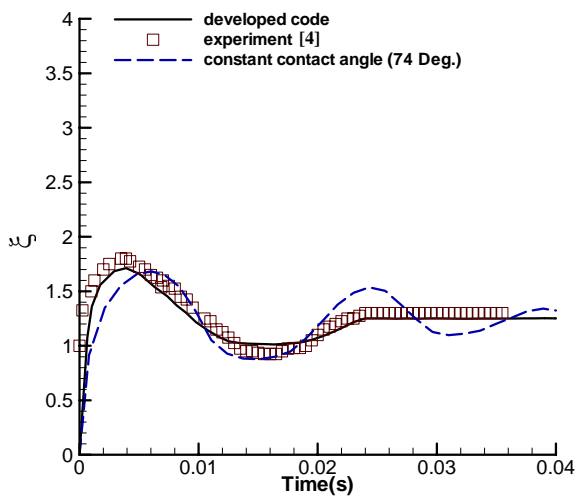


شکل ۸- مقایسه تصاویر نتایج آزمایشگاهی [۴] با تصاویر بدست آمده از حل عددی برای برخورد قطره آب به قطر $1/4\text{mm}$ و با سرعت 0.77m/s به سطح رطوبت پذیر جزئی ($We=10$). در تصاویر نتایج آزمایشگاهی، انعکاس تصویر قطره بر روی سطح پرداخت شده مشاهده می‌گردد.

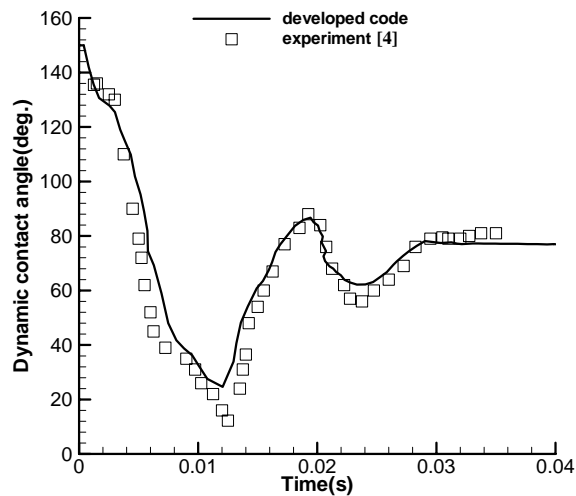


شکل ۹- آهنگ پخش قطره ($\xi=D/D_0$)، نسبت به زمان. قطر اولیه قطره $1/4\text{mm}$ و سرعت برخورد 0.77m/s و سطح دارای خاصیت رطوبت پذیری جزئی می‌باشد. (آزمایش از مرجع [۴])

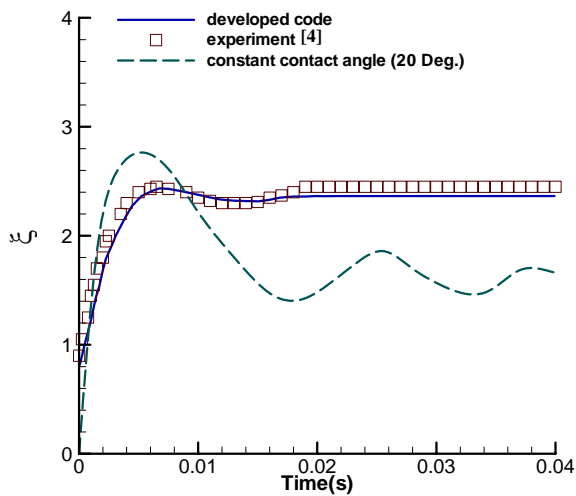
شکل ۹- آهنگ تغییر زاویه تماس دینامیکی نسبت به زمان. قطر اولیه قطره $1/4\text{mm}$ و سرعت برخورد 0.77m/s و سطح دارای خاصیت رطوبت پذیری جزئی می‌باشد.



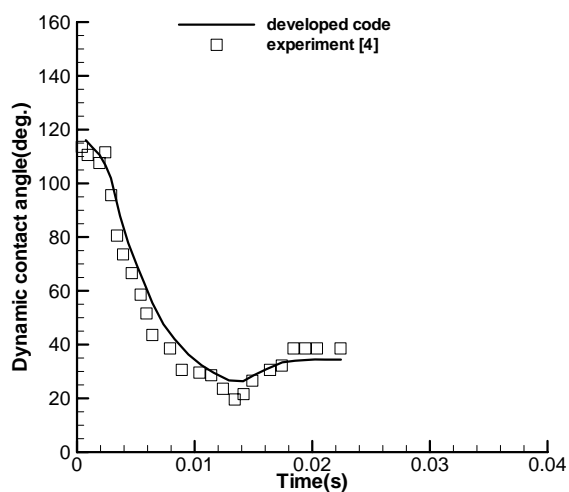
شکل ۱۲- آهنگ پخش قطره (ξ)، نسبت به زمان. قطر اولیه قطره ۱/۴mm و سرعت برخورد ۰/۴۵m/s و سطح دارای خاصیت رطوبت پذیری جزئی می‌باشد.



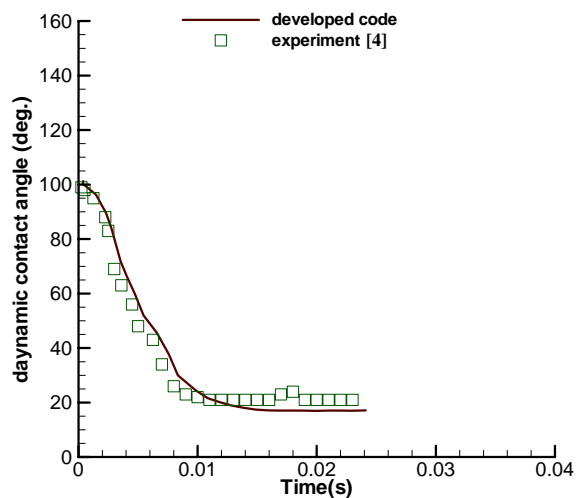
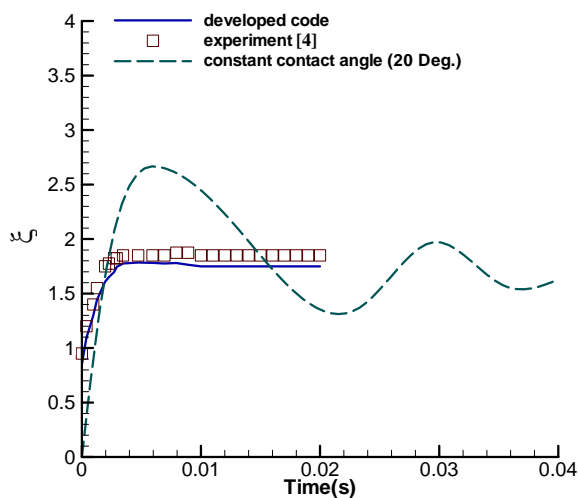
شکل ۱۱- آهنگ تغییر زاویه تماس دینامیکی نسبت به زمان. قطر اولیه قطره ۱/۴mm و سرعت برخورد ۰/۴۵m/s و سطح دارای خاصیت رطوبت پذیری جزئی می‌باشد.



شکل ۱۴- آهنگ پخش قطره (ξ) نسبت به زمان. قطر اولیه قطره ۱/۴mm و سرعت برخورد ۰/۷۷m/s و سطح دارای خاصیت رطوبت پذیری می‌باشد.



شکل ۱۳- آهنگ تغییر زاویه تماس دینامیکی نسبت به زمان. قطر اولیه قطره ۱/۴mm و سرعت برخورد ۰/۷۷m/s و سطح دارای خاصیت رطوبت پذیری می‌باشد.

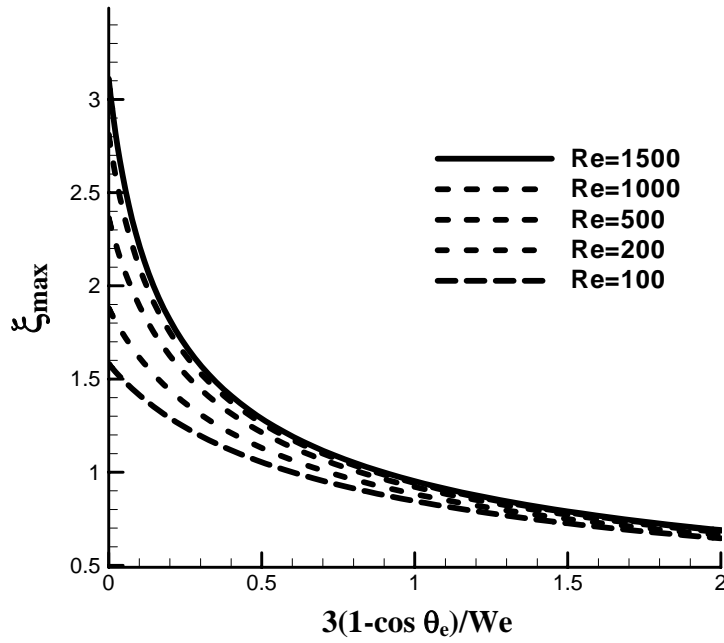


شکل ۱۶- آهنگ پخش قطره (ξ) نسبت به زمان. قطر اولیه قطره ۱/۴mm و سرعت برخورد ۰/۴۵m/s و سطح دارای خاصیت رطوبت پذیری می‌باشد.

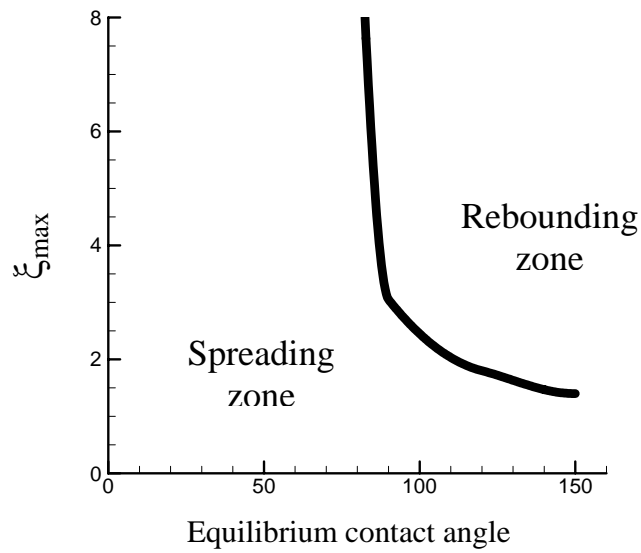
شکل ۱۵- آهنگ تغییر زاویه تماس دینامیکی نسبت به زمان. قطر اولیه قطره ۱/۴mm و سرعت برخورد ۰/۴۵m/s و سطح دارای خاصیت رطوبت پذیری می‌باشد.

جدول ۲- مقایسه مقدار ξ_{max} بدست آمده از معادله ۲۶ با نتایج آزمایشگاهی مرجع [۴].

سطح رطوبت پذیر		سطح رطوبت پذیر جزئی		سطح رطوبت ناپذیر		
۱/۴	۱/۴	۱/۴	۱/۴	۱/۴	۱/۴	D_0 (mm)
۰/۴۵	۰/۷۷	۰/۴۵	۰/۷۷	۰/۴۵	۰/۷۷	V_0 (m/s)
۳/۹۳	۱۱/۵۳	۳/۹۳	۱۱/۵۳	۳/۹۳	۱۱/۵۳	We
۶۳۰	۱۰۷۸	۶۳۰	۱۰۷۸	۶۳۰	۱۰۷۸	Re
۱/۸	۲/۴	۱/۷	۲/۳	۱/۶۵	۲/۲۵	ξ_{max} (نتایج آزمایشگاهی)
۲/۶۶	۲/۳۷	۲/۰۰	۲/۰۲	۱/۵۷	۱/۷	ξ_{max} (معادله ۲۶)



شکل ۱۷- تاثیر اعداد بدون بعد Re ، We و زاویه تماس تعادلی در حداکثر پخش قطره بر روی سطح.



شکل ۱۸- مناطق پخش شدن و یا برگشت و جدا شدن قطره از روی سطح.

مراجع:

- 1- Pasandideh-Fard, M., Chandra, S., Mostaghimi, J. (2002). "A three-dimensional model of droplet impact and solidification." *Int. J. Heat Mass Trans.*, 45, PP.2229–2242.
 - 2- Pasandideh-Fard, M., Pershin, V., Chandra, S., Mostaghimi, J., (2002). "Splat shapes in a thermal spray coating process: simulations and experiments." *J. Thermal Spray Technol.*, 11, PP-206-217(12)
 - 3- Pasandideh-Fard, M., Qiao, Y.M., Chandra, S. and Mostaghimi, J., (1996). "Capillary effects during droplet impact on a solid surface." *Phys. Fluids.*, 8, 3, PP.650-659
 - 4- Bayer, I., and Megaridis, C. M., (2006). "Contact angle dynamics in droplets impacting on flat surfaces with different wetting characteristics." Cambridge University Press, *J.Fluid Mech.*, vol. 558, PP. 415–449.
 - 5- Pasandideh-Fard, M. Bholra, R., Chandra, S., and Mostaghimi, J., (1998). "Deposition of tin droplets on a steel plate: simulations and experiments." *Int. J. Heat Mass Trans.*, 41, PP-2929-2945
 - 6- M. Bussman, J. Mostaghimi, S. Chandra, "On a three-dimensional volume tracking model of droplet impact," *Phys. Fluids*, 11 (6), 1406-1417, (1999)
 - 7- Harlow, F.H, Shannon, J.P., (1967), "The splash of a liquid droplet." *J. Appl. Phys.* 38, PP-3855.
 - 8- Tsurutani, K., Yao, M., Senda, J., Fujimoto, H., (1990), "Numerical analysis of the deformation process of a droplet impinging upon a wall." *JSME Int. Ser. II* 33,PP- 555.
 - 9- Fukai, J., Shiiba, Y., Yamamoto, T., Miyatake, O., Poulikakos, D., Megaridis, C.M., Zhao, Z., (1995), "Wetting effects on the spreading of a liquid droplet colliding with a flat surface: experiment and modeling." *Phys. Fluids*, 7,PP- 236–247.
 - 10- Madejski, J., (1976), "Solidification of droplets on a cold surface." *Int. J. Heat Mass Transfer*, 19, PP-1009-1013.
 - 11- Bennett, T., and Poulikakos, D., (1993), "Splat-quench solidification: Estimating the maximum spreading of a droplet impacting a solid surface." *J. Mat. Sci.* 28, PP-963.
 - 12- Roisman, I.V., Rioboo, R., Tropea, C., (2002), "Normal impact of a liquid drop on a dry surface: model for spreading and receding." *Proc. R. Soc.London, Ser. A*, 458, PP-1411-1430.
- ۱۳- اسدی، س.، پسندیده فرد، م.، مقیمان، م.، " مطالعه برخورد مایل قطره با سطح جامد در فرآیند لایه نشانی پاششی با استفاده از شبیه سازی عددی و مدل تحلیلی." نشریه علمی و پژوهشی علوم و مهندسی سطح ایران، شماره ۴ (۱۳۸۶).
- 14- Mostaghimi, J., Pasandideh-Fard, M., and Chandra, S., (2002). "Dynamics of Splat formation in plasma spray." *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, Vol. 22, No. 1
 - 15- Brackbill, J.U., Kothe, D.B., and Zemach, C., (1992), "A continuum method for modeling surface tension." *J. Comput. Phys.*, 100, PP-335.
 - 16-Blake, T. D., and Haynes, J. M., (1969), "Kinetics of liquid/liquid displacements." *J. Colloid Interface Sci.* 30, PP-421–423.
 - 17- Youngs, D. L., (1984), "An interface tracking method for a 3D Eulerian hydrodynamics code." Technical Report 44/92/35, AWRE.
 - 18- Peskin, C. S., (1977) "Numerical analysis of blood flow in the heart." *J. Comput. Phys.* 25,PP-220.