



Люшнин Андрей Витальевич

Динамика ультратонкого слоя жидкости

Специальность: 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Пермь 2019

Работа выполнена в ФГБОУ ВО «Пермский государственный гуманитарно-педагогический университет».

Официальные оппоненты:

Дёмин Виталий Анатольевич, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Пермский государственный национальный исследовательский университет», заведующий кафедрой теоретической физики, г. Пермь.

Кабов Олег Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, ФАНО России Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, заведующий лабораторией интенсификации процессов теплообмена, г. Новосибирск.

Калинин Василий Валерьянович, доктор физико-математических наук, профессор, ФГАОУ ВО «Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина», заведующий кафедрой высшей математики, г. Москва.

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кубанский государственный университет», г. Краснодар.

Защита диссертации состоится 20 ноября 2019 года в 09.30 на заседании диссертационного совета Д 003.053.01 при ИТ СО РАН, расположенном по адресу: 630090, г. Новосибирск, ул. Академика Лаврентьева, д. 1. С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИТ СО РАН <http://www.itp.nsc.ru>.

Отзыв на автореферат, заверенный печатью учреждения, в двух экземплярах, просьба отправить на имя ученого секретаря диссертационного совета Д 003.053.01 по адресу: 6300090 г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева 1. (факс: (383)330-84-80, e-mail: dissovet@itp.nsc.ru)

Автореферат разослан 19 августа 2019 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета,
д.ф.-м.н., профессор

Кузнецов Владимир Васильевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. На протяжении нескольких десятилетий, с развитием нанотехнологий, особый интерес представляет исследование поведения поверхности раздела двух сред, а также изучение межмолекулярных и поверхностных сил. Свободная энергия слоя жидкости складывается из суммы его объемной и поверхностных энергий. При уменьшении толщины слоя жидкости его объемная энергия уменьшается, а поверхностные межмолекулярные взаимодействия становятся основным фактором, который определяет движения слоя жидкости. Задача динамики движения и вопросы структурообразования поверхности тонкого слоя испаряющейся пленки жидкости на твердой горизонтальной подложке имеют большое практическое применение, а результаты используются во многих технологических процессах, как, например, при создании устойчивых наноструктур, в медицинской диагностике и при модификации структур ДНК. Макроскопические ультратонкие пленки, порядка 10–100 нанометров, играют важную роль в таких областях научного знания, как физика, биофизика, химия, а также находят свое применение в различных технологических приложениях. Одной из особенностей ультратонких слоёв жидкостей является то, что при толщине порядка сотен ангстрем имеется два устойчивых значения толщины слоя. Экспериментально показано, что в процессе испарения толщина пленки, имевшая изначально одно из устойчивых значений, будет уменьшаться и при некотором значении толщины слоя свободная межфазная граница будет испытывать разрыв. В результате которого образуются два значения толщины слоя и испаряющийся фронт между ними.

На данный момент в научной печати имеется лишь немногочисленная информация об особенности поведения ультратонких пленок с учетом наличия двойных электрических слоев на межфазных границах. Нет подробного описания одновременного влияния межмолекулярных и электрических сил на движение в тонком приповерхностном слое у границы раздела «жидкость– газ» в жидкостях. Таким образом, выбранная тематика диссертационного исследования является актуальной и практически значимой.

Цель работы. Диссертация посвящена теоретическому исследованию динамики движения и структурообразования поверхности ультратонкого слоя жидкости при воздействии различных поверхностных эффектов и внешних сил. Для достижения цели были поставлены следующие основные задачи:

1. Изучение поведения ультратонкого слоя жидкости, расположенного на твердой подложке и имеющего свободную границу «жидкость – пар» при наличии испарения. Сравнение полученных теоретических и численных результатов с экспериментальными данными.
2. Проведение исследования эволюционного уравнения, описывающего влияния эффекта Марангони на динамику движения свободной поверхности «жидкость – пар» ультратонкого слоя испаряющейся жидкости.
3. Исследование устойчивости ультратонкого слоя жидкости, при наличии термокапиллярного эффекта, относительно продольных и поперечных возмущений на межфазной границе «жидкость – пар». Определение диапазонов параметров, для которых имеет место пальцеобразная неустойчивость.
4. Рассмотрение задачи о взаимодействии термокапиллярного и инжекционного механизмов неустойчивости для двухслойной системы «жидкость – воздух», находящейся в электрическом поле.
5. Исследование системы эволюционных уравнений в рамках длинноволнового приближения для толщины слоя и объемной концентрации для испаряющегося ультратонкого слоя жидкости при наличии растворимого сурфактанта. Изучение различных типов неустойчивости данной системы.
6. Анализ устойчивости тонкого слоя испаряющейся жидкости в присутствии сурфактанта на обеих межфазных границах. Изучение механизмов взаимодействия различных видов неустойчивости.

Научная новизна. В диссертации проведено теоретическое исследование динамики движения ультратонкого слоя жидкости. Особенность ультратонкого слоя жидкости состоит в том, что энергия межмолекулярного взаимодействия слоя жидкости является немонотонной функцией от его толщины. Она складывается из суммы вандер-ваальсовой (дисперсионной) энергии притяжения и электрической энергии отталкивания. Энергия электрического отталкивания двух одинаковых частиц изменяются по экспоненциальному закону, а энергия дисперсионного взаимодействия – по степенному. Таким образом, на суммарной кривой энергии межмолекулярного взаимодействия, в некотором диапазоне, имеется потенциальный барьер.

Впервые получены формы движения фронта испаряющегося ультратонкого слоя жидкости. Определена линейная связь между безразмерным параметром испарения и скоростью распространения фронта жидкости. Проведено исследование устойчивости фронта

относительно поперечных возмущений. Впервые было обнаружено, что при больших значениях безразмерного параметра испарения фронт движения испаряющейся жидкости устойчив к возмущениям, тогда как при малых значениях безразмерного параметра испарения имеет место область неустойчивости для малых значений волнового числа. В пределе длинноволновых возмущений впервые получено уравнение для декремента возмущений во втором порядке малости. Впервые проведено численное исследование уравнения эволюции в трехмерном виде и для малых значений безразмерного числа испарения обнаружен «палецобразный» тип неустойчивости. В ходе сравнения численного эксперимента с экспериментальными данными обнаруживается качественное сходство результатов.

В длинноволновом приближении исследовано влияние зависимости коэффициента поверхностного натяжения от температуры на устойчивость движения ультратонкого слоя испаряющейся пленки при подогреве со стороны твердой подложки. Обнаружено, что термокапиллярный эффект приводит к изменению движения фронта испаряющейся жидкости по сравнению с задачей, где эффект Марангони отсутствует. Впервые было найдено, что в диапазоне малых значений безразмерного параметра испарения, где имеет место неустойчивость относительно поперечных возмущений, эффект Марангони приводит к увеличению области неустойчивости. Также стоит отметить, что впервые было показано, что при увеличении безразмерного числа Марангони происходит повышение устойчивости системы относительно длинноволновой моды. При дальнейшем росте безразмерного числа испарения, когда движение фронта жидкости устойчиво по отношению к любым модам возмущений, наличие эффекта Марангони влечет за собой уменьшение устойчивости.

Автором впервые была математически выведена система эволюционных уравнений относительно толщины слоя и сурфактанта для описания динамики поведения ультратонкого слоя жидкости, расположенной на твердой подложке, в рамках длинноволнового приближения. На свободной границе раздела двух сред «жидкость – пар» в начальный момент времени располагается растворимый сурфактант. Задается величина и характер растворения сурфактанта с межфазной границы «жидкость – пар» в объем жидкости. Исследована устойчивость движения фронта испаряющегося ультратонкого слоя жидкости при наличии сурфактанта на свободной поверхности для особенного, «замороженного» стационарного состояния. Для такого состояния впервые обнаружены две независимые моды возмущения, одна из которых определяет поведение концентрационных возмущений, а вторая показывает эволюцию

возмущений в процессе движения жидкости при испарении. Найдены диапазоны параметров, при которых первоначально устойчивое состояние тонкого слоя жидкости переходит в неустойчивое. Впервые обнаружено, что голдстоуновская мода неустойчивости относительно испарения всегда устойчива по отношению к возмущениям. Численные расчеты качественно подтверждают результаты линейной теории. Новизна полученного результата заключается в том, что тип структурообразования на поверхности испаряющейся пленки при наличии сурфактанта имеет существенные отличия от испаряющейся пленки в отсутствие сурфактанта.

Исследована устойчивость движения фронта испаряющегося ультратонкого слоя жидкости при наличии сурфактанта на обеих межфазных поверхностях. Автором впервые обнаружены для стационарного состояния три независимые моды возмущения. Две из этих мод определяют поведение концентрационных возмущений на границах раздела, а третья показывает эволюцию возмущений в процессе движения жидкости при испарении. Для рассматриваемой нами «сэндвич»-структуры впервые обнаружен колебательный режим.

В рамках линейной теории устойчивости изучается двухслойная система «жидкий диэлектрик – воздух», заключенная между обкладками плоского конденсатора. Инжекция заряда происходит в жидкость через свободную деформируемую поверхность неизотермической жидкости, коэффициент поверхностного натяжения которой линейно зависит от температуры. Впервые было найдено, что взаимодействие инжекционного и капиллярного механизмов приводит к дестабилизации относительно монотонных возмущений при подогреве со стороны твердой границы. При подогреве со стороны свободной поверхности наблюдается повышение устойчивости системы. Для инжекционного механизма электроконвективной неустойчивости найдены две нижние моды. Впервые обнаружены параметры системы, при которых имеется колебательная мода неустойчивости, найдена зависимость частоты колебаний от волнового числа.

Личный вклад автора. Личное участие автора в получении результатов, изложенных в диссертации, заключается в постановке задачи, создании математических моделей, создании программных средств для решения задач, проведении вычислений, анализе полученных данных. В работе [1] автору принадлежит вывод системы ЭГД-уравнений в данной постановке, им выполнены вычисления и анализ полученных результатов. В работе [2] автору принадлежат вывод эволюционного уравнения в безразмерном виде, все расчеты, вывод уравнения для поперечных возмущений относительно движения фронта ультратонкого слоя жидкости,

вывод уравнения и анализ эволюции для второй поправки малости для декремента поперечных возмущений. Также автору принадлежат все трехмерные вычисления. В серии работ [3–5] вклад автора состоит в численном моделировании и анализе полученных результатов, а также в их сравнении с экспериментальными данными. Вкладом автора в работы [6–8,10] является постановка задачи, анализ полученных результатов, а также трехмерные вычисления. Наконец, в работах[9,11-13] автору принадлежат постановка задачи и анализ полученных результатов.

Теоретическая и практическая значимость результатов.

Результаты, полученные в данной работе, могут быть использованы для создания новых физико-химических обоснованных моделей, а также для тестирования и модификации уже существующих моделей. Использованные в диссертации модели могут быть использованы в расчетных кодах новых задач, предсказывающих поведение ультратонких слоев жидкости в области нанотехнологий, биохимических структур и полимерных пленок. Полученные результаты могут быть использованы для верификации и дальнейшего развития численных методов, описывающих динамику испаряющегося ультратонкого слоя жидкости, анализа поведения физико-химических моделей и практических рекомендаций, предсказывающих процесс сутруктурообразования на свободной поверхности пленки. Результаты данной работы могут быть использованы для тестирования и модификации моделей, описывающие другие практические приложения, такие, как системы струйной печати принтеров, покраски поверхностей, противокоррозийной защиты.

Методология и методы диссертационного исследования. При решении поставленных задач были использованы различные методики из теории возмущений. В главах 2, 3, 5 был использован метод длинноволновых возмущений, а в главе 4 применялся метод линейной теории устойчивости относительно равновесного состояния. Кроме этого, при получении значения второго члена в разложении для декремента возмущений в главе 2 была использована теория Фредгольма для дифференциальных уравнений, являющаяся разделом теории дифференциальных уравнений. При численном моделировании были использованы метод конечных разностей и численные алгоритмы для решения обыкновенных дифференциальных уравнений.

Достоверность результатов. Достоверность полученных результатов обеспечивается физически обоснованной постановкой задачи, правоммерностью принятых допущений при разработке математических моделей, оценками применимости используемых методов численного решения систем уравнений модели для различных задач и степени адекватности результатов. Также достоверность результатов

подтверждается соответствием результатов численных экспериментов с экспериментальными данными и результатами, полученными другими авторами.

Основные результаты, выносимые на защиту

1. Результаты расчетов по профилю фронта движения испаряющейся тонкой пленки при различных значениях безразмерного параметра испарения.
2. Проведение анализа устойчивости уравнения эволюции для возмущений, направленных перпендикулярно по отношению движения фронта пленки жидкости.
3. Результаты расчетов трехмерной задачи по изучению проведения движения тонкой пленки испаряющейся жидкости.
4. Результаты расчетов эволюции движения фронта пленки жидкости при наличии эффекта Марангони на свободной межфазной границе «жидкость – пар» и анализ устойчивости движения испаряющегося слоя ультратонкой пленки в присутствии термокапиллярного эффекта.
5. Результаты задачи конвективной неустойчивости слабопроводящей неизотермической жидкости при инъекции свободного заряда в жидкость через межфазную границу «жидкость – воздух» и наличии на этой границе термокапиллярного эффекта.
6. Вывод эволюционного уравнения толщины слоя испаряющейся жидкости при наличии на поверхности растворимого сурфактанта. Обсуждается различие процессов структурообразования на свободной поверхности при наличии и отсутствии сурфактанта.
7. Результаты расчетов по профилю фронта движения испаряющейся тонкой пленки при различных значениях безразмерного параметра концентрационного числа Марангони.
8. Результаты задачи устойчивости тонкой испаряющейся пленки при наличии на обеих границах сурфактанта.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 20 статей, 13 из которых входят в перечень ведущих рецензируемых научных журналов, рекомендованных ВАК.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на Международной зимней школе по механике сплошных сред (Пермь, 1998–2012), III Международной конференции «Современные проблемы электрогидродинамики и электрофизики жидких диэлектриков», (С.-Петербург, 1994), International workshop «Non-gravitational mechanism of convection and heat/mass transfer» (Zvenigorod, 1994), XII International Conference on Conduction and Breakdown in Dielectric Liquid (Roma, 1996), XIII International Conference of Dielectric Liquid, Japan, Nara, 1999, 3-й Всероссийской научно-практической конференции

ИММОД-2007 (С. -Петербург, 2007), 6th Conference of the International Marangoni Assosiation (Haifa, 2012), International Conference «Fluxes and structures in fluids», (S.-Peterburg, 2013), 8th International Topical Team Workshop on Two-Phase Systems for Ground and Space Applications (Bremen, 2013), XXII Международной конференции «Нелинейные задачи теории гидродинамической устойчивости и турбулентность» («Не-За-Те-Ги-Ус») (Звенигород, 2016), 8th Conference of the International Marangoni Assosiation (Bonn, 2016), 8th International Conference on Technological Advances on Thin Film and Coating Technologies (Singapour, 2016), 6-й Всероссийской конференции с международным участием «Задачи со свободными границами: теория, эксперимент и приложения» (Барнаул, 2017). Кроме этого, результаты работ по теме диссертации докладывались и обсуждались на Пермском гидродинамическом семинаре им. Г. З. Гершуни и Е. М. Жуховицкого.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, обзора литературы, четырех глав с изложением результатов, заключения и списка цитированной литературы, включающего 374 наименования. Общий объем работы – 296 страниц, включая 70 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность исследования, определены цели и задачи исследования, показана научная и практическая значимость работы.

Первая глава диссертационной работы посвящена обзору современного состояния исследований проблемы тонких и ультратонких жидких пленок. Рассмотрены как экспериментальные, так и теоретические работы отечественных и зарубежных авторов. Сделан вывод о том, что и экспериментально, и теоретически разными авторами были исследованы движение, испарение и другие процессы в тонких жидких пленках, но крайне мало работ учитывают электрохимическое взаимодействие в ультратонких пленках, а также термокапиллярные и концентрационно-капиллярные эффекты на границе раздела «жидкость– газ».

Во второй главе диссертационной работы была исследована задача численного моделирования динамики испарения ультратонкой пленки жидкости, лежащей на твердой подложке и ограниченной сверху свободной деформируемой границей «жидкость– газ».

Под ультратонким слоем понимается слой жидкости толщиной порядка 10–1000Å, при такой толщине слоя происходит межфазное взаимодействие двух поверхностей «твердое тело– жидкость» и «жидкость– газ». В таких слоях становятся существенными силы межмолекулярного взаимодействия (силы Ван-дер-Ваальса). Кроме того,

в таких жидкостях наряду с длиннодействующими молекулярными присутствуют и короткодействующие электрические силы, которые возникают благодаря взаимодействию двойных электрических слоев данных поверхностей. При испарении ультратонкого слоя воды экспериментально установлено, что при некотором значении толщины первоначально плоская поверхность спонтанно разделяется на участки с двумя разными устойчивыми толщинами. Эволюционное уравнение, в рамках длинноволнового приближения, для данной системы имеет следующий вид [Samid-Merzel, Phys. Rev. E, 1998]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{h^3}{3\eta} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{d\Phi(h)}{dh} - \sigma \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) \right] - \frac{\kappa}{\rho} \left[\frac{d\Phi(h)}{dh} - \sigma \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - \rho \mu_{vap} \right] \quad (1)$$

Здесь η есть динамическая вязкость жидкости, σ есть коэффициент поверхностного натяжения свободной границы «жидкость– пар», буквой ρ обозначается плотность жидкости, μ_{vap} есть химический потенциал пара, и, наконец, κ обозначен параметр, характеризующий уровень испарения (он может быть получен из эксперимента или найден из кинетической теории газов). Для ультратонкого слоя жидкостей энергия межмолекулярного взаимодействия имеет вид [Sharma, J.Coll.Int. Sci., 1993]:

$$\Phi(h) = \frac{S^{LW} d_0^2}{h^2} + S^P \exp \left[\frac{d_0 - h}{l_0} \right] \quad (2)$$

Здесь $S^{LW} d_0^2 = -A/12\pi$ и A – константа Гамакера, d_0 обозначает молекулярный диаметр, а l_0 является характерной длиной взаимодействия. Значения параметров S^{LW} и S^P определяются как ван-дер-ваальсовая и полярная компонента коэффициента растекания $S^{FULL} = S^{LW} + S^P$. В безразмерной форме уравнение (1) с использованием (2) принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[h^3 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{h^3} \exp(-\chi h) - \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) \right] - \\ - \Omega \left[\frac{1}{h^3} \exp(-\chi h) - \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - S \right] \end{aligned} \quad (3)$$

В этом уравнении присутствуют три безразмерных параметра:

$$\Omega = \frac{18\pi\kappa\eta\sigma}{\rho(6\pi A^2 S^{PN})^{1/3}}, S = \frac{\rho\mu_{vap}}{S^{PN}}, \chi = \frac{1}{l_0} \left(\frac{A}{6\pi S^{PN}} \right)^{1/3}, S^{PN} = \frac{S^P}{l_0} \exp \left[\frac{d_0}{l_0} \right] \quad (4)$$

Здесь $\Omega > 0, S < 0, \chi > 0$ и эти параметры характеризуют уровень испарения, радиус взаимодействия и химический потенциал пара соответственно. Для (3) была построена конечно-разностная схема и написана программа для решения этой системы. Использовались

граничные условия следующего вида: $h_x = h_{xxx} = 0$. На рисунке 1 представлены результаты численного моделирования уравнения (3) для различных значений безразмерного параметра испарения. Данный рисунок показывает движение ультратонкого слоя жидкости при различных значениях параметра испарения Ω . Когда уровень испарения достаточно высокий (Рис. 1(а)), первоначально образовавшийся капиллярный гребень, появление которого описано в [Seeman, J. of Physics, 2005], постепенно исчезает. При малом уровне испарения (Рис. 1(б)) гребень имеет постоянную устойчивую форму. Решения, представленные на Рис.1, показывают стационарное движение фронта между двумя равновесными значениями толщины с некоторой постоянной скоростью, которая может быть получена непосредственно из вычислительных данных или вычислена при помощи аналитической формулы из стационарного состояния уравнения.

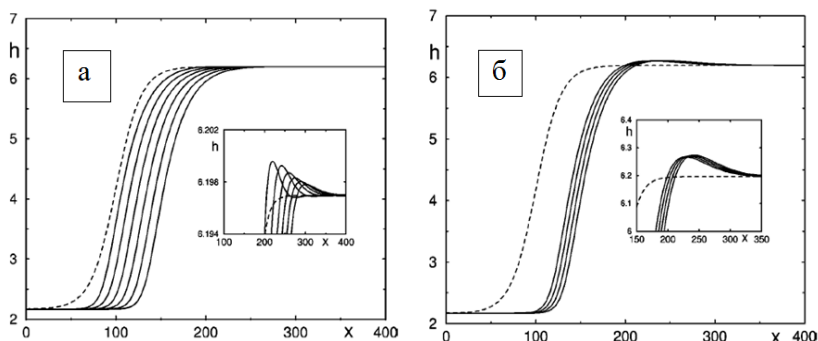


Рис.1 Распространения фронта при $S = -0.003, \chi = 1.085$ для $\Omega = 0.78$ (а) и $\Omega = 0.078$ (б). Пунктирной линией обозначено начальное распределение. Внутренняя картинка показывает динамику капиллярного гребня.

Считая, что в состоянии равновесие толщина слоя есть функция только скорости и времени можно найти скорости движения фронта жидкости. Зависимость скорости распространения фронта жидкости от безразмерного параметра испарения Ω приведена на рисунке 2. Как видно из рисунка 2, скорость распространения фронта имеет линейную зависимость от параметра испарения. При $\Omega \rightarrow 0$ скорость распространения фронта стремится к нулю, в соответствии с законом сохранения массы.

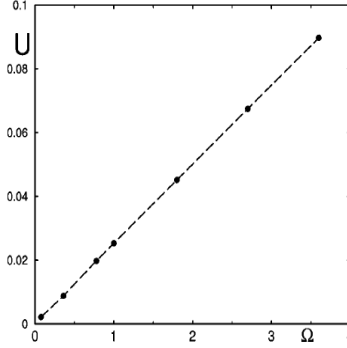


Рис.2. Зависимость скорости распространения фронта U от параметра испарения Ω для $S = -0.003$, $\chi = 1.085$.

В рамках исследования линейной устойчивости, полученной в результате численных расчетов формы стационарной волны $h_0(x - Ut)$, рассматривалась устойчивость бесконечно малых возмущений фронта, представленных в следующем виде: $h' = u(x - Ut) \times \exp(\omega t + iky)$, где ω и k – декремент и волновое число для возмущений, а ось y направлена перпендикулярно распространению фронта тонкого слоя x . Процедура линеаризации приводит к задаче на собственные значения относительно бесконечно малых возмущений, а собственным числом данной задачи является декремент ω .

Дифференциальное уравнение операторного вида для определения значения декремента запишется следующим образом:

$$\omega u + L_0 u + k^2 L_2 u + k^4 h_0^3 u = 0 \quad (5)$$

Линейные дифференциальные операторы L_0 и L_2 имеют вид:

$$\begin{aligned} L_0 &= \frac{d}{dx} \left[f_{03} + f_{01} \frac{d}{dx} + f_{00} \right] + f_{000}, L_2 = f_{22} \frac{d^2}{dx^2} + f_{21} \frac{d}{dx} + f_{20} \\ f_{03} &= h_0^3, \quad f_{01} = \frac{3}{h_0} - \chi h_0^3 \exp(-\chi h_0) + \Omega \\ f_{00} &= U + h_{0x} \left[-\frac{3}{h_0^2} - (3 - \chi h_0) \chi h_0^2 \exp(-\chi h_0) \right] - 3h_0^2 h_{0xxx} \\ f_{000} &= \Omega \left[\frac{3}{h_0^4} - \chi \exp(-\chi h_0) \right], f_{22} = 6h_0^3, \\ f_{21} &= 9h_0^2 h_{0x}, f_{20} = -f_{01} \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь h_{0x} и h_{0xxx} обозначают первую и третью производные стационарного решения соответственно.

На рисунке 3 приведены дисперсионные соотношения для различных значений параметра испарения. Из приведенных соотношений можно

сделать следующий вывод: при больших значениях безразмерного параметра испарения Ω все поперечные возмущения затухают, однако с уменьшением значения величины Ω в области малых значений волнового числа k появляется область неустойчивости, которую будем идентифицировать как пальцеобразную неустойчивость.

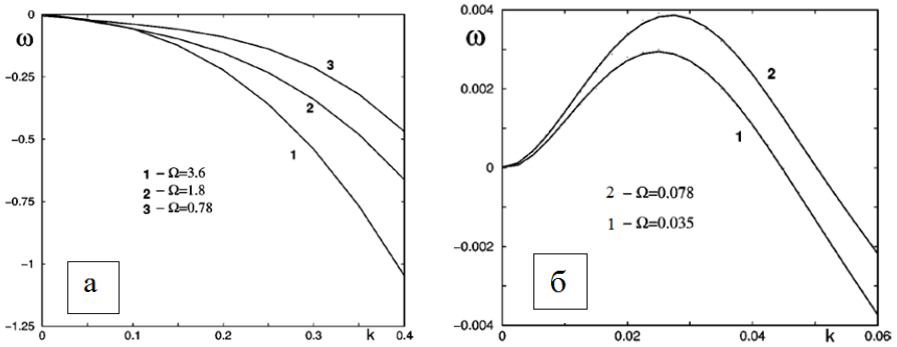


Рис.3. Дисперсионное соотношение $\omega(k)$ для устойчивого (а) и неустойчивого (б) состояний движения фронта при $S = -0.003$ и $\chi = 1.085$ при различных значениях параметра испарения Ω .

Также проводилось исследование (3) в трехмерном случае. Была получена трехмерная поверхность тонкого слоя с пальчиковой неустойчивостью в начальной стадии. На рисунке 4 приведены результаты трехмерного моделирования при различных значениях безразмерного параметра испарения.

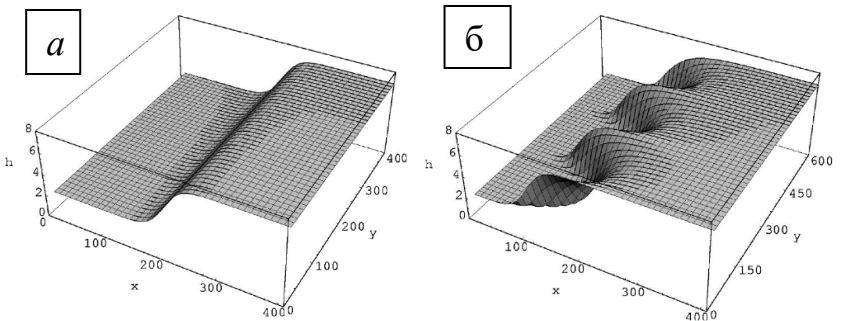


Рис. 4. Трехмерная модель фронта жидкой пленки для различных значений параметра испарения: а– $\Omega=0.78$, б – формирующиеся «пальцы» $\Omega=0.078$. Параметры моделирования: $\chi = 1.085$, $S = -0.003$.

В третьей главе диссертационной работы решена задача численного моделирования ультратонкой пленки теплопроводной жидкости, лежащей на твердой равномерно нагретой подложке и ограниченной сверху свободной деформируемой границей «жидкость–газ». Жидкость может испаряться в парообразную среду. Твердая граница имеет температуру $T = T_0$, а температуру пара обозначим через T_v , причем $T_0 > T_v$. Поверхностное натяжение межфазной границы линейно зависит от температуры $\sigma = \sigma_v - \theta(T - T_v)$ здесь θ – температурный коэффициент поверхностного натяжения, а константа σ_v есть поверхностное натяжение при температуре T_v .

Для вывода уравнения эволюции пленки использовались уравнения Навье-Стокса, сохранения массы и уравнение теплопроводности:

$$\rho(\partial_t \vec{v} + \vec{v} \nabla \vec{v}) = -\nabla(p + \varphi) + \mu \nabla^2 \vec{v}, \quad (7)$$

$$\nabla \vec{v} = 0, \quad (8)$$

$$\rho c(\partial_t T + v \nabla T) = k_{th} \nabla^2 T, \quad (9)$$

где v – скорость жидкости, p – давление, c – теплоемкость, T – температура, k_{th} – коэффициент теплопроводности, ρ – плотность жидкости, $\varphi = d\Phi(h)/dh$ – дополнительный потенциал энергии слоя, возникающий в результате межмолекулярного взаимодействия, μ – коэффициент динамической вязкости жидкости. На границе раздела «жидкость–газ» используются кинематическое уравнение и уравнение деформируемой поверхности. На межфазной границе «твердое тело–жидкость» скорость жидкости имеет нулевое значение. На свободной деформируемой границе имеют место следующие граничные условия:

$$z = h(x, t): \quad k_{th} \cdot \nabla T \cdot \vec{n} + \alpha_{th}(T - T_v) = 0, \quad (10)$$

$$(\Pi^{(a)} - \Pi) \cdot \vec{n} + \nabla_s \sigma + 2H \sigma \vec{n} = 0.$$

Здесь α_{th} – коэффициент теплопереноса, который описывает скорость переноса тепла от жидкости в газовую фазу с постоянной температурой T_v , Π – тензор поверхностного напряжения, σ – поверхностное натяжение,

∇_s – оператор поверхностного градиента, H – средняя кривизна поверхности, а $\vec{n}$ – единичный нормальный к поверхности вектор, направленный наружу в газовую фазу, обозначенную буквой «а».

При выводе уравнения эволюции пленки было использовано длинноволновое приближение, которое основывается на геометрии задачи. Длинноволновое приближение заключается в том, что продольный масштаб задачи (например, длина волны вдоль деформируемой поверхности) полагается много большим поперечного масштаба, например, средней толщины слоя. Отношение толщины слоя к длине волны полагается очень малым, и вводится так называемый

геометрический коэффициент, после этого задача решается в безразмерной форме. Благодаря использованию геометрического коэффициента система уравнений существенно упрощается. В ходе работы были получены распределение температуры вдоль вертикальной оси и уравнение в безразмерной форме для толщины пленки:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -MB \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{h^2 \partial_x h}{(1+Bh)^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{h^3}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{h^3} - \exp(-\chi h) - \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) \right] - \quad (11)$$

$$-\Omega \left[\frac{1}{h^3} - \exp(-\chi h) - \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - S \right]$$

где $M = \vartheta(T_0 - T_v)/2\sigma_v$ – число Марангони, $B = \alpha_{th}h/k_{th}$ – число Био для теплообмена жидкости и газа, остальные параметры соответствуют (3). На рисунке 6(а), полученном в результате численного моделирования при малых числах Марангони, видно, что на границе фронта между двумя устойчивыми значениями толщины появляется капиллярный гребень. При увеличении безразмерного числа Марангони (рисунок 6(б)) капиллярный гребень исчезает.

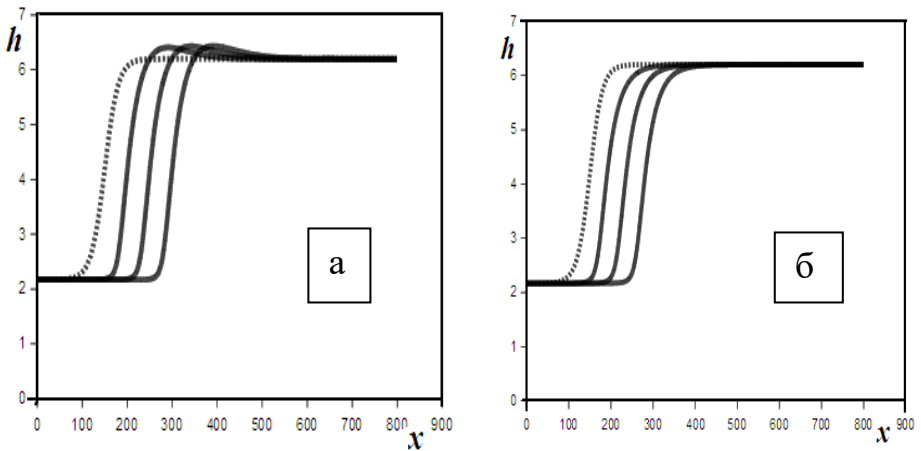


Рис. 6. Движение ультратонкой жидкой пленки, полученные в результате численного моделирования при различных значениях числа Марангони (а – $Ma=1$; б – $Ma=10$). Другие параметры: $\Omega=0.07$, $\chi = 1.085$, $B = 0.001$, $S = -0.003$.

Так же как и во второй главе был проведен анализ устойчивости стационарной волны относительно возмущений, распространяющихся в перпендикулярном направлении относительно фронта распространения тонкого слоя. В результате была получена функциональная зависимость для декремента возмущений ω по отношению к волновому числу k . На

рисунке 7 представлено дисперсионное соотношение $\omega(k)$ для поперечных возмущений относительно движения фронта слоя жидкости. Как видно из приведенного рисунка, при малых значениях числа Марангони имеет место устойчивое состояние. С ростом безразмерного параметра Марангони устойчивость системы уменьшается и для $Ma > Ma_{cr}$ появляется область неустойчивости в области малых значений волнового числа. Установлено, что с увеличением безразмерного параметра испарения Ω происходит сдвиг области неустойчивости в диапазон коротких волн.

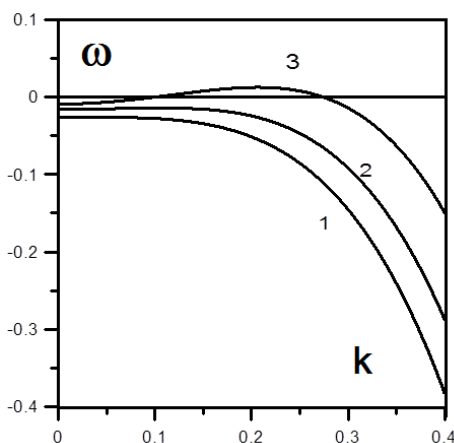


Рис. 7. Дисперсионное соотношение $\omega(k)$ при различных значениях числа Марангони: 1 – $Ma=1$; 2 – $Ma=10$; 3 – $Ma=25$. Значения остальных параметров: $\chi = 1.085$, $S = -0.003$, $B = 0.001$, $\Omega = 0.1$.

Особое внимание стоит уделить тому факту, что для каждого дисперсионного соотношения относительно поперечных возмущений при фиксированном числе Марангони существует своя индивидуальная голдстоуновская мода, которая соответствует значению волнового числа $k = 0$.

Четвертая глава посвящена изучению влияния термокапиллярного механизма неустойчивости на электрогидродинамическую систему. Рассматривается плоский горизонтальный слой слабопроводящей вязкой жидкости. Начало координат находится на нижней твердой поверхности: ось x направлена горизонтально, а ось z – вертикально. На твердой границе $z=0$ поддерживаются постоянные значения температуры $T=\Theta$ и электрического потенциала $\phi=-U$. Свободная поверхность $z=h$ является

границей между жидкостью и внешней пассивной средой (воздух или вакуум), на ней значение температуры $T=0$ и потенциала $\phi=0$. На свободной границе за счет инжекции из внешней области задается плотность потока свободных зарядов J , не зависящая от времени. Внешняя среда, через которую происходит процесс инжекции заряда, обладает слабой электропроводностью, и поверхностный заряд на границе «жидкость – внешняя среда» не образуется. Коэффициент поверхностного натяжения линейно зависит от температуры и описывается формулой $\sigma = \sigma_0 - \sigma_1 T$. Движение жидкости и свободных зарядов, а также распределение температуры определяются системой уравнений электрогидродинамики:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v}(\nabla \vec{v}) &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla \nabla \vec{v} + \frac{q \vec{E}}{\rho}, \quad \text{div } \vec{v} = 0, \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \nabla T &= \chi \nabla \nabla T, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \text{div } \vec{J} = 0, \quad \vec{J} = q \vec{v} + qb \vec{E}, \quad \vec{E} = -\nabla \phi, \quad \text{div } \varepsilon \vec{E} = -q.$$

Здесь ν – вектор скорости жидкости; p – давление жидкости; T – температура; $\vec{E}$ – вектор напряженности электрического поля; $\vec{J}$ – вектор плотности потока свободных зарядов; ϕ – электрический потенциал; q – плотность свободных зарядов; ρ – плотность жидкости; ν, χ – коэффициенты кинематической вязкости и температуропроводности; ε – диэлектрическая постоянная среды; b – подвижность зарядов в жидкости. Граничные условия для системы уравнений (12) запишем следующим образом, на инжекторе поддерживается постоянное значение электрического потенциала и выполняется условие для униполярной инжекции [Atten, 12thICDL,1996]:

$$z = H: \quad \phi_a = U_H, \quad E_a = 0. \quad (13)$$

Для невозмущенного стационарного состояния границу раздела будем считать изотермической и эквипотенциальной, температуру жидкости и потенциал будем отсчитывать от температуры и потенциала границы раздела $z = h$: $\phi_a = \phi = 0, T = 0, \varepsilon_a E_a - \varepsilon E = 0, J_a = J$. Граничное условие на коллекторе имеет следующий вид: $z = 0: \phi = -U, T = \Theta$. Для исследования устойчивости равновесного состояния слоя жидкости применим метод малых возмущений. Считается, что под воздействием возмущений первоначально плоская свободная поверхность может деформироваться: $z = h + \xi(x, t)$. Полагая деформацию малой по

сравнению с h , граничные условия с $z = h + \xi$ можно перенести на $z=h$, используя тейлоровское разложение. Нормальная и касательная составляющие тензора напряжений будут выглядеть следующим образом:

$$z = h: -p + \rho g \xi - \sigma \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \varepsilon \left(\frac{d\phi_0}{dz} \right) \frac{\partial \phi}{\partial z} + 2\nu \rho \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0, \quad (14)$$

$$\nu \rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = \frac{\partial \sigma}{\partial x}.$$

Будем исследовать устойчивость равновесных распределений относительно малых «нормальных» возмущений:

$$(v_z, T, \phi, q, \xi) = (v(z), \theta(z), \phi(z), q(z), \xi) \cdot \exp[-\lambda t + ikx], \quad (15)$$

здесь λ – комплексный декремент возмущений, а k – волновое число. Производя линеаризацию уравнений по возмущениям, запишем уравнения и граничные условия в безразмерном виде:

$$\lambda(v'' - k^2) = v^{IV} - 2k^2 v'' + k^4 v + Ra k^2 \left(\frac{dq_0}{dz} \phi + \frac{d\phi_0}{dz} q \right)$$

$$\theta'' - k^2 \theta + v = 0$$

$$-\lambda Pj q + \frac{dq_0}{dz} v - 2q_0 q - \left(\frac{d\phi_0}{dz} q' + \frac{dq_0}{dz} \phi \right) = 0$$

$$\phi'' - k^2 \phi = -q$$
(16)

$$z = 1: v + \lambda Pr \xi = 0, \theta' = 0, \phi + \xi \frac{d\phi_0}{dz} = 0,$$

$$\phi' + \xi \frac{d^2 \phi_0}{dz^2} = 0,$$

$$Cr \left[(3k^2 - \lambda)v' - v''' + Rak^2 \left(q_0 \phi + \frac{d\phi_0}{dz} \phi' \right) \right] =$$

$$= -k^2 \xi (Bo + k^2),$$

$$v'' - k^2 v - Mak^2 (\xi - \theta) = 0.$$
(17)

$$z = 0: v = 0, v' = 0, \theta = 0, \phi = 0.$$

Задача содержит шесть перечисленных ниже безразмерных параметров: число Ra , являющееся электрическим аналогом числа Рэлея, число Марангони Ma , число Прандтля $Pr = \nu/\chi$, число Бонда Bo , капиллярный параметр Cr , число Pj , описывающее подвижность зарядов:

$$Ra = \frac{\varepsilon U}{b\rho\nu}, Ma = \frac{\sigma_1 \theta h}{\rho\nu\chi}, Bo = \frac{g\rho h^2}{\sigma_0}, Cr = \frac{\rho\nu\chi}{\sigma_0 h}, Pj = \frac{\nu}{bU} \quad (18)$$

Спектральная задача (16–17) определяет собственные числа λ как функцию волнового числа и безразмерных параметров. Численное

решение системы дифференциальных уравнений проводилось пошаговым интегрированием методом Рунге-Кутты-Мерсона. Проводились расчеты для нескольких нейтральных кривых ($\lambda=0$) при $Cr = 10^{-5}, Bo = 10^{-1}$ двух нижних мод инжекционной неустойчивости при различных значениях числа Марангони. Предельный случай $Ma=0$ соответствует случаю изотермической жидкости, подверженной инжекции со стороны свободной границы. При значении $Cr=0$ (плоская граница) полученные результаты согласуются со значениями, приведенными в работе [Schneider, Phys. of Fluids 1970]: $Ra_m^{(1)} = 99, k_m^{(1)} = 4.0$.

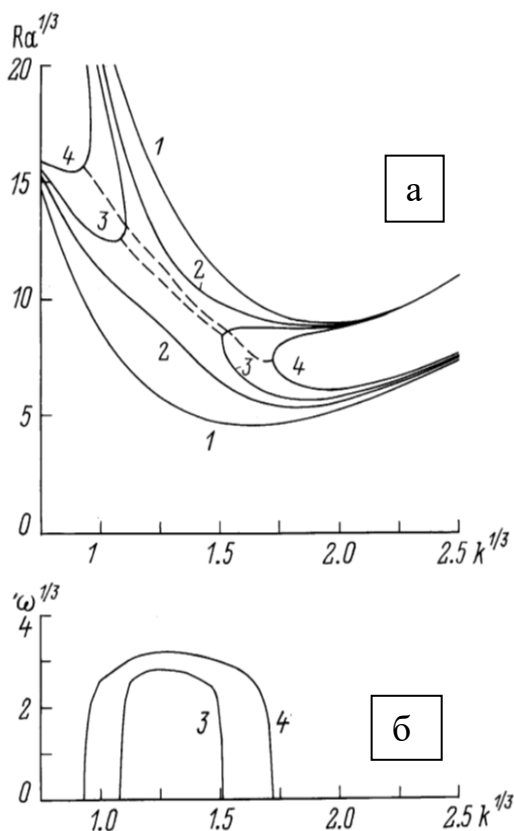


Рис.8. Нейтральные кривые устойчивости для двух нижних уровней монотонной и колебательной моды (а) и дисперсионное соотношение $\omega(k)$ (б) при различных значениях числа Марангони: $Ma=0, -100, -150, -250$ (кривые 1–4 соответственно). Пунктирная линия – граница колебательной моды неустойчивости.

С увеличением положительных значений числа Марангони (нагрев со стороны твердой границы) критическое значение электрического аналога числа Рэлея $Ra_m^{(1)}$ первой моды понижается и становится равным нулю при значении $Ma=80$, что соответствует обычной задаче о возникновении конвекции Марангони. Пороговое значение волнового числа $k_m=2.0$. При подогреве со стороны свободной границы (отрицательные числа Марангони) происходит повышение порогового значения для первой моды $Ra_m^{(1)}$. Для второго уровня неустойчивости с ростом положительных чисел Марангони происходит повышение минимального значения Ra_m а при отрицательных Ma значение $Ra_m^{(2)}$ понижается. Результаты проведенных расчетов показывают, что взаимодействие инжекционного и термокапиллярного механизмов неустойчивости при подогреве системы со стороны твердой границы приводит к ее дестабилизации относительно монотонно растущих возмущений. При отрицательных числах Марангони Рис. 8 (подогрев со стороны свободной поверхности) происходит повышение устойчивости системы. В дальнейшем при увеличении подогрева со стороны свободной границы критическое число Рэлея для основной монотонной моды неустойчивости и для неустойчивости относительно возмущений с двухъярусной ячейкой сближаются, и при некотором отрицательном значении числа Марангони вместо двух монотонных мод неустойчивости появляется колебательная мода. Частота колебательных возмущений возрастает от нуля с ростом числа Марангони.

В пятой главе рассмотрена задача по численному моделированию эволюции ультратонкой пленки жидкости с добавлением растворимого поверхностно-активного вещества (ПАВ) в концентрации много ниже критической концентрации мицеллообразования (ККМ). В отличие от третьей главы работы, поверхностное натяжение зависит не от температуры, а от поверхностной концентрации ПАВ. По условию задачи жидкость изотермическая, а для исследования динамики концентрации ПАВ, кроме уравнения Навье-Стокса, используются уравнения диффузии объемной и поверхностной концентраций, а также уравнение обмена между объемом и поверхностью:

$$\partial_t c + \vec{v} \nabla c = D_b \nabla \nabla c,$$

$$\partial_t \Gamma + \nabla_s \cdot (\vec{v}_s \Gamma) + H \Gamma (\vec{v} \cdot \vec{n}) = D_s \nabla \nabla \Gamma + J, \quad (19)$$

$$J = c(\vec{v} - \vec{v}_s) \cdot \vec{n} - D_b \nabla c \cdot \vec{n} = k_1 c - k_2 \Gamma,$$

где c , Γ – объемная и поверхностная концентрации, D_b , D_s – объемный и поверхностный коэффициенты диффузии, J – параметр обмена ПАВ между объемом и поверхностью, H – кривизна поверхности, $\vec{n}$ – нормаль к поверхности, v_s – скорость вдоль поверхности, ∇_s – градиент вдоль поверхности.

С использованием длинноволнового приближения были получены уравнения эволюции толщины пленки и поверхностной концентрации ПАВ:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{h^3}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{h^3} - \exp(-\chi h) - \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) \right] + \quad (20)$$

$$+ Ma_c \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{h^2}{2} \cdot \frac{\partial \Gamma}{\partial x} \right) - \Omega \left[\frac{1}{h^3} - \exp(-\chi h) - \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - S \right]$$

$$(\beta + h) \frac{\partial \Gamma}{\partial t} = \frac{\partial \Gamma}{\partial x} h^2 \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{h^3} - \exp(-\chi h) - \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right] \cdot \left(\frac{\beta}{2} + \frac{h}{3} \right) + \quad (21)$$

$$+ Ma_c \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial x} \right)^2 h \left(\beta + \frac{h}{2} \right) + \frac{\beta}{Pe_s} \left(\frac{\partial^2 \Gamma}{\partial x^2} \right) + \frac{1}{Pe_b} \frac{\partial}{\partial x} \left[h \frac{\partial \Gamma}{\partial x} \right],$$

где h – толщина пленки, Ma_c – концентрационное число Марангони, описывающее поверхностный эффект градиента концентрации ПАВ, S – химический потенциал пара над пленкой, Pe_s , Pe_b – соответственно поверхностное и объемное число Пекле, которое показывает диффузию ПАВ, Γ – поверхностная концентрация ПАВ, Ω – параметр испарения, β – параметр адсорбции-десорбции ПАВ между поверхностью и объемом жидкости.

В результате численного моделирования были получены графики эволюции испаряющейся тонкой пленки в присутствии ПАВ. На рисунке 9 показано, что при достаточно высоких числах Марангони и Пекле структура слоя разрушается, образуя множество неровностей, и пленка постепенно приобретает меньшую из двух возможных толщин, которая соответствует минимуму свободной энергии. Для анализа устойчивости рассматривалось такое состояние системы, при котором начальные величины толщины h и концентрации Γ имеют постоянные значения h_0 и Γ_0 , и вводились возмущения в виде $\exp(\lambda t + i k x)$, где λ – декремент возмущений, а k – волновое число.

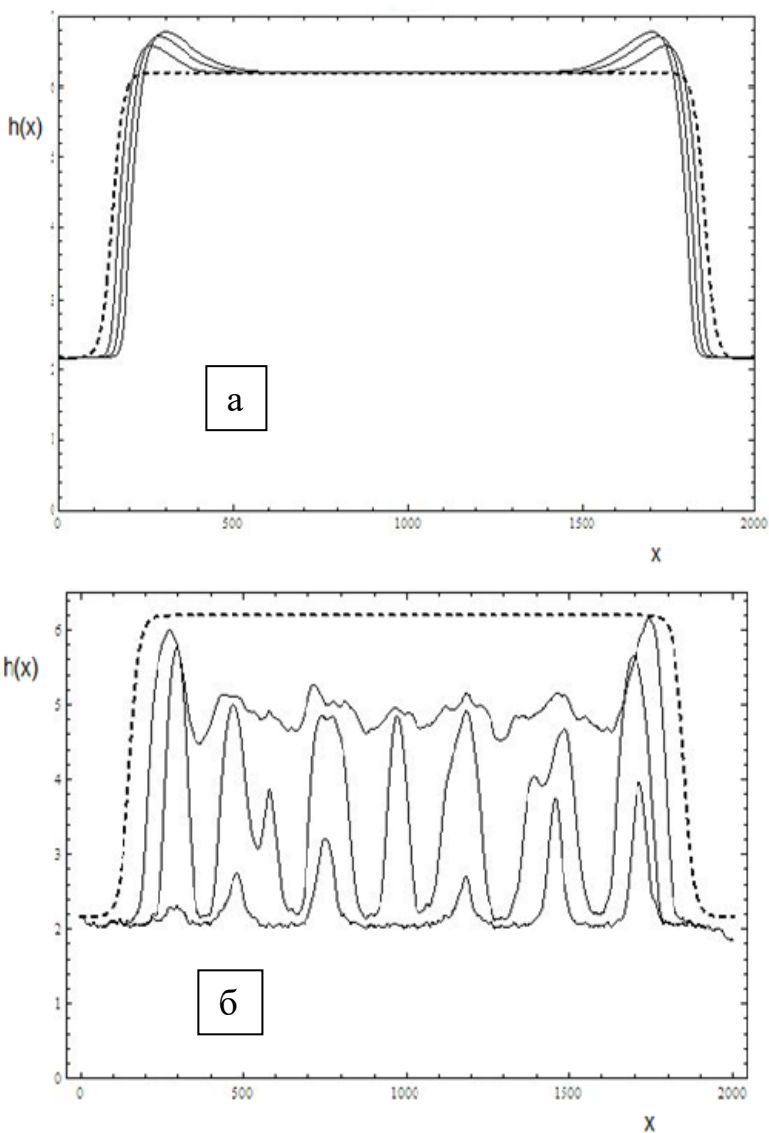


Рис. 9. Эволюция распространения фронта тонкого слоя жидкости $h(x)$ для различных значений концентрационного числа Марангони: а) $Ma_c = 0.1$ и б) $Ma_c = 50$. Пунктиром обозначено начальное распределение. Параметры: $\Omega = 0.01$, $\chi = 1.085$, $S = -0.03$, $Pe_b = Pe_s = 1$, $\beta = 1$.

Подставив эти возмущения в уравнения эволюции (20–21), получим задачу на собственные значения:

$$\begin{vmatrix} \lambda + \frac{4}{3}k^4 + k^2 L_{21} + L_{01} & \frac{1}{2}k^2 Ma_c \\ -k^4 & (\beta + 1)\lambda + k^2 L_{22} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \tilde{h} \\ \tilde{T} \end{vmatrix} = 0, \quad (22)$$

где

$$L_{21} = \frac{\chi}{3} \exp(-\chi)(2 - \chi) + \Omega + Ma_c, \quad L_{01} = \Omega[(1 - \exp(-\chi)) - S],$$

$$L_{22} = \left(\frac{\beta}{2} + \frac{1}{3}\right) [\chi \cdot \exp(-\chi) - 3] + Ma_c \left(\beta + \frac{1}{2}\right) + \frac{\beta}{Pe_s} + \frac{2}{Pe_b}.$$

Решая систему (22) относительно λ получаем две независимые моды, которые представлены на Рис. 10.

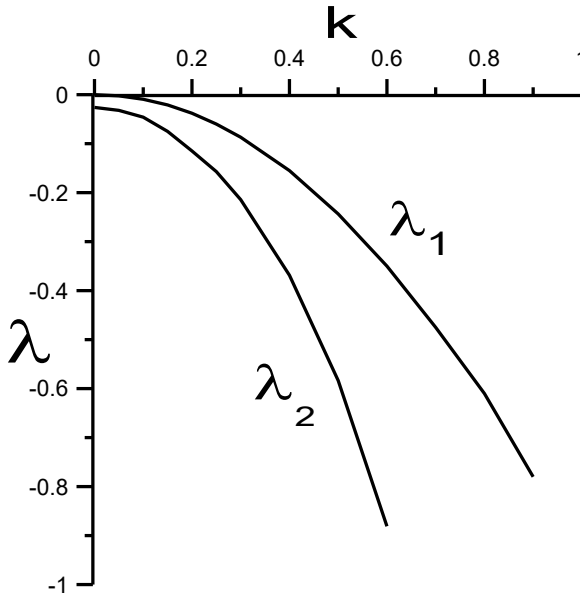


Рис.10. Дисперсионная зависимость $\lambda(k)$ для $Ma_c=0.01$ и $\Omega=0.01$. Остальные параметры: $\chi=1.085$, $S=-0.03$, $Pe_b=Pe_s=1$, $\beta=1$.

Одна из мод, обозначенная на Рис.10 λ_1 , представляет собой моду концентрационных возмущений, а вторая, обозначенная λ_2 , описывает эволюцию возмущений слоя жидкости при испарении. Как видно из рисунка, при малом испарении $\Omega \ll 1$ и малом значении числа Ma_c обе

моды возмущений затухают. Особенностью моды испарения является тот факт, что при $k=0$ декремент не равен нулю и имеет место так называемая голдстоуновская мода возмущений. При $\Omega \rightarrow 0$ декремент этой моды для $k=0$ также стремится к нулевому значению.

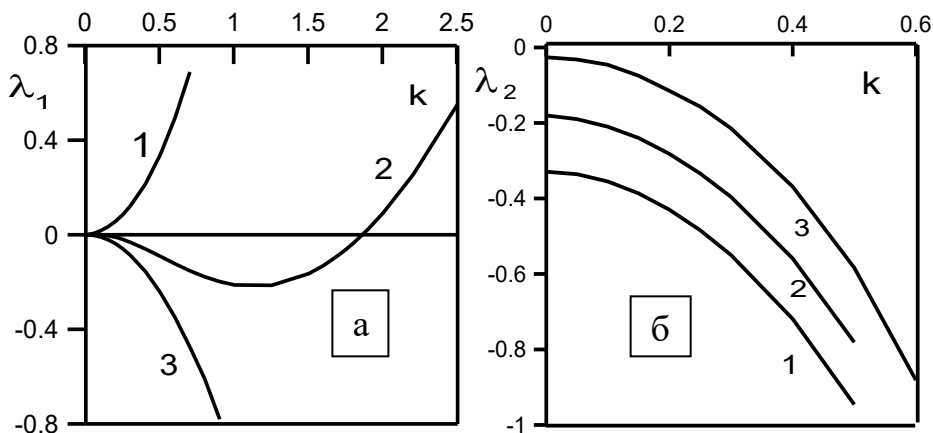


Рис. 11. Дисперсионные соотношения $\lambda(k)$: а) для концентрации ПАВ при различных значениях числа Марангони, 1 – $Ma=5$, 2 – $Ma=1.8$ и 3 – $Ma=0.01$; б) для толщины пленки при различных значениях параметра испарения, 1 – $\Omega=0.125$, 2 – $\Omega=0.07$ и 3 – $\Omega=0.001$. Значения других параметров: $Pe_s=Pe_b=25$, $\chi=1.085$; $\beta=0.001$; $S=-0.003$.

На Рис. 11а приведен график зависимостей декремента от волнового числа для различных значений величины Ma_s относительно концентрационной моды неустойчивости. С увеличением значения безразмерного параметра Марангони в длинноволновом диапазоне появляется область неустойчивости. В дальнейшем с увеличением числа Ma_s при любом значении волнового числа возмущения нарастают. Напротив, с увеличением числа Ω (Рис.11б) устойчивость системы относительно возмущений повышается.

Далее рассмотрена задача по численному моделированию эволюции ультратонкого слоя жидкости при наличии на обеих межфазных границах сурфактанта. Рассматривается движение ультратонкого горизонтального слоя вязкой несжимаемой жидкости (например, воды) с начальной толщиной h_0 , который заключен между твердой подложкой и паром соответствующей жидкости, также будем считать, что начальная концентрация сурфактанта в объеме и на межфазных поверхностях пленки «жидкость– пар» и «жидкость– подложка» есть c_0 , Γ_{a0} , Γ_{s0} соответственно.

Имеет место линейная зависимость коэффициента поверхностного натяжения от концентрации сурфактанта на свободной поверхности $\sigma = \sigma_0 - a\Gamma_a$, здесь σ_0 – коэффициент поверхностного натяжения при отсутствии ПАВ, а константа a есть концентрационный коэффициент поверхностного натяжения. Потенциал межмолекулярного взаимодействия φ выражается через свободную энергию межмолекулярного взаимодействия поверхности и связь между этими величинами записывается следующим образом: $\varphi = d\Phi/dh$. Величина φ определяется как

$$\varphi = \frac{A}{6\pi h^3} - \frac{S^p}{l_0} \exp\left[\frac{d_0 - h}{l_0}\right] + RT \cdot \ln c, \quad (23)$$

где A – константа Гамакера, d_0 – молекулярный размер, l_0 – значение радиуса взаимодействия. Константа S^p может быть определена в результате эксперимента. Третье слагаемое в уравнении учитывает растворение сурфактанта в жидкости. Уравнение, описывающее перенос сурфактанта вдоль поверхностей, будем записывать следующим образом:

$$\begin{aligned} \partial_t \Gamma_a + \nabla_a \cdot (\vec{v}_a \Gamma_a) + H \Gamma_a (\vec{v} \cdot \vec{n}) &= D_a \nabla \nabla \Gamma_a + J_a, \\ \partial_t \Gamma_s + \nabla \cdot (\vec{v}_s \Gamma_s) &= D_s \nabla \nabla \Gamma_s + J_s. \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь Γ_a и Γ_s обозначены поверхностные концентрации на межфазных границах «жидкость–пар» и «жидкость–подложка», ∇_a есть оператор градиента на свободной поверхности, v_a и v_s есть скорости движения жидкости на соответствующих поверхностях, D_a и D_s есть коэффициенты поверхностной диффузии на границах, H – кривизна свободной поверхности. Величины J_a и J_s описывают обмен ПАВ между объемом и поверхностями «жидкость–пар» и «жидкость–подложка» соответственно и выражаются в следующем виде:

$$\begin{aligned} J_a &= k_1 c|_{z=h} \cdot \left(1 - \frac{\Gamma_a}{\Gamma_{a=\infty}}\right) - k_2 \Gamma_a, \\ J_s &= k_3 c|_{z=0} \cdot \left(1 - \frac{\Gamma_s}{\Gamma_{s=\infty}}\right) - k_4 \Gamma_s \end{aligned} \quad (25)$$

где k_1 и k_2 есть коэффициенты адсорбции и десорбции на свободной поверхности, а k_3 и k_4 являются коэффициентами адсорбции и десорбции для границы «жидкость–подложка». Величины $\Gamma_{a=\infty}$ и $\Gamma_{s=\infty}$ определяют поверхностную концентрацию при максимальной компактности на соответствующих межфазных границах. В длинноволновом приближении эволюционные уравнения для толщины слоя и концентраций на межфазных границах в безразмерном виде примут вид:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{h^3}{3} \frac{\partial}{\partial x} (P + \Phi) \right] + \frac{Ma_c}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(h^2 \cdot \frac{\partial \Gamma_a}{\partial x} \right) -$$

$$\begin{aligned}
& -\Omega[(P + \Phi) - S] = 0, \\
& P + \Phi = -Ca \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{1}{h^3} - \exp(-\chi h) + W \ln C, \\
& \frac{\partial \Gamma_A}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(U \cdot \Gamma_A) + \Gamma_A \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial U}{\partial z} = \\
& = \frac{1}{Pe_A} \frac{\partial^2 \Gamma_A}{\partial x^2} + K_1 \Gamma_A (1 - \Gamma_A) - K_2 \Gamma_A, \\
& \frac{\partial \Gamma_S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(U \cdot \Gamma_S) = \frac{1}{Pe_S} \frac{\partial^2 \Gamma_S}{\partial x^2} + K_3 \Gamma_S \left(1 - \frac{\Gamma_S}{\gamma}\right) - K_4 \Gamma_S, \\
& \gamma = \Gamma_{S=\infty} / \Gamma_{A=\infty}.
\end{aligned} \tag{26}$$

Здесь h – толщина пленки, Ma_c – концентрационное число Марангони, описывающее поверхностный эффект градиента концентрации сурфактанта, S – химический потенциал пара над пленкой, Ca – капиллярный параметр, Pe_A , Pe_S – соответственно поверхностное и объемное число Пекле, которое показывает диффузию ПАВ, Ω – параметр испарения, W – параметр растворения ПАВ в жидкости. Параметры K_1 , K_2 , K_3 , K_4 определяют величину адсорбции-десорбции на межфазных границах.

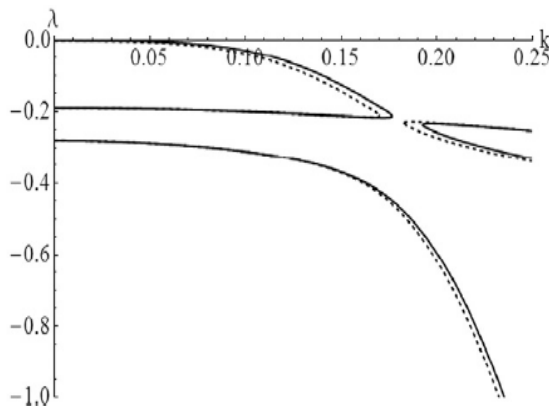


Рис.12. Дисперсионное соотношение между декрементом λ и волновым числом k . Значения концентраций на межфазных поверхностях равны $\Gamma_{A0}=0.1$, $\Gamma_{S0}=0.1$, соответственно. Сплошной и пунктирной линиями показаны кривые для параметра испарения $\Omega=1$ и $\Omega=0.1$ соответственно. Параметры десорбции-адсорбции: $K_1=0.9$, $K_2=1$, $K_3=0.9$, $K_4=1$, $Ca=0.001$, $\chi=1.085$, $\gamma=2$, $W=0.03$, $Ma_c=2$, $W=0.02$ $Pe_S=Pe_A=1$.

Для исследования устойчивости данной системы все основные величины представим в виде суммы основного состояния и возмущения: $h = h_0 + \tilde{h}$, $\Gamma_A = \Gamma_{A0} + \tilde{\Gamma}_A$, $\Gamma_S = \Gamma_{S0} + \tilde{\Gamma}_S$. Представим эти возмущения в «нормальном» виде: $\tilde{A} = \exp(\lambda t + ikx)$ где λ является декрементом возмущений и описывает поведение возмущения со временем, k есть волновое число вдоль оси x . Подставляя эти возмущения в систему эволюционных уравнений для толщины слоя и межфазных границ, получаем задачу на собственные значения: $A \cdot x = 0$, где собственным числом является декремент возмущений λ . В этой задаче матрица $A(\lambda)$ имеет размерность 3×3 , а x – вектор с координатами $(\tilde{h}, \tilde{\Gamma}_A, \tilde{\Gamma}_S)$.

Данная система имеет три моды, одна из которых является модой испарения, а две другие являются модами, которые описывают процессы адсорбции и десорбции на межфазных границах «пар–жидкость» и «жидкость–твёрдая подложка». На рисунке 12 представлено дисперсионное соотношение для данной задачи при различных значениях параметра испарения. Обнаружено, что все возмущения при наборе параметров системы на рисунке 11 затухают. Как видно из представленного выше изображения, для малых значений начальных концентраций имеет место взаимодействие моды испарения и моды, ответственной за процессы адсорбции-десорбции на свободной границе. Изменение величины испарения не вносит ощутимый вклад в дисперсионное соотношение. Декремент возмущения λ может принимать положительные значения только при отрицательных значениях концентрационного числа Марангони.

В заключении приведены основные результаты и выводы работы.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

На основе представленных в настоящей работе результатов можно сделать следующие выводы:

1. В результаты расчетов эволюционного уравнения для ультратонкого слоя жидкости впервые было показано, что форма фронта испаряющейся тонкой пленки существенно меняется при изменении безразмерного параметра испарения. Для малых значений безразмерного параметра испарения имеется характерный капиллярный гребень для «толстого» слоя жидкости, которое характеризует массоперенос в направлении вертикальной оси. При больших значениях параметра испарения капиллярного гребня не наблюдается.
2. При исследовании устойчивости было впервые обнаружено, что относительно поперечных возмущений для малых безразмерных

параметров испарения существует область, где возмущения могут нарастать, причем эта неустойчивость имеет длинноволновый характер. Для области неустойчивости приводится зависимость критического значения волнового числа от безразмерного параметра испарения и исследуется зависимость декремента возмущений от волнового числа при различных значениях химического потенциала пара. Обнаружено, что с увеличением модуля значения химического потенциала пара происходит повышение устойчивости фронта движущейся жидкости относительно поперечных возмущений.

3. В результате трехмерного численного моделирования эволюционного уравнения движения тонкого слоя жидкости впервые было установлено, что при больших параметрах безразмерного числа испарения фронт движущегося слоя жидкости устойчив по отношению к поперечным возмущениям. Однако, когда значения параметра испарения имеют малое значение, имеет место неустойчивость по отношению к поперечным возмущениям, что приводит к образованию на подвижной границе пальцеобразных структур. Было проведено сравнение полученных численных результатов с экспериментальными данными, которое показало достаточно хорошее согласие как по качественному, так и по количественному соотношению.
4. Исследовано эволюционное уравнение, описывающее поведение испаряющейся тонкой пленки жидкости при наличии термокапиллярного эффекта на межфазной границе «жидкость – пар». Приведены графики движения фронта испаряющегося ультратонкого слоя жидкости для различных значений безразмерного числа Марангони. В диапазоне малых значений безразмерного параметра испарения, где имеет место неустойчивость относительно поперечных возмущений, эффект Марангони приводит к увеличению области неустойчивости. Впервые было показано, что для поперечных возмущений значение длинноволновой (голдстоуновской) моды зависит от безразмерного числа Марангони. С увеличением безразмерного числа Марангони происходит понижение устойчивости системы относительно длинноволновой моды, хотя она всегда остается в области устойчивости. Установлено, что наличие термокапиллярного эффекта может приводить к потере устойчивости движения ультратонкого слоя жидкости с образованием пальцеобразной структуры поверхности.

5. В рамках линейной теории устойчивости изучена двухслойная система «воздух – слабопроводящая жидкость», заключенная между обкладками плоского конденсатора. Инжекция заряда производится через свободную деформируемую поверхность неизотермической жидкости, коэффициент поверхностного натяжения которой линейно зависит от температуры. В результате численно проведенных расчетов (методом Рунге-Кутты-Мерсона) впервые было показано, что взаимодействие инжекционного и термокапиллярного механизмов приводит к дестабилизации относительно монотонных возмущений при подогреве со стороны твердой границы $Ma > 0$. При $Ma < 0$ (подогрев со стороны свободной поверхности) происходит повышение устойчивости. Для инжекционного механизма электроконвекции найдены две нижние моды неустойчивости. При $Ma > Ma_c$ происходит их слияние и образуется колебательная мода неустойчивости. Найдена зависимость частоты колебаний от волнового числа.
6. Произведено исследование в рамках длинноволнового приближения системы уравнений для изучения влияния растворимого сурфактанта на динамику и устойчивость движения фронта испарения тонкой жидкостной пленки. Рассматривается режим быстрой кинетики сурфактанта со свободной границы в объем жидкости. Получены эволюционные уравнения для толщины слоя и объемной концентрации сурфактанта. Впервые было показано, что присутствие на поверхности растворимого сурфактанта приводит к существенному изменению пространственных структур на поверхности испаряющегося ультратонкого слоя жидкости. Наблюдается образование провалов на свободной поверхности слоя жидкости. С течением времени эти «ямы» увеличиваются и достигают значения адсорбционного слоя. В дальнейшем площадь провалов увеличивается, и в результате толщина всего слоя жидкости принимает абсорбционное значение толщины.
7. Исследована устойчивость движения фронта испаряющегося ультратонкого слоя жидкости при наличии сурфактанта на свободной поверхности по отношению к «нормальным» возмущениям. Для стационарного состояния впервые были обнаружены две независимые моды возмущения. Одна из них определяет поведение концентрационных возмущений, а вторая показывает эволюцию возмущений в процессе движения жидкости при испарении. Существенным отличием этих двух

мод друг от друга является тот факт, что для концентрационной моды неустойчивости при $k=0$ декремент тоже равен нулю, тогда как для моды испарения при значении волнового числа, равном нулю, имеет место голдстоуновская мода $\lambda \neq 0$. Впервые было показано, что рост значений безразмерного концентрационного числа Марангони приводит к понижению устойчивости системы и образованию области неустойчивости. С увеличением безразмерного параметра испарения устойчивость системы по отношению к моде испарения увеличивается. Численные расчеты качественно подтверждают результаты линейной теории.

8. Исследована устойчивость движения фронта испаряющегося ультратонкого слоя жидкости при наличии сурфактанта на обеих межфазных поверхностях. Для стационарного состояния впервые были обнаружены три независимые моды возмущения. Две из мод определяют поведение концентрационных возмущений на границах раздела, а третья показывает эволюцию возмущений в процессе движения жидкости при испарении. С увеличением безразмерного параметра испарения устойчивость системы увеличивается. Для всех положительных значений безразмерного числа Марангони все возмущения для различных типов неустойчивости затухают. При отрицательном числе Марангони имеет место неустойчивость, связанная с механизмом испарения. Для рассматриваемой нами «сэндвич»-структуры впервые обнаружен колебательный режим.

Список публикаций по теме диссертации:

1. Бирих Р. В., Люшнин А. В. Влияние конвекции Марангони на инжекционный механизм неустойчивости // Журнал технической физики, 2000. – Т. 70, № 70, Вып. 1. – С. 19–23 (из перечня ВАК).
2. Lyushnin A. V., Golovin A. A., Pismen, L. M. Fingering instability of thin evaporating liquid films // Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics. 2002. – Vol. 65. – P. 021602/1–021602/7 (из перечня ВАК).
3. Leizerson, I., Lipson, S. G., Lyushnin, A. V. When larger drops evaporate faster // Nature. 2003. – Vol. 422. – P. 395–396 (из перечня ВАК).
4. Leizerson, I., Lipson, S. G., Lyushnin, A. V. Symbiosis of different-sized drops // Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics. 2003. – Vol. 68. – P. 051601/1–051601-5 (из перечня ВАК).

5. Leizerson, I., Lipson, S. G., Lyushnin, A. V. Finger instability in wetting-dewetting phenomena // *Langmuir*. 2004.– Vol.20, № 2. P. 291–294 (из перечня ВАК).
6. Gordeeva V. Y., Lyushnin A. V. Influence of Marangoni instability on evaporation of the polar liquid film // *European Physical Journal, Special Topics*. 2013. – Vol. 219. – P.45–49 (из перечня ВАК).
7. Гордеева В. Ю., Люшнин А. В. Влияние термокапиллярного эффекта на динамику и устойчивость движения испаряющейся тонкой пленки // *Журнал технической физики*, 2013. – Т. 83, Вып. 3. – С. 41–47 (из перечня ВАК).
8. Гордеева В. Ю., Люшнин А. В. Особенности испарения тонкого слоя воды в присутствии растворимого сурфактанта // *Журнал технической физики*, 2014. – Т. 84, Вып. 5. – С. 28–34 (из перечня ВАК).
9. Люшнин А. В., Pismen L. Исследование устойчивости тонкой водяной испаряющейся пленки при наличии на свободной поверхности растворимого сурфактанта // *Журнал технической физики*, 2015. – Т. 85, Вып. 5. – С. 152–154 (из перечня ВАК).
10. Gordeeva V. Y., Lyushnin A. V. Evaporation of thin film of polar liquid in presence of soluble surfactant // *Advanced Material Research*. 2015. – Vol. 1105. –P. 105–109 (из перечня ВАК).
11. Gordeeva V. Y., Lyushnin A. V. Numerical simulation and stability analysis of solutocapillary effect in ultrathin films// *European Physical Journal, Special Topics*. 2017. – Vol. 226. – P.1219–1228 (из перечня ВАК).
12. Gordeeva V. Y., Lyushnin A. V. Dynamics of an evaporating thin film of polar liquid with solutocapillary Marangoni effect and capillary osmosis // *Surface & Coatings Technology*. 2017. – Vol. 320. – P.531–535 (из перечня ВАК).
13. Gordeeva V.Y., Lyushnin A.V. Numerical investigation of thin film of polar liquid with added surfactant // *Journal of Physics: Conference Series*. –2017. –V.925. – P.012021-012027 (из перечня ВАК).
14. Birikh R. V., Lyushnin A. V. Convective instability of dielectric liquid subjected to unipolar injection of charge through free surface // *IEEE International Conference on Conduction & Breakdown in Dielectric Liquids*, Roma, Italy, 1996, P. 77–80.
15. Lyushnin A. V. Charge distribution in the two-liquid layers condensator under the injection mechanism of conductivity // *IEEE International Conference on Conduction and Breakdown in Dielectric Liquids*, Nara, Japan, 1999, P. 90–93.
16. Гордеева В. Ю., Люшнин А. В. Влияние термокапиллярного эффекта на скорость распространения фронта тонкого слоя испаряющейся

- полярной жидкости // Конвективные течения...–2011. – Вып. 5. Пермь: Перм. Гос. пед. ун-т. – С. 053–060.
17. Гордеева В. Ю., Люшнин А. В. Исследование устойчивости движения фронта испаряющейся тонкой водяной пленки при наличии растворимого сурфактанта // Конвективные течения...– 2013. – Вып. 6. Пермь: Перм. Гос. пед. ун-т. – С. 265–273.
18. Гордеева В. Ю., Люшнин А. В. Исследование процессов структурообразования на свободной поверхности тонкого слоя испаряющейся жидкости при наличии растворимого сурфактанта // Актуальные задачи механики сплошных сред. –2014. – С.20.
19. Брацун Д.А., Гордеева В. Ю., Люшнин А. В. Особенности поведения ультратонкого слоя испаряющейся жидкости при наличии на свободной деформируемой границе сурфактанта// Вестник Пермского научного центра УрО РАН. –2017. –№2. – С.35-38.
20. Гордеева В. Ю., Люшнин А. В. Исследование механизмов неустойчивости для ультратонкого слоя испаряющейся жидкости при наличии сурфактанта на обеих межфазных поверхностях // Неравновесные процессы в сплошных средах. –2017. –Т.1. – С.131-133.

Подписано в печать 15.08.2019. Формат 60х90 1/16. Усл. печ. л. 2,0.
Тираж 100 экз. Заказ № 3-14

Отпечатано с готового оригинал-макета в копировально-множительном центре
Пермского государственного гуманитарно-педагогического университета
614990, г. Пермь, ул. Пушкина, д. 44, каб. 101, т. (342) 2-386-412