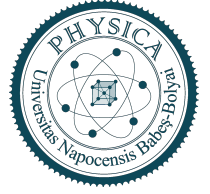




UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA



UNIVERSITATEA “BABEȘ-BOLYAI” CLUJ-NAPOCA
FACULTATEA DE FIZICĂ
SPECIALIZAREA FIZICĂ INFORMATICĂ

LUCRARE DE LICENȚĂ

Coordonator științific

Prof. Dr. Néda Zoltán

Dr. Tyukodi Botond

Absolvent

Tunyogi Kata



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA



UNIVERSITATEA “BABEȘ-BOLYAI” CLUJ-NAPOCA
FACULTATEA DE FIZICĂ
SPECIALIZAREA FIZICĂ INFORMATICĂ

LUCRARE DE LICENȚĂ

EXAMINAREA MACROSCOPICĂ A FLUIDELOR, CU SIMULĂRI
STOHAȘTICE ȘI STUDII EXPERIMENTALE

Coordonator științific

Prof. Dr. Néda Zoltán

Dr. Tyukodi Botond

Absolvent

Tunyogi Kata

2024



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA



BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM KOLOZSVÁR
FIZIKA KAR
FIZIKA INFORMATIKA SZAK

ÁLLAMVIZSGA DOLGOZAT

FOLYADÉKOK MAKROSZKÓPIKUS VIZSGÁLATA, STOCHASZTIKUS
SZIMULÁCIÓKKAL ÉS KÍSÉRLETEKKEL

Témavezető tanár

Prof. Dr. Néda Zoltán

Dr. Tyukodi Botond

Végzős hallgató

Tunyogi Kata

2024

Kivonat

A folyadékok vizsgálata régóta kiemelt érdeklődési terület a kutatók számára, többen vizsgálták a hármasonal viselkedését és a folyadékfelszín alakváltozását a folyadék és felület találkozási esetén. Jelen dolgozatban kísérletileg és Monte Carlo szimulációs módszerrel is megvizsgáltuk a folyadék hármasonalát inhomogén felülettel való találkozási esetén. Olyan felületeket tekintettünk, amelyeken szabályos módon elhelyezett, a felülettől különböző nedvesítési szöggel jellemzett pöttyök találhatóak. Kísérleti módszerekkel megfigyeltük, hogy az ilyen felületi inhomogenitások milyen mértékben befolyásolják a csepp mozgását, és ezáltal, indirekt módon, hogy mennyire fogják fel a csepp hármasonalát. Emellett szimulációs módszert alkalmaztunk a folyadék fal melletti kapilláris viselkedésének vizsgálatára.

Abstract

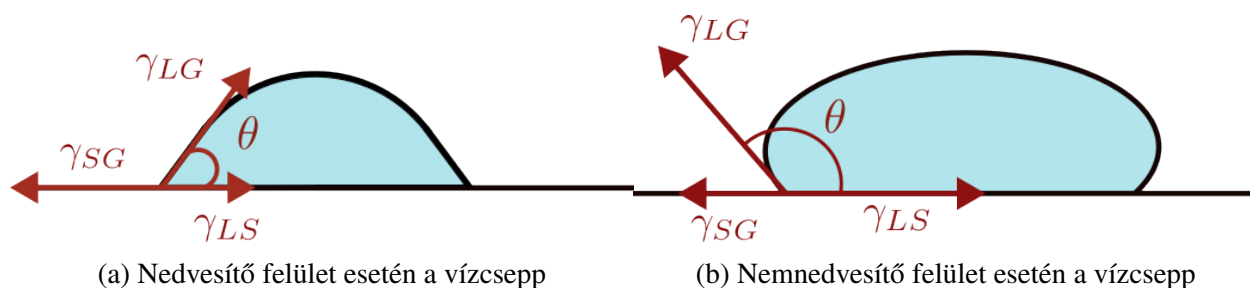
The study of fluids has been a key area of interest for researchers, examining the behavior of the triple line and the change of its surface at the interface between fluid and substrate. In this thesis, we studied the fluids' triple line in contact with an inhomogeneous surface using both experimental methods and Monte Carlo simulations. We considered surfaces with regularly placed pinning points characterized by a contact angle different from that of the surrounding surface. Using the experimental methods, we observed how these surfaces with inhomogeneities can influence the movement of the droplets, and indirectly, to what degree the surfaces can hold the fluid's triple line. Additionally, we applied a simulation method to study the capillary behavior of the fluid near a wall.

Tartalomjegyzék

1. Bevezető	5
2. Folyadék viselkedésének szimulációs vizsgálata fal mellett	9
2.1. A szimulációs módszer	9
2.2. Szimulációs eredmények	13
3. Folyadék hármasonalának kísérleti vizsgálata	17
4. Folyadék hármasonalának szimulációs vizsgálata	20
4.1. A szimulációs módszer	20
4.2. Szimulációs eredmények	22
5. Különböző felületek hatása a folyadék viselkedésére	27
Következtetések	31

1. Bevezető

A folyadékok és szilárd felületek találkozását már megannyian tanulmányozták, ugyanis érdekes dolgok figyelhetők meg mikroszkopikus és makroszkopikus vizsgálat során. Ezek az érdekes jelenségek a folyadéknak a felülettel való interakciója során, a kettőjük találkozása mentén láthatóak. Ezen jelenségek változatosságát a felület, a folyadék és az őket körülvevő gáz jellemzői határozzák meg. Ezáltal tanulmányozható a felület típusának, vagy egyéb paraméterek változtatásának a folyadékra gyakorolt hatása, azaz a folyadék viselkedésének változása, így ezen szemlélet szerint kialakult egy a felületre használt osztályozási módszer. A folyadék és az őt körülvevő gáz milyenségének függvényében különbséget tehetünk nedvesítő (lásd 1.1a. ábra) és nem nedvesítő (lásd 1.1b. ábra) felületek között, ugyanis merőben eltérő viselkedést mutatnak a folyadékok egyik vagy másik esetén.

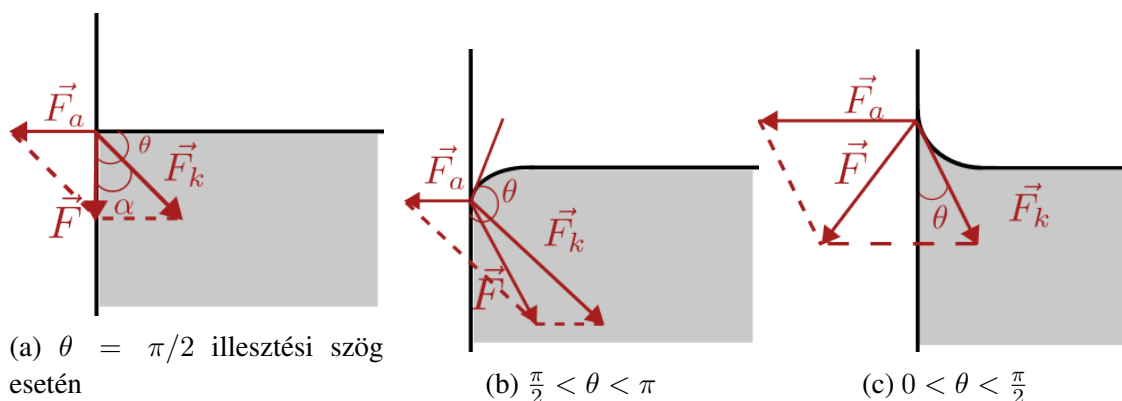


1.1. ábra. Nedvesítő és nemnedvesítő felületek

Egy folyadék csepp esetén a folyadék szélén a három anyag találkozását (gáz, folyadék, szilárd halmazállapot) hármasonvonalnak nevezzük. A hármasonvonalon fellépő kohéziós (a folyadék molekulák közötti vonzás) és adhéziós (a folyadék és más molekulák között ható vonzás) erőket a határfelületi feszültséggel jellemezzük. A határfelületi feszültség az a szabadenergia, ami ahhoz kell, hogy egységnyivel növekedjen a folyadék felülete, ennek jelölései: γ_{LG} a folyadék és gáz között, a γ_{LS} a folyadék és szilárd anyag között és a γ_{SG} a szilárd anyag és gáz között fellépő határfelületi feszültség. Egy másik jellemző paraméter a csepp és a szilárd anyag között bezárt szög, amit nedvesítési szögnek (θ) nevezünk (lásd 1.1. ábra). Ezek segítségével megadható a Young egyenlet keretein belül egy csepp esetén az erőegyensúly feltétele:

$$\gamma_{SG} - \gamma_{LS} - \gamma_{LG} \cos(\theta) \quad (1)$$

A kohéziós (\vec{F}_k) és adhéziós (\vec{F}_a) erők kapcsolata határozza meg, hogy egy felület nedvesítő vagy nemnedvesítő. Nézzünk egy falra felmászó folyadékot (lásd 1.2. ábra). Ha a nedvesítési szög $\theta = \pi/2$, ekkor a folyadékmolekulák határgömbjének a negyede van kölcsönhatásban a



1.2. ábra. Homorú és domború meniszkusz

folyadékban található molekulákkal (a gömbnek a fele a fallal van kölcsönhatásban és a maradék negyede pedig a levegővel), így a kohéziós erő eredője a fallal 45° -os szöget fog bezárni. Mivel a falra merőlegesen hat az adhéziós erő eredője, így ez felírható, mint

$$F_a = F_k \sin \alpha = F_k \sin \frac{\pi}{4} = \frac{F_k \sqrt{2}}{2} = \frac{F_k}{\sqrt{2}} \quad (2)$$

Ebben az esetben a két erőből adódó eredő erő párhuzamos lesz a fallal és nem alakul ki meniszkusz a fal mellett (lásd 1.2a. ábra). Ha $F_a > F_k/\sqrt{2}$, akkor a nedvesítés szöge 0 és $\pi/2$ közé esik és megjelenik a homorú meniszkusz, a felület nedvesítő lesz (lásd 1.2c. ábra). Abban az esetben viszont ha $F_a < F_k/\sqrt{2}$ feltétel teljesül, akkor a nedvesítési szög $\frac{\pi}{2} < \theta < \pi$ közé fog esni és domború meniszkuszt figyelhetünk meg. Ebben az esetben tehát nemnedvesítésről beszélhetünk (lásd 1.2c. ábra).

A felületek folyadékkal való nedvesítésének tanulmányozását Young [1] és Laplace [2] kezdte, de azóta mind elméleti [3], mind gyakorlati [4] szempontból vizsgálták ezt a problémát. Több tanulmány is készült, amelyben a csepp hármasonalával és alakjával foglalkoztak, amely kapcsán megfigyelték, hogy a csepp elterülésének végső formája függ a felületi érdességtől [5, 6] és a folyadék felvitelének módjától [7, 8]. A folyadék cseppek modellezésének céljából létrejött a Braake által kidolgozott "Surface Evolver" nevű ingyenes software [9]. Ennek a szimulációnak a lényege, hogy numerikus számítások segítségével megkeressük a folyadék cseppnek azt az egyensúlyi állapotát, ami a felület és a folyadék találkozási folyamán létrejön. A számítások mentén az Evolver egy "gradient descent" algoritmust használ, amely segítségével a megfelelő paraméterek megadása után megkeresi azt a felületet, amely a minimális energiával rendelkező állapothoz kapcsolódik. A software komplexitását az adja, hogy ez a környezet képes kezelni mindenféle tetszőleges felületet, felületi paramétereket, stb. Viszont meg kell említeni a korlátait is, ami abból adódik, hogy a folyadéknak egy előre lerögzített érintkezési felületet definiálva keresi

a legkedvezőbb energiájú állapotot.

A nedvesítéssel kapcsolatos számítógépes szimulációk esetén két másik fő technika terjedt el, a molekuláris dinamika szimulációs megközelítés és a Monte Carlo szimulációs módszer alkalmazása. A molekuláris dinamika módszerének nehézsége, hogy nagy számítási kapacitásra van szükségünk ahhoz, hogy megfelelő felbontásban tudjunk tanulmányozni bármilyen problémát, erre nyújt megoldást a Monte Carlo szimulációs módszer. A Monte Carlo szimulációs módszer során a rendszert makroszkópicusan vizsgáljuk.

A Monte Carlo szimulációs módszer egy sztochasztikus módszer, tehát random mintavételezésen alapul, amely képes determinisztikus problémák megoldására is, akár csak jelen esetünkben. A szimuláció véletlenszerű kezdőállapotokból indul. Véletlenszerűen kiválasztunk egy új konfigurációt és azt valamilyen szabály szerint elfogadjuk. A leggyakrabban használt szabály a Metropolis algoritmus, amely energia változásán ($\Delta E_f - E_i$) alapul. Ha az új konfiguráció energiája alacsonyabb ($\Delta E < 0$), akkor elfogadjuk a változást, ha pedig az új konfiguráció energiája nagyobb, akkor egy bizonyos valószínűségi szabály szerint fogadjuk el a változást. Ez a valószínűségi szabály legtöbbször a következőképpen írható le:

$$P_i = \exp\left(\frac{-\Delta E_i}{k_B T}\right) \quad (3)$$

ahol k_B a Boltzmann állandó és T a hőmérséklet.

A dolgozatban két Monte Carlo módszerrel alapuló szimuláció [10, 11] kerül bemutatásra: első lépésben vizsgáltuk a folyadéknak a kapilláris viselkedését homogén, illetve inhomogén felület (fal) mellett, másodsorban pedig egy vízszintes felületen elhelyezkedő csepp alakja került megfigyelésre. A mi esetünkben a csepp hármasonalára részlegesen volt rögzített: megkerestük azt a hármasonalat rögzített, amelyre energiaminimumot kaptunk. Így ez a szimuláció a Surface Evolver-hez képest egy pontosabb eredményt ad, mivel rögzített térfogat esetén a hármasonalnak részleges szabadsága van.

A szimulációkon kívül kísérleti úton is vizsgáljuk a víz hármasonalát, ehhez két kísérletet mutatunk be. Az első kísérlet során a folyadék hármasonalának alakját figyeljük meg öt különböző felületen: egy homogén felületen és négy különböző sűrűséggel pöttyözött felületen. Ez a kísérlet lehetővé teszi, hogy eredményeit összehasonlítsuk a fent említett szimulációs eredményekkel. A második kísérletünk arra fókuszál, hogy megvizsgálja, mennyire képes egy inhomogén felület megfogni egy vízcsepp hármasonalát.

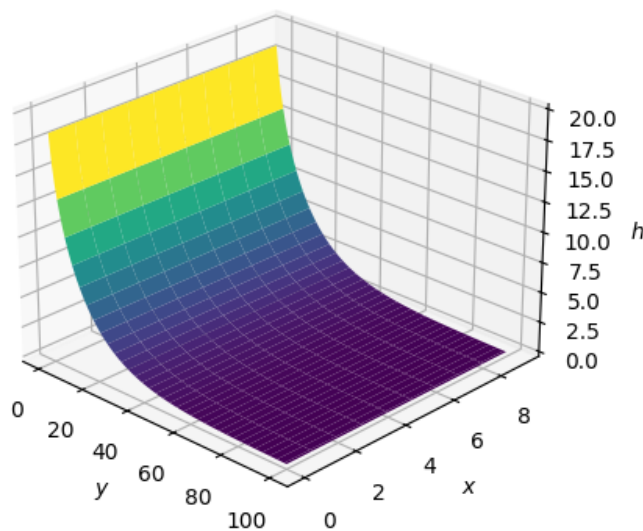
Felmerülhet ugyanakkor a kérdés, hogy gyakorlati szempontból mire a használható a nedvesítés jelensége inhomogén felületeken? Egyik elterjedt felhasználása az ofszetnyomtatás

[12] területén van, ahol a kapilláris, viszkozus és adhéziós erők kölcsönhatásait kihasználva lehet pontos mintákat létrehozni. Ezen kívül alkalmazzák a biológiában [13] is, ahol a nedvesítési jelenségek segítenek a sejtek és a biológiai anyagok felületi kölcsönhatásainak vizsgálatában. A mikrofluidikában [14] is fontosak ezek a jelenségek, ahol a folyadékok kezelése és mozgatása szükséges apró csatornákból és rendszerekben, például a mikrochipekben vagy mikroreaktorokban.

2. Folyadék viselkedésének szimulációs vizsgálata fal mellett

2.1. A szimulációs módszer

Ezt a szimulációt azzal a céllal reprodukáltuk, hogy megvizsgáljuk hogyan viselkedik egy folyadék, abban az esetben ha fal mellett helyezkedik el [10]. Ehhez a fentebbiekhez hasonlóan Monte Carlo módszerrel dolgoztunk, ahol egy $L \times M \times N$ -es rendszerben, minden $[i, j]$ koordináta párhoz hozzárendeltünk egy h_{ij} magasságot. A rács $j = 0$ irányú síkjában foglalt helyet a függőleges felület, amint az a 2.1. ábrán is látható. A szimuláció folyamán x irány mentén periodikus határfeltételeket alkalmaztunk, míg y irányban a felülettel ellentétes oldalon a magasságokat nullán tartottuk.



2.1. ábra. A felmászó folyadék függőleges felületre

A rendszerre felírható Hamilton függvény három tagból áll: egy gravitációs helyzeti energiából (H_1), két felületi energia tagból, az egyik ami a folyadék és a levegő között lép fel (H_2), és egy ami a folyadék és a fal között lép fel (H_3). A gravitációs helyzeti energia tag az ismert összefüggéssel adható meg:

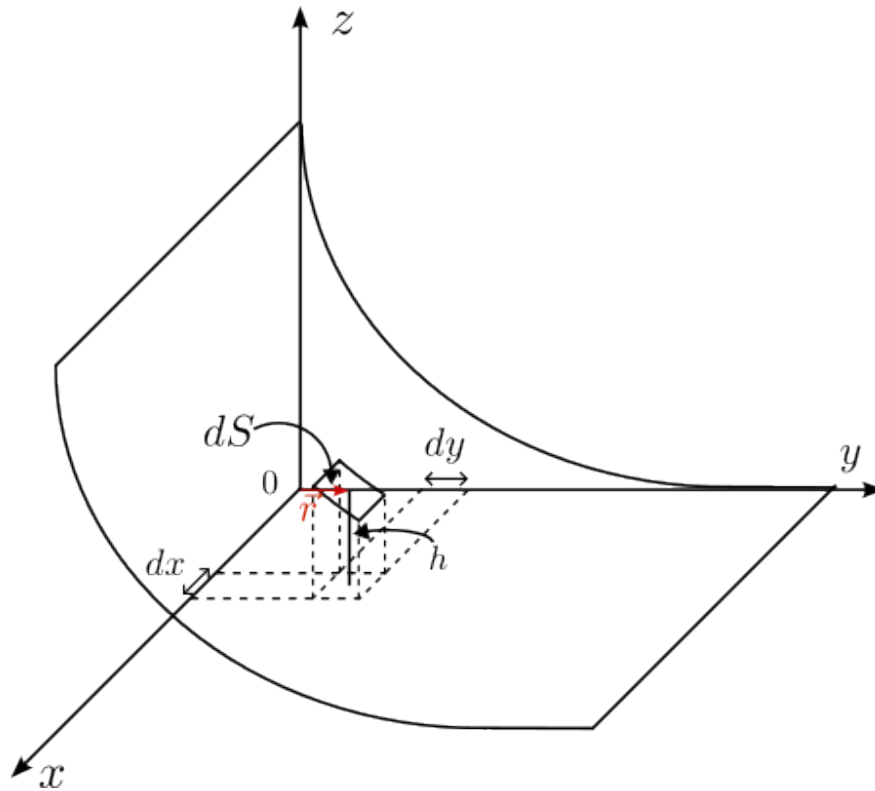
$$dH_1 = g \cdot z \cdot dm \quad (4)$$

Változócsereét hajtunk végre: $dm = \rho \cdot dV$.

$$dH_1 = \rho \cdot g \cdot z \cdot dV \quad (5)$$

A dV -t felbontjuk a három irány szerint komponensekre, így az egyenlet a következőképpen alakul:

$$d^3 H_1 = \rho \cdot g \cdot z \cdot dx \cdot dy \cdot dz \quad (6)$$



2.2. ábra. A folyadék dS felületeleme

Integrálunk 0 és h között a z komponens szerint:

$$d^2 H_1 = \rho \cdot g \cdot dx \cdot dy \cdot \int_0^h z \cdot dz = \frac{\rho g}{2} h^2 \cdot dx \cdot dy \quad (7)$$

Mivel diszkrét rendszerünk van, ezért a függvényt diszkrétizálni fogjuk. Ebben az esetben $dx = dy = a$, ahol a rácsállandó szerepét veszi fel.

$$H_1^{ij} = \frac{\rho g a^2}{2} h_{i,j}^2 \quad (8)$$

ahol ρ a folyadék sűrűsége, g a gravitációs gyorsulás és $h_{i,j}$ egy rácspontban a folyadék magassága.

A 8. képlet megadja egy rácspont gravitációs helyzeti energiáját. Nekünk a teljes rendszernek kell a helyzeti energiája, ezért összegezzük a rácspontok helyzeti energiáit. Így a gravitációs helyzeti energia a teljes rendszerre:

$$H_1 = \frac{\rho g a^2}{2} \sum_{i,j} h_{i,j}^2 \quad (9)$$

A Hamilton második tagja azt a felületi energiát adja meg, amely a folyadék és a levegő között lép fel, ezt egységnyi felületre a következőképpen írhatjuk fel:

$$dH_2 = \gamma_{LG} \cdot dS \quad (10)$$

Mivel ez a felületelem nem vízszintes, így az egységnyi felület az alábbiak szerint írható fel:

$$d^2 H_2 = \gamma_{LG} \cdot \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial x} \times \frac{\partial \vec{r}}{\partial y} \right\| \cdot dx \cdot dy \quad (11)$$

ahol $\vec{r} = (x, y, h(x, y))$. Ha parciálisan deriváljuk az \vec{r} vektort a két komponens szerint, akkor az egyenletünk így alakul:

$$d^2 H_2 = \gamma_{LG} \cdot \left\| \left(1, 0, \frac{\partial h(x, y)}{\partial x} \right) \times \left(0, 1, \frac{\partial h(x, y)}{\partial y} \right) \right\| \cdot dx \cdot dy \quad (12)$$

Elvégezve a vektoriális szorzást és a modulust:

$$d^2 H_2 = \gamma_{LG} \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{\partial h(x, y)}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial h(x, y)}{\partial y} \right)^2} \cdot dx \cdot dy \quad (13)$$

Ebben az esetben is szükségünk van a függvény diszkrétizálására. A két parciális derivált diszkrétizálása a következőképpen értelmezhető:

$$\frac{\partial h(x, y)}{\partial x} \cong \frac{h_{i,j} - h_{i+1,j}}{a} \quad (14)$$

$$\frac{\partial h(x, y)}{\partial y} \cong \frac{h_{i,j} - h_{i,j+1}}{a} \quad (15)$$

Ezen kívül az előző esethez hasonlóan a dx -t és dy -t az a rácsállandóval helyettesíthetjük. A diszkrét függvényünk a teljes rendszerre nézve, apró alakítgatások után így alakul:

$$H_2 = \gamma_{LG} \cdot \sqrt{a^2 + (h_{i,j} - h_{i+1,j})^2 + (h_{i,j} - h_{i,j+1})^2} \quad (16)$$

A Hamilton függvény utolsó tagját, a felületi energiát, ami a fal és a folyadék között lép fel, befolyásolja a fal és a levegő közötti kölcsönhatás és maga a folyadék és fal közötti kölcsönhatás. Ezt a következőképpen írhatjuk fel:

$$dH_3 = \gamma_{SG} (L \cdot N - dS) + \gamma_{LS} \cdot dS \quad (17)$$

ahol $dS = dx \cdot dz$ felületegység a fel melletti folyadék egységnyi felülete. Ismert összefüggés a Young-egyenlet:

$$\gamma_{LS} = \gamma_{SG} - \gamma_{LG} \cos(\theta) \quad (18)$$

A 18. egyenletből kifejezhetővé válik a γ_{LS} határfelületi feszültség, így ezt behelyettesítve a 17. képletbe, megkapjuk, hogy:

$$d^2 H_3 = \gamma_{SG} \cdot L \cdot N - \gamma_{SG} \cdot dx \cdot dz + \gamma_{SG} \cdot dx \cdot dz - \gamma_{LG} \cdot \cos(\theta) \cdot dx \cdot dz \quad (19)$$

$$d^2 H_3 = \gamma_{SG} \cdot L \cdot N - \gamma_{LG} \cdot \cos(\theta) \cdot dx \cdot dz \quad (20)$$

Ha a függvényt diszkrétizáljuk, akkor a rendszerre a felületi energia:

$$H_3 = \gamma_{SG} \cdot L \cdot N - \gamma_{LG} \cdot \cos(\theta) \cdot a \cdot \sum_i h_{i,j=0} \quad (21)$$

A három tagot összegezve megkapjuk a rendszer Hamilton függvényét [10]:

$$H = \frac{a^2 \rho g}{2} \sum_{i,j} h_{i,j}^2 + a \gamma_{LG} \sum_{i,j} [a^2 + (h_{i,j} - h_{i+1,j})^2 + (h_{i,j} - h_{i,j+1})^2]^{1/2} + \gamma_{SG} L N - a \gamma_{LG} \cos(\theta) \sum_i h_{i,j} \delta_{j,1} \quad (22)$$

A szimuláció során energiakülönbségekkel dolgoztunk, így a $\frac{\gamma_{SG} L N}{\gamma_{LG} a^2}$ konstans nem játszik szerepet. A fenti összefüggést dimenziótalanítva megkaphatjuk a szimuláció során használt Hamilton függvényünket:

$$\frac{H}{\gamma_{LG} a^2} = \frac{\rho g a^2}{2 \gamma_{LG}} \sum_{i,j} \left(\frac{h_{i,j}}{a} \right)^2 + \sum_{i,j} \frac{[a^2 + (h_{i,j} - h_{i+1,j})^2 + (h_{i,j} - h_{i,j+1})^2]^{1/2}}{a} - \cos(\theta) \sum_{i,j} h_{i,j} \delta_{j,1} \quad (23)$$

Az energiát nem az egész rendszerre számoltunk, hanem csak az $[i, j]$ rácspontra és a rácspont körüli elsőrendű szomszédokra. Két változtatható paraméterünk volt: a $\left(\frac{1}{\lambda}\right)^2 = \frac{\rho g}{2 \gamma_{LG}}$ kapilláris hossz inverzének négyzete és a $\cos(\theta)$ a nedvesítési szög \cos -a.

A szimuláció működésének gondolatmenete a következő: első lépésként egy véletlenszerű $[i, j]$ rácspont kerül kiválasztásra, amely körül a kezdeti energia értékét meghatározván, egy $(-dh, dh)$ intervallumon belüli véletlen értékkel változtatjuk a rácspont magasságát. Következő lépésként kiszámoljuk a változtatás által indukált $\Delta E = E_f - E_i$ energiakülönbséget, majd ennek előjelét

vizsgálva, eldöntjük, hogy a változás elfogadható vagy sem. Ha $\Delta E < 0$, akkor a változást minden esetben megtartjuk, ha pedig $\Delta E > 0$, akkor $\exp(-\Delta E/kT)$ valószínűséggel fogadtuk el.

A szimulációnak három nagy része volt: egy termalizálás, ahol a hőmérsékletet még nem csökkentettük, csak a fent említett lépéseket hajtottuk végre $L \times M \times t_{term}$ alkalommal, ahol t_{term} a termalizálás hosszát jelölte. Második lépésként a hűtés következett, ami adott T hőmérsékletről $0.9 \cdot T$ hőmérsékletre hűtötte le a rendszert. Minden hőmérsékleten $L \times M$ alkalommal végeztük el a fent említett lépéseket. Végül a $T = 0$ közeli hőmérsékleteken az energiainimalizálást úgy végeztük, hogy minden magasságváltoztatási próbálkozásnál, ha $\Delta E < 0$ volt, elfogadtuk a magasságváltozást, ellenkező esetben viszont mindig visszautasítottuk. A fent említett folyamat a 2.3. ábrán tekinthető meg, ebben az esetben a minimalizált energia értéként $E = 929.26$ -t kaptunk. Ezt az energiaértéket a dimenzióatlanított Hamilton függvényvel számoltuk (23. képlet) és a kT értékét is ennek megfelelően, ebben a dimenzióatlanított skálában számoltuk.

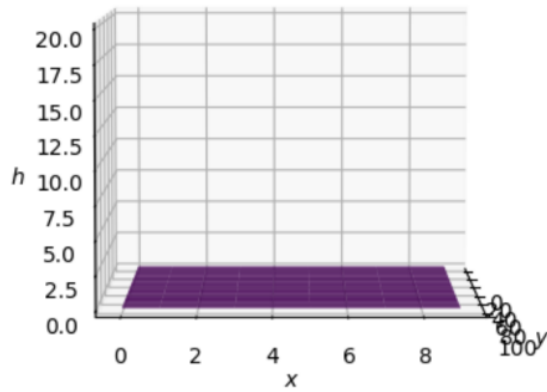
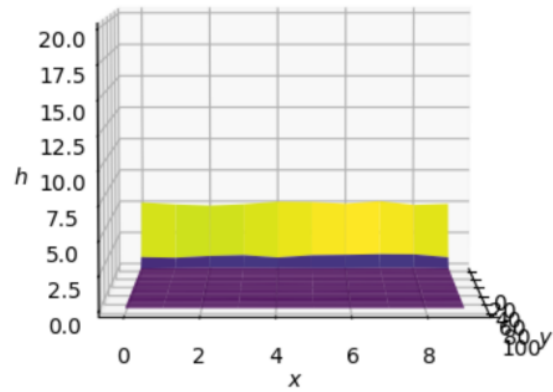
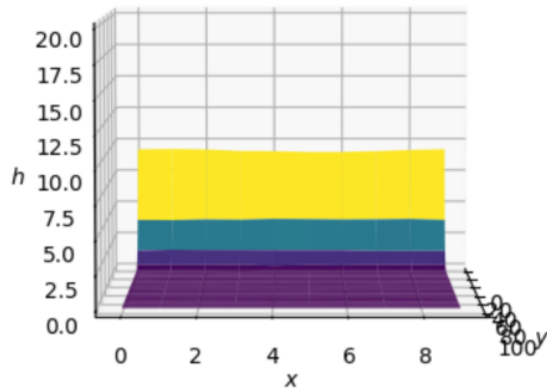
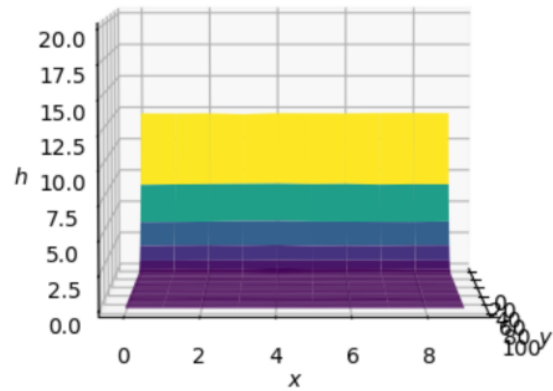
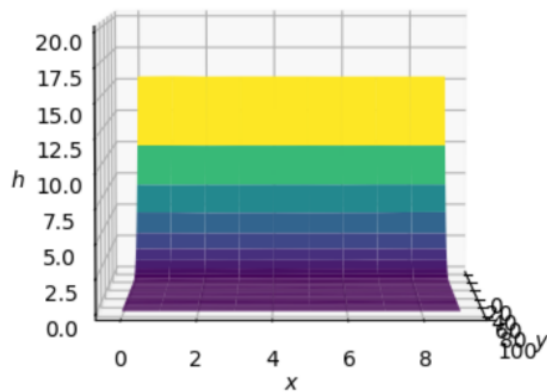
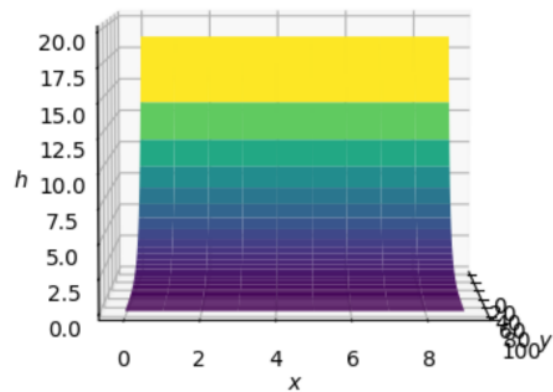
Minden lépésnél kiszámoltuk a rendszer elfogadási rátáját, tehát hogy $L \times M$ esetből hány esetben történt a rendszerben változás. A dh magasságot a rendszer elfogadási rátája szerint változtatjuk, tehát ha az elfogadási ráta nagyobb volt, mint 50%, akkor növeljük ezt a dh egységnyi magasságot, ellenkező esetben pedig csökkentjük.

2.2. Szimulációs eredmények

A 2.4a. ábrán látható a felületnek az (yOz) síkra vetített metszete rögzített $(\frac{1}{\lambda})^2 = 0.002$ paraméter esetében. Ezeket a sík metszeteket a $\cos(\theta)$ paramétert a felületen állandónak tartva, x tengely mentén átlagoltuk. Az említett ábrán megfigyelhető a nedvesítés ($\theta = 0.16, \theta = 0.62, \theta = 0.91$ paraméterek esetén) és a nemnedvesítés ($\theta = 2.06, \theta = 2.35, \theta = 2.6, \theta = 3.03$ esetén) folyamata is. Ezen kívül vizsgáltuk a másik paraméterünk, a kapilláris hossz inverzének, a hatását a rendszerre. A paramétert $[10^{-5}, 10]$ intervallumban változtattuk, miközben a $\theta = 0.16$ állandó értéket vettük fel és megfigyeltük, hogyan alakul a folyadék felületének alakja (lásd 2.4b).

Ezután a felületre más nedvesítési szöggel jellemzett függőleges sávokat raktunk különböző sűrűséggel. Ezeknek a sávoknak a koncentrációját c_i -vel jelöltük. Ebben az esetben a felületnek a xOz síkra vetített metszetét néztük, hogy a hármasonal alakját tudjuk megfigyelni, ez a 2.5. ábrán látható. Az ábrán a hármasonalakra alkalmaztunk egy 0.2 értékkel való eltolást, z irányba, hogy megfelelően láthatóak legyenek. Ebben az esetben csak a nedvesítés esetét néztük, a nedvesítési szöveget $\theta = 0$ -nak választottuk.

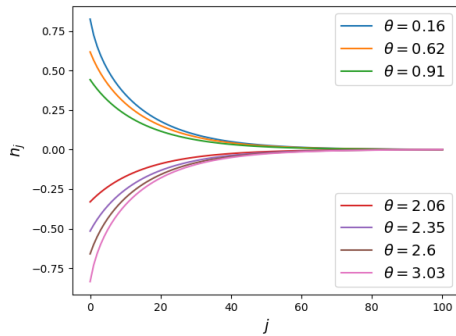
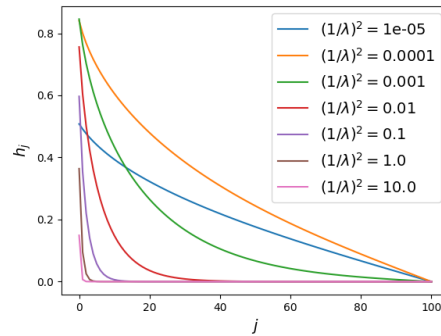
Végül mértük a h_0 magasságot különböző paraméterek esetén, ennek eredményeit a 2.6. ábra

(a) A rendszer $t = 0$ időpillanatban(b) A rendszer $t = 100$ időpillanatban(c) A rendszer $t = 500$ időpillanatban(d) A rendszer $t = 1600$ időpillanatban(e) A rendszer $t = 8000$ időpillanatban(f) A rendszer $t = 164600$ időpillanatban

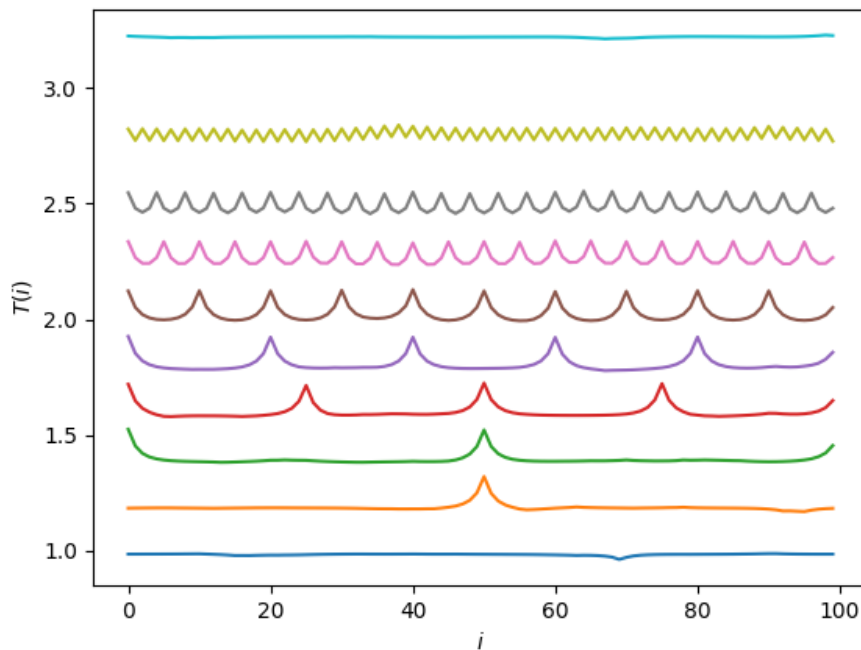
2.3. ábra. A folyadék viselkedése a szimuláció során

foglalja össze. A hármasonnal magasságának elméleti értékét a kapilláris elmélet adja [15]:

$$h_0^2 = \left(\frac{2\gamma_{LG}}{\rho g} \right) (1 - \sin(\theta)) \quad (24)$$

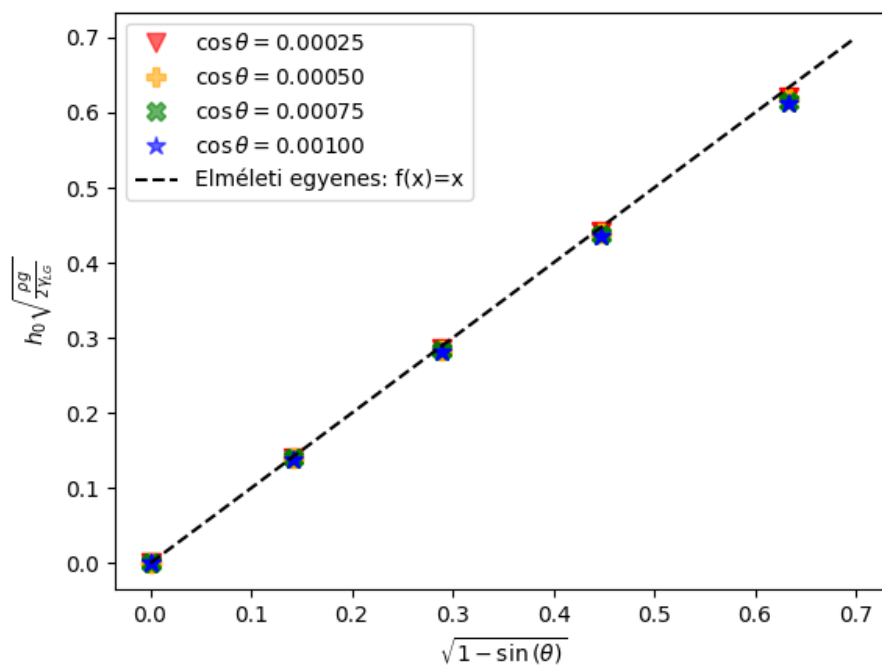
(a) A $\cos(\theta)$ paraméter változtatása esetén(b) A $(1/\lambda)^2$ paraméter változtatása esetén

2.4. ábra. A felmászó folyadék viselkedése függőleges felülettel való találkozás esetén



2.5. ábra. Lentől felfele nézve a sávok koncentrációja: $c_1 = 0$, $c_2 = 0.01$, $c_3 = 0.02$, $c_4 = 0.04$, $c_5 = 0.05$, $c_6 = 0.1$, $c_7 = 0.2$, $c_8 = 0.25$, $c_9 = 0.5$, $c_{10} = 1$

Ezen eredményünk nem talál az elmélettel, ugyanis a mi esetünkben a pontok egymás alá estek. Ezen eltérés részletesebb megvizsgálása céljából nagyobb felbontású szimulációkat is futtatunk, amelyek képesek voltak redukálni az eltérést, ezért feltételezzük, hogy a felbontás további növelése esetén teljesen kiküszöbölődne ezen probléma (a felbontás növelése folyamán az a értékünket 1-ről 0.5-re cseréltük).

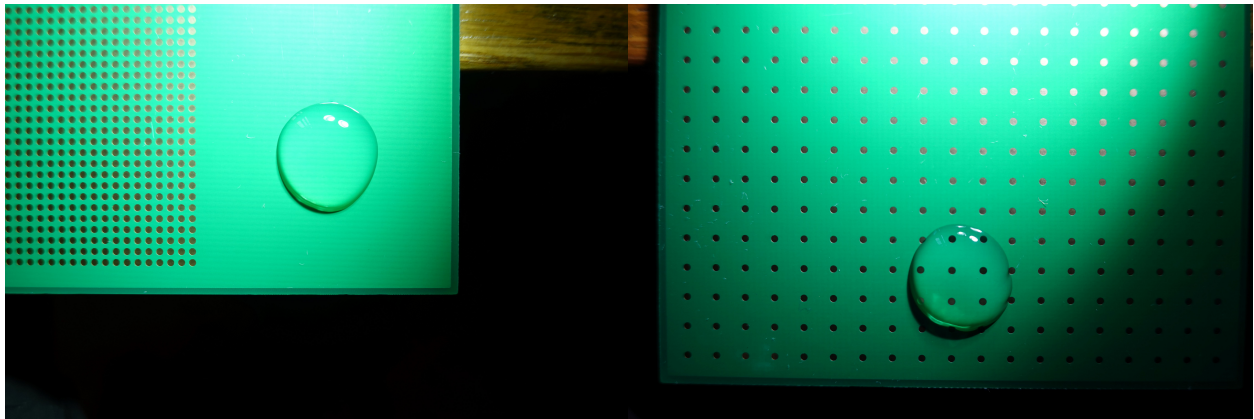
2.6. ábra. $h_0(\rho g/2\gamma_{LG})^{1/2}$ a $\sqrt{1 - \sin(\theta)}$ függvényében

3. Folyadék hármasonalának kísérleti vizsgálata

A kísérlet folyamán egy vízcsepp hármasonalát tanulmányoztuk különböző inhomogén felületeken. Öt típusú felületünk volt: egy homogén (pöttyök nélküli) és négy olyan felület, amelyen különböző sűrűséggel pöttyök voltak megtalálhatóak. Ezeket a felületeket megszámoztuk a felületen található pöttyök sűrűségének függvényében, hogy könnyebb legyen az átláthatóság: 1-es szám jelöli a legkevésbé sűrű, azaz a sima felületet, és 5-ös szám jelöli a legsűrűbbet. Felületként PCB lapokat használtunk, ezeken a pöttyöket arany bevonatokkal látták el. A kísérlet során ugyanakkora térfogatú cseppeket vizsgáltunk az öt különböző felületen. A cseppek térfogatát egységesen $V = 300\mu\text{l}$ -nek választottuk, amelyet állandónak tartottunk végig a kísérletek folyamán; ezt a térfogatot pedig egy mechanikus pipetta segítségével mértük.

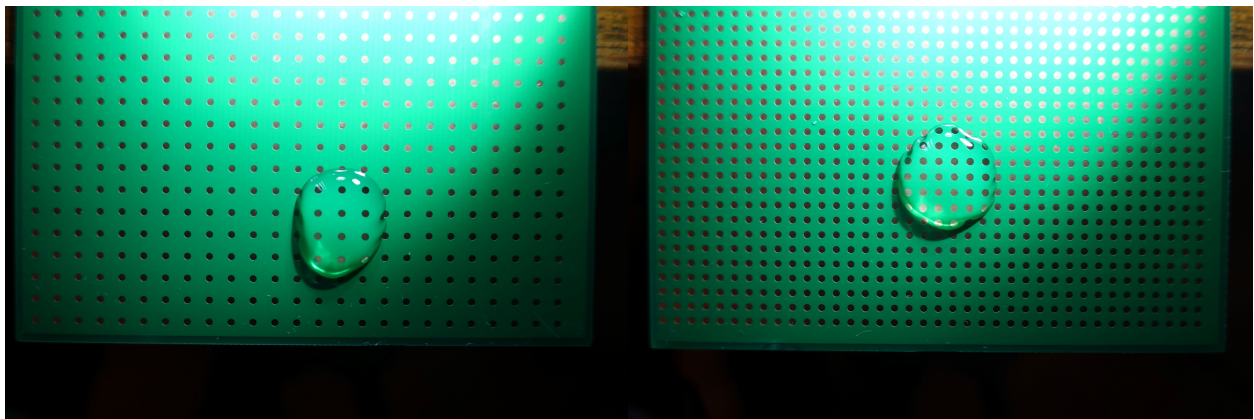
A mérési megfigyelések rögzítése egy kamera segítségével történt, amelyet a felületre merőlegesen helyeztünk el, az esetleges torzítások minimalizálása céljából (lásd 3.1. ábra). A felület és a kamera közötti távolságot a kísérletek során rögzítettük (9.8 cm), hogy megkönnyítsük az utólagos feldolgozását a képeknek, mert így a cseppek méretarányosak maradnak.

Az adatfeldolgozás folyamán a cseppek hármasonalát kerestük, amelyet a pöttyök konfigurációjával együtt mentettünk el (lásd 3.2. ábra). Ehhez első lépésben a képeket fekete-fehérré konvertáltuk a nagyobb kontraszt eléréseért. Ezután az Inkscape program (<https://inkscape.org/>) segítségével kézzel berajzoltuk a hármasonalakat és az érintett arany pöttyök körvonalát. Ezeket a kész hármasonalakat és pöttyöket képként kimentettük. Egy Python program segítségével digitalizáltuk a hármasonal-képeinket, amely folyamán a pöttyöket koordináták párok és sugarak sorozataként mentettük el, míg a hármasonal pontokra bontottuk fel, azért, hogy megvizsgáljuk, hol metszi egy arany pötty az útját. A feldolgozott hármasonal pontjaihoz koordinátákat rendeltük, amelyeket egy külön fájlba mentettünk el. A koordinátapárok mellett egy harmadik oszlopba a pont azon tulajdonságát helyeztük, miszerint rajta van vagy sem az arany pöttyök egyikén. A digitalizálás során fontos szempont volt, hogy az arany pöttyök és a hármasonal koordinátarendszere megegyezzen, így később is fel tudtuk használni ezeket az eredményeket.



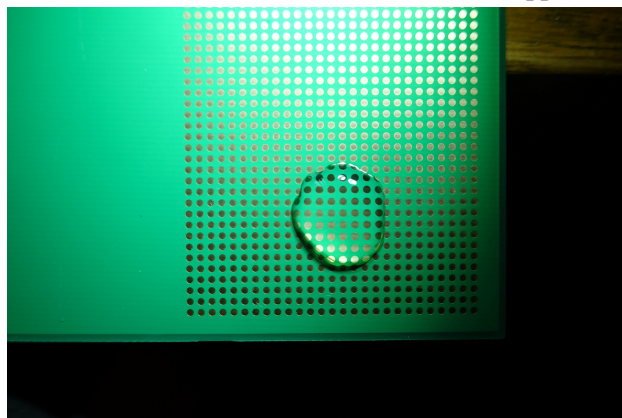
(a) Csepp az 1-es számú felületen

(b) Csepp a 2-es számú felületen



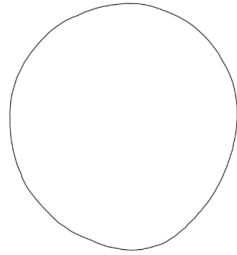
(c) Csepp a 3-as számú felületen

(d) Csepp a 4-es számú felületen

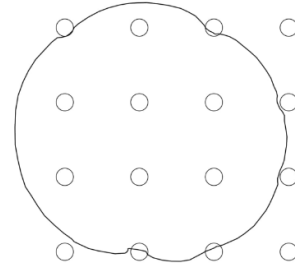


(e) Csepp az 5-ös számú felületen

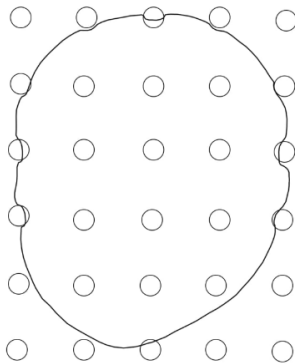
3.1. ábra. Cseppek alakja különböző felületeken



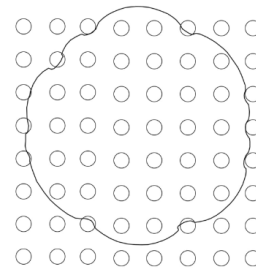
(a) Csepp az 1-es számú felületen



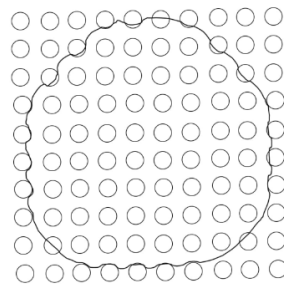
(b) Csepp a 2-es számú felületen



(c) Csepp a 3-as számú felületen



(d) Csepp a 4-es számú felületen



(e) Csepp az 5-ös számú felületen

3.2. ábra. Cseppek hármasonala különböző felületeken

4. Folyadék hármasonalának szimulációs vizsgálata

4.1. A szimulációs módszer

A szimuláció lényege különböző felületeken állandó V_0 térfogatú cseppek minimális energiakonfigurációjának megtalálása volt, ehhez két lépéses Monte Carlo módszert használtunk [11]. A szimuláció első része az Monte Carlo módszer alapvető elemeit tartalmazta, míg a második részében pedig a vizsgált folyadéknak különböző hármasonalait vizsgálta. Vettünk egy V_0 térfogatot, amelyet egy R sugarú körön belül random eloszlással, N apró egységre bontva eloszlattunk egy $L \times L$ -es rácson (esetünkben $L = 150$ mérettel dolgoztunk), így mindegyik rácspontnak lett egy h_{ij} magassága. Első lépésben ezt az R sugarú kört tekintettük hármasonalnak, amely körbehatárolta a folyadékunkat. Ezután minden lépés folyamán kiválasztásra került egy random $[i, j]$ koordinátájú rácspont, aminek kiszámoltuk a kezdeti energiáját. Optimalizációs megfontolások alapján nem az egész rendszer energiáját számoltuk ki, csak a megfelelő rácspontokét, amelyeket a 4.1. táblázat foglal össze.

4.1. táblázat. Az energia számolásához szükséges rácspontok

$i-1, j-2$	$i-1, j-1$	$i-1, j$	$i-1, j+1$
$i, j-2$	$i, j-1$	i, j	$i, j+1$
$i+1, j-2$	$i+1, j-1$	$i+1, j$	$i+1, j+1$
$i+2, j-2$	$i+2, j-1$	$i+2, j$	$i+2, j+1$

Energia számolás után az $[i, j]$ koordinátájú pontnak az alrácában, ami a $h_{i,j}$, $h_{i+1,j}$, $h_{i,j-1}$ és $h_{i+1,j-1}$ magasságokból áll, mindegyik rácspontnak kiszámolásra került a $k_{l,m}$ görbülete:

$$\kappa_{l,m} = h_{l+1,m} + h_{l,m+1} + h_{l-1,m} + h_{l,m-1} - 4h_{l,m} \quad (25)$$

A legkisebb görbületű rácspont magassága csökkentve lett egy random számmal a $(0, dh)$ intervallumból, és ugyanez a dh magasság a legnagyobb görbületű rácspont magasságához került hozzáadásra. Ha nem csak egy helyen volt a rácspont görbülete maximális vagy minimális akkor ezek közül egy-egy random módon kiválasztott rácsponton került elvégzésre a művelet. Ezután a végső energia számolása következett (ezesetben ugyanazokat a pontokat vettük figyelembe, mint a kezdeti energiánál) és vizsgáltuk $\Delta E = E_f - E_i$ energiakülönbség előjelét. Amennyiben $\Delta E < 0$, akkor elfogadjuk a magasságváltoztatást, míg ha $\Delta E > 0$, abban az esetben $\exp\left(\frac{-\Delta E}{kT}\right)$ valószínűséggel fogadtuk el a magasságváltozást. Ezt a folyamatot megismételtük

L^2 alkalommal, majd csökkentettük a T hőmérsékletet. A Monte Carlo második lépésének lényege, hogy megtalálja azt az R sugarú kört, ahol ha a hármason lerögzítődik, akkor globális energiaminimumot kapunk. Ezt úgy valósítottuk meg, hogy elindulva egy R_{min} sugárról lépésenként növeltük a sugár értékét, egészen egy R_{max} sugárig, majd utólagosan megkerestük azon értéket, amely esetén a szimulációban a teljes energia minimális volt.

A rendszert leíró Hamilton függvény a 2. fejezethez hasonlóan vezethető le, ugyanúgy három energiategyből áll (gravitációs helyzeti energia tag és két felületi energia tag: egy ami a folyadék és a levegő között lép fel és egy ami a folyadék és a felület között jelenik meg). A 2. fejezetben használt Hamilton függvénytől a most bevezetett függvényünk több pontban is eltér: a felületi energiát, amely a felület és folyadék között lép fel, csak a hármason mentén számoljuk és a másik felületi energia tagra, ami a felület és a levegő között lép fel, ez a szimuláció egy bonyolultabb formulát alkalmaz, amely pontosabb eredményt ad. Ezek alapján a Hamilton függvény a következőképpen alakul:

$$\begin{aligned} \frac{H}{\gamma_{LG}a^2} = \sum_{i,j} \delta \left(\frac{h_{ij}}{a} \right) \cos(\theta_{ij}) + \frac{1}{4} \sum_{i,j} [F_{ij}(i+1, j; i, j+1) + F_{ij}(i-1, j; i, j-1) \\ + F_{ij}(i+1, j; i, j-1) + F_{ij}(i-1, j; i, j+1)] + \frac{\rho g a^2}{2\gamma_{LG}} \sum_{i,j} \left(\frac{h_{ij}}{a} \right)^2 \end{aligned} \quad (26)$$

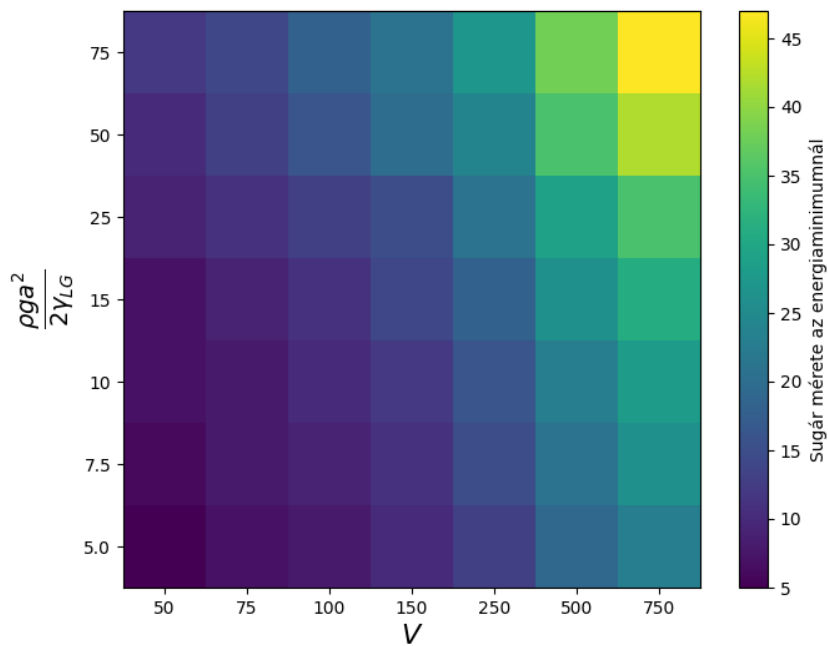
ahol

$$F_{xy}(a, b; c, d) = \bar{\delta} \left(\frac{h_{xy} + h_{ab} + h_{cd}}{a} \right) \left(1 + \left(\frac{h_{xy} - h_{bc}}{a} \right)^2 + \left(\frac{h_{xy} - h_{de}}{a} \right)^2 \right)^{1/2} \quad (27)$$

$$\delta(x) = \begin{cases} 1, & \text{ha } x = 0 \\ 0, & \text{ha } x \neq 0 \end{cases} \quad (28)$$

$$\bar{\delta}(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } x = 0 \\ 1, & \text{ha } x \neq 0 \end{cases} \quad (29)$$

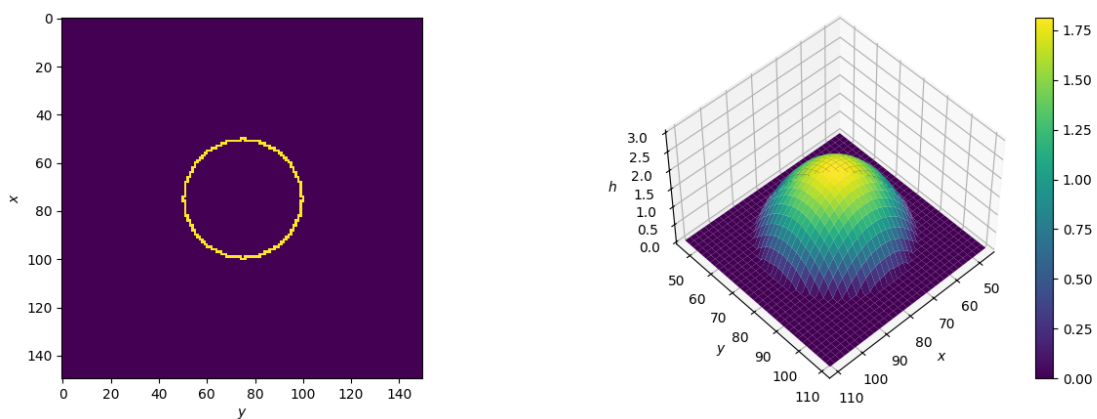
A szimuláció során az a rácsállandót egynek inicializáltuk. Két paraméterünk volt, amit a szimuláció során változtattunk: a $\left(\frac{1}{\lambda}\right)^2 = \frac{\rho g}{2\gamma_{LG}}$ kapilláris hossz inverzének négyzete és a $\cos(\theta)$ a nedvesítési szög \cos -a. A 4.1. ábrán látható a két paraméter változtatása során kapott globális energiaminimumokhoz tartozó sugár.



4.1. ábra. A globális energiaminimumhoz tartozó sugár mérete a térfogat és az $(a/\lambda)^2$ paraméter függvényében

4.2. Szimulációs eredmények

Első lépésben homogén felülettel dolgoztunk, megfigyeltük ebben az esetben különböző V_0 térfogatok esetén a csepp felületének alakját és a minimális energiánál a kör alakú csepp R sugarának nagyságát. Ezek a 4.2. ábrán láthatóak.



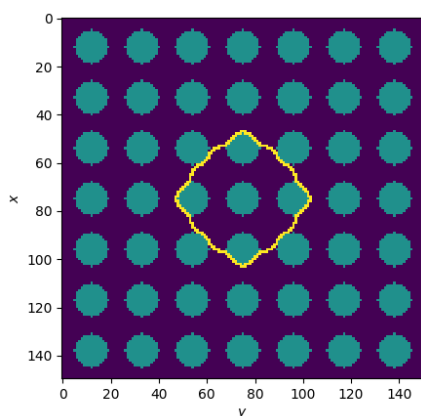
(a) Homogén felület esetén a csepp hármassvonala

(b) Homogén felület esetén a csepp alakja

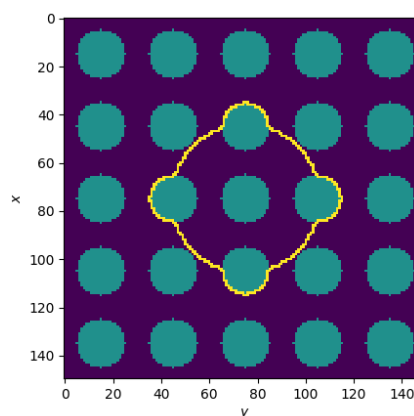
4.2. ábra. Csepp alakja homogén felületen $V_0 = 2000$, $(\frac{1}{\lambda})^2 = 1.0$, $\cos(\theta) = 0.6$ esetén

Olyan eseteket is vizsgáltunk, amelyeknél a felület nem volt homogén. Az volt a célunk, hogy a 3. fejezetben bemutatott kísérleti eredményekkel összehasonlítsuk a szimulációs megközelítést.

Ehhez létre kellett hoznunk egy pöttyözött felületet, amelyet használhatunk majd a szimulációnk folyamán. Ebben az esetben a pöttyöknek más volt a nedvesítési szöge, mint a nem pöttyözött részen. A szimuláció során a pöttyöknél $\cos(\theta) = 0.6$ volt és a nem pöttyözött részen pedig $\cos(\theta) = 0$ lett. Először csak olyan folyadék cseppekkel dolgoztunk, amelyek szimmetrikusak voltak a felületre nézve. Itt a felület megváltoztatta a hármasonalát, ezért a következő módon jártunk el: adott volt egy V_0 térfogatú és R sugarú, kör alakú csepp, mivel a csepp szimmetrikus volt a felületre nézve, elegendő volt csak egy negyedkörrel dolgozni. A cseppet ráhelyezve a felületre, megvizsgáltuk, hogy a negyedkör hol metszi a pöttyöket. Ha a folyadék a pöttynek több, mint a felét befedte, akkor a hármasonalát eltoltuk a pötty szélére, úgy, hogy a folyadék teljesen eltakarhassa a pöttyöt, ellenkező esetben pedig teljesen kikerülhesse a pöttyöt a folyadék. A 4.3. ábrán látható a hármasonalát változása a pöttyök sűrűségének változtatása függvényében.



(a) $V_0 = 2000$, $(\frac{1}{\lambda})^2 = 1.0$, $\cos(\theta) = 0.6$

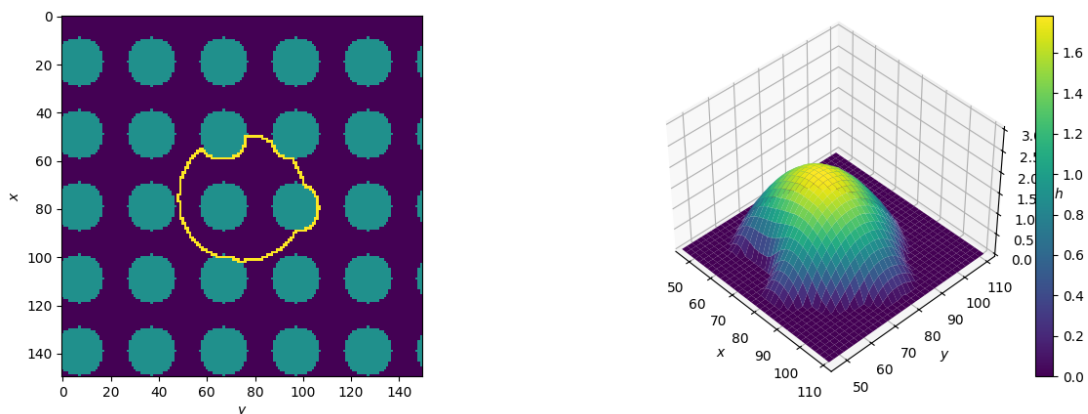


(b) $V_0 = 3000$, $(\frac{1}{\lambda})^2 = 1.0$, $\cos(\theta) = 0.6$

4.3. ábra. Hármasonalát alakja különböző sűrűséggel pöttyözött felületeken

Az előző szimulációval ellentétben, a folyadék inicializálása a sima felületen kialakult cseppformát vette alapul. A szimuláció folyamán ügyeltünk arra, hogy a csepp V_0 térfogatát állandónak tartjuk, így abban az esetben, amikor a hármasonalát kikerülte a cseppet, a maradék folyadékot, ami a hármasonalát kívülre került, visszahelyeztük a csepp középebe. A Monte Carlo módszer további része megegyezett az előzőekben leírt módszerrel.

Néztünk olyan eseteket is, amikor a folyadék csepp nem volt szimmetrikus a felületre nézve. Itt az egész cseppel végeztük azokat a műveleteket, amelyeket már fentebb leírtunk a negyedkörre nézve. Ebben az esetben is az inicializálás során a folyadék csepp örökölte sima felületről a megfelelő paraméterű csepp alakját. A 4.4. ábra szemlélteti az inhomogén felületen létrejövő csepp alakját és hármasonalátát.

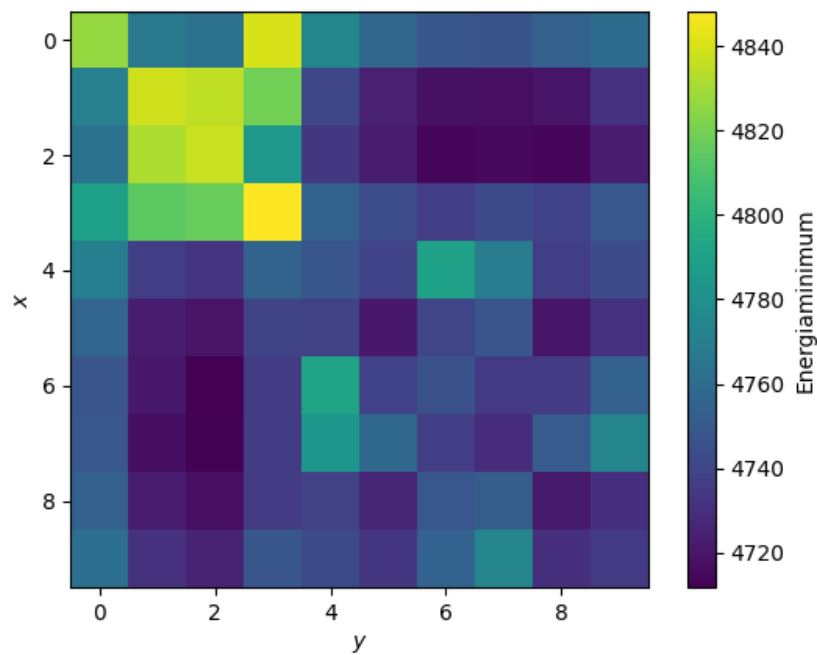


(a) Inhomogén felület esetén a csepp hármasonala (b) Inhomogén felület esetén a csepp alakja

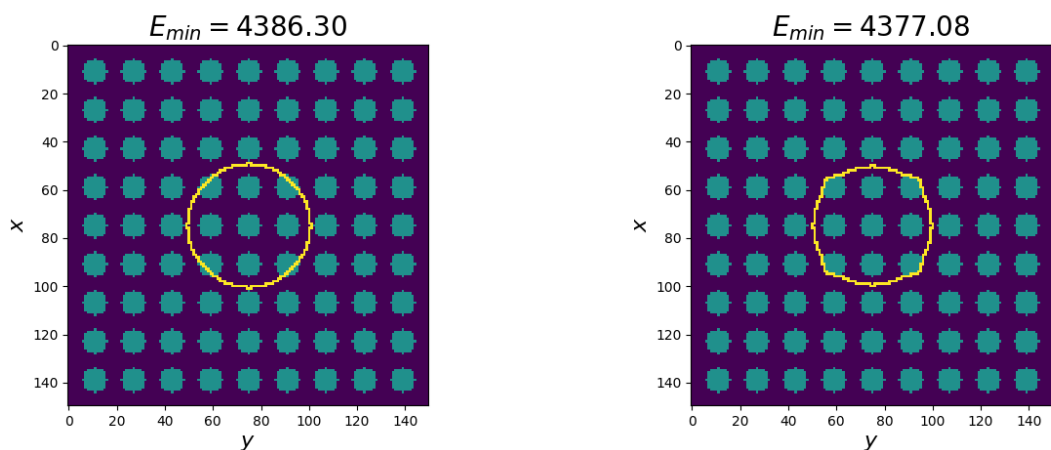
4.4. ábra. Csepp alakja inhomogén felületeken $V_0 = 2000$, $(\frac{1}{\lambda})^2 = 1.0$, $\cos(\theta) = 0.6$ esetén

A felületet tolvá a csepp alatt, egy perióduson keresztül pásztáztuk a cseppet energetikai szempontból. Minden eltolásra megnéztük, hogy mennyi a globális energiaminimum. Ezeket a minimumokat ábráztuk a 4.5. ábrán. Az ábrán látható, hogy vannak területek, ahol az energia "beminimalizálódik". Ez annak köszönhető, hogy a felület eltolásával olyan konfigurációk jöhetnek létre, amelyek kedvezőbbek a csepp hármasonalának alakulása szempontjából, így az energia is kisebb lesz. Ha nézzük az első szögfelező menti szimmetriát, akkor észrevehető, hogy a kapott ábra szinte teljesen szimmetrikus. Erre számítottunk, mivel a tér homogén az x és y irányra nézve, így ebben az irányokban az eltolás egyenértékű. Ennek ellenére a folyadék csepp sosem lett teljesen szimmetrikus a felületre nézve, így a hármasonal sem lett szimmetrikus minden esetben, ami így energiakülönbséget hozott be.

Összehasonlítottuk a két esetben (sima felület és a pöttyözött felület esetén) a kapott eredményeket. Megnéztük, hogy energetikai szempontból valóban előnyösebb-e a cseppnek kikerülni a pöttyöket. Ezt úgy tettük, hogy kiszámoltuk a teljes energiát két esetben, amikor a pöttyökön átmegy a hármasonal és amikor kikerüli azokat. Mindkét esetben az energiaminimum pillanatát tekintettük. Az esetek döntő többségénél teljesült az a feltételezés, hogy a cseppnek az energiaminimalizált állapotában kisebb lesz az energiája abban az esetben, ha kikerüli a pöttyöket a hármasonal. A 4.6. ábrán megfigyelhető, hogy a cseppnek valóban előnyösebb úgy helyezkednie, hogy a hármasonal kikerülje a pöttyöket. Az így kapott energiakülönbség $\Delta E = 9.22$ volt.



4.5. ábra. A globális energiaminimumok a felület különböző eltolásainak esetében

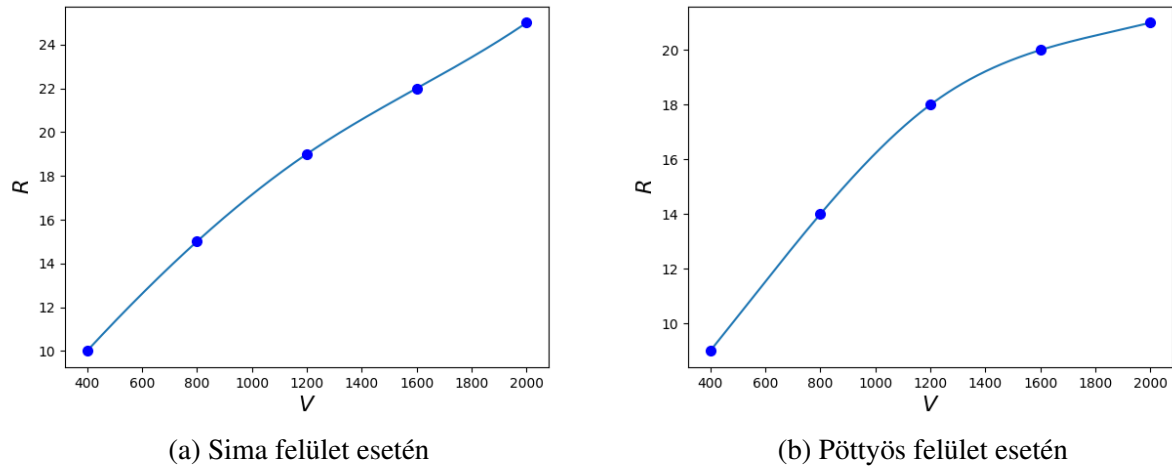


(a) Ha a hármasonal nem kerüli ki a pöttyöket

(b) Ha a hármasonal kikerüli a pöttyöket

4.6. ábra. Az energia függése a hármasonal alakjától

Két esetben vizsgáltuk a globális energiaminimumhoz tartozó sugár és a térfogat közötti kapcsolatot. Elsősorban a sima, pöttyök nélküli felület esetét vizsgáltuk, amely a 4.7a. ábrán látható szinte lineáris függést eredményezett. Emellett megnéztük, hogy abban az esetben amikor a folyadék csepp szimmetrikus a felülettel, hogy változik ez a függés, ennek eredménye a 4.7b. ábrán látható, mely esetben már nem lineáris függést kapunk.



4.7. ábra. Az ennergiaminimumhoz tartozó sugár térfogattól való függése

Össze akartuk hasonlítani a kísérletet a szimulációval. Ennek érdekében a kísérletben a digitalizált fájlok segítségével megkerestük azokat a pontokat amik arany pöttyön vannak, ezeket megszámláltuk és hasonló módon megkerestük azokat a pontokat amik nincsenek pöttyökön, ezeket is megszámlálva. Ezt a két összeget elosztottuk egymással, így megkapva a keresett arányt. Ezek az arányok a 4.2. táblázatban olvashatóak az arany pöttyök sűrűségének függvényében (a legkevesebb pöttyöt tartalmazó felülettől nézve a legsűrűbben pöttyözöttig):

4.2. táblázat. Kísérleti eredmények

1.	2.	3.	4.
0.11	0.20	0.37	0.52

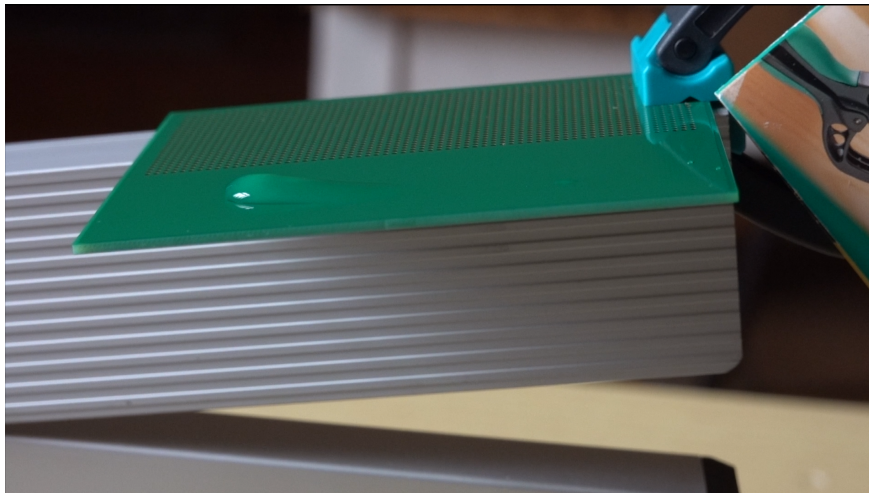
Mivel a szimuláció úgy lett megoldva, hogy a pöttyöket kikerülje vagy teljesen befördje a folyadék, ezért ebben az esetben úgy számoltuk ki az előzővel egyenértékű arányt, hogy a hármasonnal azon részeit tekintettük pöttyön levőnek, ami közvetlen szomszédja volt a pöttynek. A két arányt akartuk összehasonlítani, ehhez szükségünk volt a szimulációt megfoghatóbbá tenni. Ennek érdekében a felületet megváltoztattuk (a pöttyök kisebbek lettek, a közöttül levő távolság megnőtt) és a térfogatot megnöveltük. Ebben az esetben a szimuláció révén kapott arányok $(\frac{1}{\lambda})^2 = 1.0$ és $\cos(\theta) = 0.6$ paraméterek esetén: 0.49, ha $V_0 = 2800$ és 0.32, ha $V_0 = 3200$. Ezek alapján elmondhatjuk, hogy a szimulációs eredményeink a kísérletekkel összevethetőek, nagyságrendileg az arányok megegyeznek a kísérletben és a szimulációban.

5. Különböző felületek hatása a folyadék viselkedésére

Eredeti célunk az volt, hogy megfigyeljük a hármasonal viselkedését, abban az esetben amikor egy arany pöttyökkel ellátott felületet folyadékba mártunk, majd lassan és kontrollált módon kiemelünk a folyadékból. A lassú, kontrollált kiemelést egy lineáris motor végezte, ezen kívül rendelkezésünkre állt egy szervó motor, aminek a segítségével felületnek a dőlésszögét tudtuk állítani. Folyadékként desztillált víz és glicerin keveréket használtunk, amely előnye a tiszta desztillált vízhez képest, hogy az arany pöttyök jobban megfogják, így láthatóbbá téve a hármasonal viselkedését. Opció volt az etil-alkohol használata is, de azt a kísérleti körülmények miatt hamar elvetettük, mivel hamar elpárolgott, ezzel gyorsan változtatva a keverék koncentrációját. A hármasonal viselkedésének rögzítésére több eszközt is kipróbáltunk, de egyik esetben sem kaptunk tisztán és szépen látható eredményt. Először kamerás felvételkedészítés mellett döntöttünk, de a videókon a folyadék áttetszősége miatt nem volt jól elkülöníthető a hármasonal, annak ellenére se, hogy megpróbáltunk a folyadékba fluoreszcens anyagot keverni a jobb láthatóság érdekében. A következő és egyben végső próbálkozás során hőkamerát vetettünk be, a vizet felmelegítve, a meleg folyadék nagy kontrasztot mutatott az infravörös kamerával készített videókon, de még ez sem volt elég a hármasonal rögzítéséhez. Látszólag a lineáris motornak a kiemelési sebessége túl kicsi volt, így amire kiemeltük a felületet a folyadékból, addigra a felületről a folyadék távozott (amikor kézzel húztuk ki gyorsan a folyadékból, akkor megfigyelhető volt a hármasonal, de ez esetben problémák adódnak a reprodukálhatósággal).

Ezért más módszerhez kellett folyamodjunk a hármasonal megfigyeléséhez pöttyözött felületen. Kíváncsiak voltunk, hogy a felületen található hibák mennyire akadályozzák, fogják fel a folyadékot. Ezen gondolat mentén tehát átdolgoztuk a kísérletünket új célként kitűzve, hogy a cseppek sebességét meghatározzuk különböző paraméterek esetén. A kísérlet megvalósításához az 5.1. ábrán látható berendezést állítottuk össze. A felületet csipesz segítségével egy digitális szögmérőre rögzítettük.

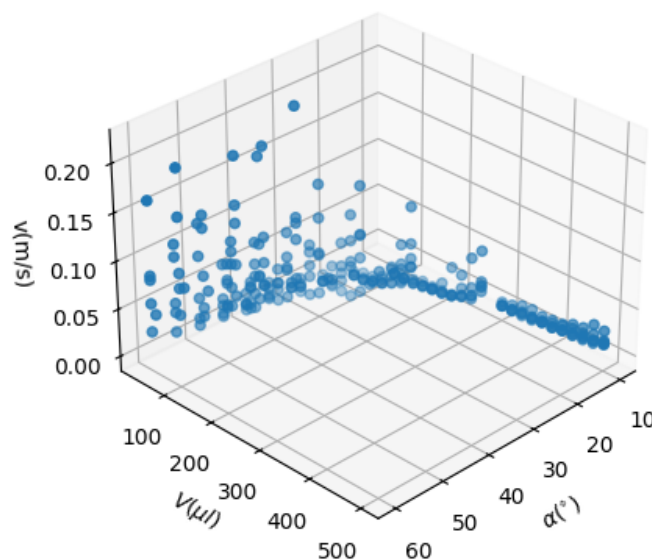
Három paramétert változtattunk: a cseppek térfogatát, a felület dőlésszögét és felület topológiáját (a felületen lévő arany pöttyök sűrűségét). A kísérlet során a cseppek által megtett távolság ismert volt (mindig ugyanabból a pontból indítottuk és a felület végéig hagytuk lefolyni őket), tehát csak az út megtételéhez szükséges időt kellett meghatározni. A felület dőlésszögét 10° -tól egészen 60° -ig változtattuk. A csepp térfogatának változtatása függött attól is, hogy milyen folyadék térfogat esetén folyik le először a csepp. Voltak olyan eseteink, amikor a csepp térfogata túl kicsi volt, így nem indult el a felületen az adott csepp. Ahogy a 3. fejezetben is említettük, a felületeket megszámoztuk a felületen található arany pöttyök sűrűségének függvényében (1-es



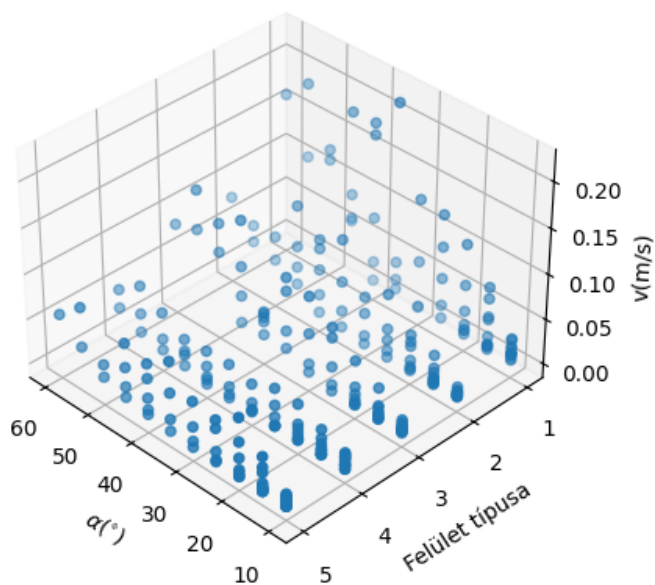
5.1. ábra. A kísérlethez használt berendezés

számmal jellemeztük a legkevésbé sűrű, azaz a sima felületet, 5-ös számmal pedig a legsűrűbbet).

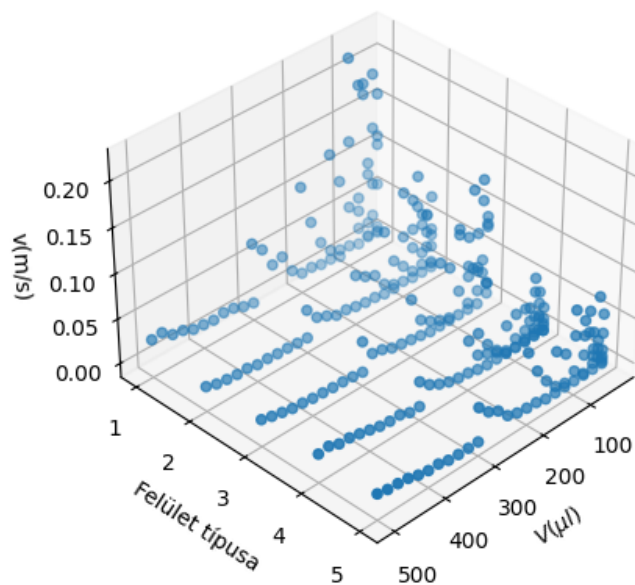
A számolt sebességeket a különböző paraméterek függvényében az 5.2., 5.3., 5.4. ábrákon ábrázoltuk. A kísérlet során megfigyelhetővé vált, hogy vannak olyan paraméterkombinációk, amelyre nem tudunk sebességet mérni. Ennek két oka volt: vagy túl gyorsan legurult a vízcsepp vagy pedig el sem indult. Az 5.4. ábrán jól látható, hogy minden felület esetén adott térfogatnál egy hirtelen sebességcsökkenés jelenik meg. Ez a jelenség azzal magyarázható, hogy bizonyos térfogatok felett ($\geq 300\mu l$) csak kis dőlésszögre (10°) mértünk, így ez kis sebességeket eredményezett.



5.2. ábra. A mért sebesség a csepp térfogatának és a felület dőlésszögének függvényében



5.3. ábra. A mért sebesség a felület dőlésszögének és a felületen található pöttyök sűrűségének függvényében



5.4. ábra. A mért sebesség a csepp térfogatának és a felületen található pöttyök sűrűségének függvényében

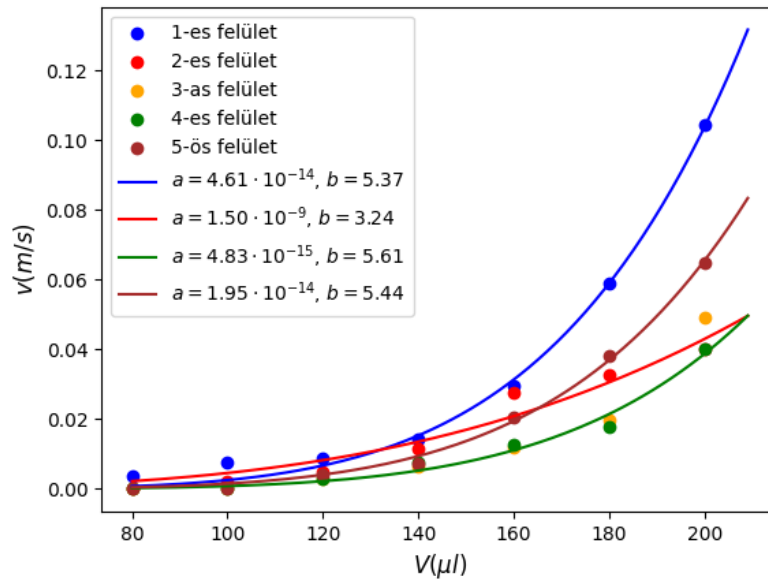
A felület dőlési szögének rögzítésével megfigyelhettük, hogy a különböző felületeken a csepp sebessége a csepp térfogatának függvényében hatványfüggvénnyel írható le. Az 5.5. ábrán látható

pontokra az

$$f(x) = a \cdot x^b \quad (30)$$

függvényt illesztettük, ahol az a és b paraméter a felület milyenségének függvényében változik.

Az 5.5. ábra esetén a dőlésszöget $\alpha = 20^\circ$ választottuk.



5.5. ábra. A csepp sebességének (v) ábrázolása a csepp térfogatának (V) függvényében

Következtetések

A dolgozat során nedvesítési és nem nedvesítési jelenségeket figyeltünk meg kísérletileg és szimulációk segítségével. Arra kerestük a választ, hogy egy pöttyözött inhomogén felület hogyan befolyásolja a folyadék cseppek viselkedését a felülettel való találkozás esetén. A szimuláció esetén megnéztük, hogy módszerünk mennyire tudta reprodukálni a kísérleti eredményeinket.

Kísérleteinkben megfigyeltük, hogy egy PCB felületen az arany pöttyök mennyire befolyásolják a vízcseppünk alakját, továbbá, hogy ugyanezen felületen, bizonyos a felületnek egy bizonyos dőlésszöge alatt egy vízcsepp lefolyásánál, mennyire akadályozták a felületi "hibák" a folyadék mozgását. Ehhez 5 különböző felületet használtunk és ez alapján megállapítottuk, hogy a cseppek sebessége átlagosan csökken a pöttyök sűrűségével. Ezen kívül a folyadék cseppek hármasonalának vizsgálatánál megfigyeltük, hogy a pöttyöket a vízcsepp általában vagy kikerüli vagy befedi teljesen, annak függvényében, hogy hol találkozik a hármasonal a pöttyel.

Két Monte Carlo módszerrel alapuló szimulációt mutattunk be: az egyik a folyadék viselkedését vizsgálta egy függőleges fal mellett, a másik pedig vízszintes felületen próbálta reprodukálni egy vízcsepp alakját. Az első esetben egy egyszerű Monte Carlo módszert implementáltunk és több féle (homogén és inhomogén) felületen néztük meg a hármasonalat illetve a folyadék alakját a felület közelében. A másik esetben egy kétlépéses Monte Carlo módszert alkalmaztunk egy vízcsepp alakjának meghatározására. A szimulációs eredményeket sikerült összehasonlítani a kísérleti eredményekkel, oly módon, hogy mindkét esetben kiszámoltuk a hármasonalnak a pöttyökön tartózkodó részének és a sima felületen tartózkodó részének arányát.

Hivatkozások

- [1] Thomas Young. „III. An essay on the cohesion of fluids”. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 95 (1805), 65–87. old. DOI: 10.1098/rstl.1805.0005.
- [2] Pierre-Simon de Laplace. *Mécanique céleste*. 10. köt. 1806.
- [3] P. G. de Gennes. „Wetting: statics and dynamics”. *Rev. Mod. Phys.* 57 (3 1985. júl.), 827–863. old. DOI: 10.1103/RevModPhys.57.827. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.57.827>.
- [4] J. Chappuis. „Multiphase Science and Technology”. *Multiphase Science and Technology*. Szerk. G. F. Hewitt, J. M. Delhay és N. Zuber. 1. köt. Washington, DC: Hemisphere, 1984. 4. feje., 387–494. old.
- [5] J.D Eick, R.J Good és A.W Neumann. „Thermodynamics of contact angles. II. Rough solid surfaces”. *Journal of Colloid and Interface Science* 53.2 (1975), 235–248. old. ISSN: 0021-9797. DOI: [https://doi.org/10.1016/0021-9797\(75\)90010-7](https://doi.org/10.1016/0021-9797(75)90010-7).
- [6] C. Huh és S.G. Mason. „Effects of surface roughness on wetting (theoretical)”. *Journal of Colloid and Interface Science* 60.1 (1977), 11–38. old. ISSN: 0021-9797. DOI: [https://doi.org/10.1016/0021-9797\(77\)90251-X](https://doi.org/10.1016/0021-9797(77)90251-X).
- [7] C.W. Extrand és Y. Kumagai. „An Experimental Study of Contact Angle Hysteresis”. *Journal of Colloid and Interface Science* 191.2 (1997), 378–383. old. ISSN: 0021-9797. DOI: <https://doi.org/10.1006/jcis.1997.4935>.
- [8] Rulon E Johnson, Robert H Dettre és Dale A Brandreth. „Dynamic contact angles and contact angle hysteresis”. *Journal of Colloid and Interface Science* 62.2 (1977), 205–212. old. ISSN: 0021-9797. DOI: [https://doi.org/10.1016/0021-9797\(77\)90114-X](https://doi.org/10.1016/0021-9797(77)90114-X). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002197977790114X>.
- [9] Kenneth A. Brakke. „The motion of a surface by its mean curvature”. 2015. URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:60751297>.
- [10] Jørgen Vitting Andersen és Yves Bréchet. „New macroscopic Hamiltonian for wetting of a solid by a liquid in the immersion geometry”. English. *Physical Review Letters* 73.15 (1994), 2087–2090. old. ISSN: 0031-9007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.73.2087.
- [11] Zoltán Néda és Yves Bréchet. „A two-step Monte Carlo method for wetting on heterogeneous surfaces”. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 5 (1999. jan.), 93. old. DOI: 10.1088/0965-0393/5/2/001.
- [12] Anton A. Darhuber, Sandra M. Troian és Sigurd Wagner. „Physical mechanisms governing pattern fidelity in microscale offset printing”. *Journal of Applied Physics* 90.7 (2001. okt.), 3602–3609. old. ISSN: 0021-8979. DOI: 10.1063/1.1389080.

- [13] A. Martin és tsai. „Spinodal dewetting of thin liquid films at soft interfaces”. *The European Physical Journal E* 3.3 (2000), 337–341. old.
- [14] H. Gau és tsai. „Liquid Morphologies on Structured Surfaces: From Microchannels to Microchips”. *Science* 283.5398 (1999), 46–49. old.
- [15] J.S. Rowlinson és B. Widom. *Molecular Theory of Capillarity*. International series of monographs on chemistry. Clarendon Press, 1982. ISBN: 9780198556428.

DECLARAȚIE PE PROPRIE RĂSPUNDERE

Subsemnatul, TUNYOGI KATA..., declar că Lucrarea de licență/diplomă/disertație pe care o voi prezenta în cadrul examenului de finalizare a studiilor la Facultatea de FIZICĂ..., din cadrul Universității Babeș-Bolyai, în sesiunea IVIE 2024, sub îndrumarea DR. NELSA SOLTAN, DR. TUNYOBI BOTOND..., reprezintă o operă personală. Menționez că nu am plagiat o altă lucrare publicată, prezentată public sau un fișier postat pe Internet. Pentru realizarea lucrării am folosit exclusiv bibliografia prezentată și nu am ascuns nici o altă sursă bibliografică sau fișier electronic pe care să le fi folosit la redactarea lucrării.

Prezenta declarație este parte a lucrării și se anexează la aceasta.

Data,

16.06.2024

Nume,

TUNYOBI KATA

Semnătură

Tunyo