

Исследование нанопузырьков на гидрофобной поверхности

Научный руководитель – Якунчиков Артем Николаевич

Латышева Татьяна Аркадьевна

Студент (специалист)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: fml1580@gmail.com

Экспериментально обнаружено, что на гидрофобных поверхностях, погруженных в жидкость, могут образовываться нанопузырьки газа, влияющие на силу сопротивления при обтекании таких поверхностей жидкостью [4]. Поэтому изучение данного явления является актуальной задачей.

В работе исследуется задача о нанопузырьке газа на гидрофобной поверхности, погруженной в воду, с помощью подходов молекулярно-динамического моделирования [1, 2]. Расчетная область представляет собой периодическую в двух направлениях ячейку. По направлению, которое не является периодическим с одной стороны располагается неподвижная структура, моделирующая поверхность твердого тела, состоящая из трех слоев атомов, расположенных согласно гранецентрированной кубической решетке. Ее 111-поверхность находится в контакте с жидкостью. С другой стороны располагается отталкивающая стенка, имитирующая давление в объеме воды. Для реализации взаимодействия между частицами выбраны специальные потенциалы. Для воды выбрана модель SPC flexible [3], которая учитывает внутримолекулярные взаимодействия, тем самым допуская движения атомов в молекуле друг относительно друга. Между собой молекулы взаимодействуют посредством потенциалов Леннард-Джонса и Кулона. Леннард-Джонсовский потенциал является короткодействующим, а потому может быть вычислен с достаточной точностью, будучи обрезанным на некотором коротком расстоянии. Потенциал Кулона является дальнедействующим и для того, чтобы учесть его корректно, необходимо учитывать действия на частицы со стороны дальних частиц. Это требует больших вычислительных затрат. Был разработан эффективный способ ускорения вычисления, основанный на разложении кулоновского потенциала в ряд Тейлора. Взаимодействия молекул воды с нижней стенкой из атомов и с верхней стенкой, имитирующей давление воды, моделируется с помощью потенциала Леннард-Джонса с соответствующими параметрами. С помощью разработанного метода исследовалась задача о течении слоя воды по поверхности твердого тела в присутствии и в отсутствии нанопузырька газа на границе контакта, оценивалось влияние нанопузырька на вязкое сопротивление при таком течении.

Источники и литература

- 1) Моисеева Е. Ф. , Марьин Д. Ф. , Малышев В. Л. , Гумеров Н. А. , Ахатов И. Ш. Исследование контактного угла и объема поверхностного нанопузырька методами молекулярной динамики, Матем. моделирование, 27:4 (2015)
- 2) Рапапорт Д.К. Искусство молекулярной динамики/ Пер. с англ. А.Н.Дьяконовой, под науч. ред. Р.Г.Ефремова. – М.: ИКИ, РХД, 2012. – 632 с.
- 3) Wu, Y.J., Tepper, H.L. & Voth, G.A. Flexible simple point-charge water model with improved liquid-state properties. J. Chem. Phys. 124, 024503/1-024503/12 (2006)
- 4) <http://www1.lsbu.ac.uk/water/nanobubble.html>