

---



---

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ  
И МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПРИБОРОСТРОЕНИИ**

---



---

УДК 532.612.4+532.612.3+532.61.096

© А. А. Евстапов, В. Е. Курочкин, Б. П. Шарфарец

## ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ МИКРОФЛЮИДНЫХ ПРОЦЕССОВ. УЧЕТ ПОВЕРХНОСТНЫХ СИЛ

Рассматриваются особенности учета сил поверхностного натяжения в микрофлюидике. Выписываются с учетом поверхностного давления краевые условия на границах раздела фаз между несмешивающимися жидкостями; жидкостями и твердыми телами. Рассматривается также эффект переноса вещества вдоль границы раздела двух сред, возникающий вследствие наличия градиента поверхностного натяжения (эффект Марангони), учитывается влияние температуры на силы поверхностного натяжения. Предлагается алгоритм, позволяющий оценивать коэффициент поверхностного натяжения на границе твердое тело—жидкость с учетом изменения температуры. Рассмотрен вопрос о капиллярной неустойчивости Рэлея—Плато. Подчеркивается важность этих аспектов при создании реальных микрофлюидных моделей с помощью вычислительных пакетов, а также физических моделей в интересах научного приборостроения.

*Кл. сл.:* микрофлюидика, поверхностные силы, поверхностное давление, эффект Марангони, капиллярная неустойчивость Рэлея—Плато

### ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в науке и практике большое распространение получило физическое и численное моделирование микрофлюидных процессов. В этих процессах доминирующую роль по сравнению с объемными силами начинают играть силы, связанные с поверхностными эффектами (см., например, [1]). Так, если принять за  $l$  характерный линейный размер физической модели процесса, то отношение поверхностных сил к объемным силам будет иметь порядок  $l^{-1}$  и будет неограниченно возрастать при  $l \rightarrow 0$  [1, с. 2]. Поэтому первостепенное внимание в таких процессах должно уделяться поверхностным силам, таким как силы поверхностного натяжения и вязкого трения. Хорошо известно, что как динамическая вязкость, так и коэффициент поверхностного натяжения достаточно сильно зависят от температуры. Кроме того, коэффициент поверхностного натяжения в значительной степени зависит от наличия и состава примесей в жидкостях.

Ранее в рамках работы [2] предпринималась попытка отчасти коснуться некоторых вопросов, связанных с практикой применения в расчетах поверхностных сил, однако основное внимание все же было уделено явлениям переноса.

В настоящей работе подробно рассмотрим особенности учета сил поверхностного натяжения в микрофлюидике применительно к необходимости решения практических задач научного приборостроения с точки зрения как физического, так и

численного моделирования соответствующих процессов.

### ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ НА ГРАНИЦАХ РАЗДЕЛА ФАЗ

Поверхностные явления на границе раздела фаз достаточно хорошо описаны в классических руководствах по теоретической физике (см., например, [3–6]). Ниже приведем ряд необходимых данных по этому вопросу, основываясь на этих работах.

#### Поверхностное давление, краевые условия

Если поверхность раздела двух сред искривлена, то вблизи нее давления в обеих средах различны. Эта разность давления называется поверхностным давлением [3, с. 333] и определяется в случае контакта двух неподвижных вязких жидкостей, либо в общем случае подвижных идеальных жидкостей формулой Лапласа [3, с. 334]

$$p_1 - p_2 = \alpha_{12} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right). \quad (1)$$

Здесь  $p_1$  — давление у заданной точки поверхности раздела в первой среде,  $p_2$  — во второй;  $R_1$  и  $R_2$  — главные радиусы кривизны в данной точке поверхности;  $\alpha_{12}$  — коэффициент поверхностного натяжения (суммарная удельная поверхностная энергия) двух граничащих друг с другом веществ (контакт сред с индексами 1 и 2).

**Замечание 1.** Строго говоря, нужно рассматривать суммарную поверхностную энергию  $\alpha_{12}$  двух граничащих друг с другом веществ. "Только если одно вещество газообразно, химически не реагирует с другим веществом и мало в нем растворяется, можно говорить просто о поверхностной энергии (или о коэффициенте поверхностного натяжения) второго жидкого или твердого тела" [6, с. 482, 483]. В этом случае говорят о коэффициенте поверхностного натяжения  $\alpha$  второго жидкого или твердого вещества, т. е.  $\alpha_{12} = \alpha$ .

Если считать, что  $R_1$  и  $R_2$  положительны, когда направлены внутрь первой среды, то из (1) видно, что из двух тел давление больше в той среде ( $p_1 - p_2 > 0$ ), поверхность которой выпукла. Если  $R_1 = R_2 = \infty$ , т. е. поверхность раздела плоская, то давления на границе раздела в каждой из сред одинаковы. Отметим, что для капли воды радиусом 10 мкм при температуре 25 °С давление Лапласа составляет ~0.144 атм, а для капли радиусом 10 нм уже 143.6 атм!

Приведем граничные условия на границе раздела двух фаз [3, с. 337]. Вначале полагаем, что обе фазы жидкие.

Если поверхностное натяжение не учитывается, то на границе двух движущихся жидкостей имеет место условие [3, с. 337]

$$n_k (\sigma_{ik}^{(2)} - \sigma_{ik}^{(1)}) = 0,$$

что выражает равенство сил трения, действующих на поверхности обеих жидкостей. Здесь  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$  — нормаль к поверхности раздела;  $\sigma_{ik}^{(l)}$  — тензор напряжений среды  $l$ ,  $l = 1, 2$ ;

$$\sigma_{ik}^{(l)} = -p^{(l)} \delta_{ik} + \sigma'_{ik}{}^{(l)},$$

$\sigma'_{ik}{}^{(l)}$  — тензор вязких напряжений фазы  $l$ , равный [3, с. 72]

$$\sigma'_{ik}{}^{(l)} = \eta \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) + \zeta \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l},$$

$\delta_{ik}$  — единичный тензор.

Здесь  $\eta$  и  $\zeta$  — коэффициенты динамической (сдвиговой) и объемной вязкости соответственно, в общем случае являющиеся функциями давления и температуры.

При учете поверхностного натяжения нужно в правой части добавить дополнительную силу, определяемую по величине формулой Лапласа (1) и направленную по нормали  $\mathbf{n}$  к поверхности раздела фаз внутрь первой фазы

$$n_k (\sigma_{ik}^{(2)} - \sigma_{ik}^{(1)}) = \alpha_{12} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) n_i,$$

или иначе

$$(p_1 - p_2) n_i = (\sigma'_{ik}{}^{(1)} - \sigma'_{ik}{}^{(2)}) n_k + \alpha_{12} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) n_i. \quad (2)$$

Выше по повторяющимся индексам предполагается суммирование. Как видно из (2), для случая движущихся жидкостей поверхностное давление может быть как выше, так и ниже соответствующего давления для неподвижных жидкостей в зависимости от знака величины  $\sigma'_{ik}{}^{(1)} - \sigma'_{ik}{}^{(2)}$ .

Если обе жидкости идеальные, то вязкие напряжения  $\sigma'_{ik}$  исчезают и (2) трансформируется к виду (1). Вязкие напряжения исчезают также в случае неподвижности обеих сопряженных вязких жидкостей, что следует из их математического определения (см. выше). В этом случае выражение (2) также трансформируется к статическому выражению (1).

Если первая фаза жидкая, а вторая представляет собой упругую среду, то выражение (2), очевидно, приводится к виду

$$p_1 n_i = (\sigma'_{ik}{}^{(1)} - \sigma_{ik}^{(2)}) n_k + \alpha_{12} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) n_i. \quad (3)$$

Здесь  $\sigma_{ik}^{(2)}$  — тензор напряжений упругой среды.

Второе необходимое условие на границе раздела фаз с участием вязких жидкостей заключается в равенстве векторов скоростей граничных точек каждой фазы на поверхности раздела фаз. Если имеется граница раздела жидкости и упругого тела или двух несмешивающихся жидкостей (или жидкости и газа), то скорости обеих фаз должны быть равны [3, с. 75]

$$\mathbf{v}_1|_S = \mathbf{v}_2|_S, \quad (4)$$

где  $S$  — поверхность раздела фаз. Наконец, если вязкая жидкость граничит с неподвижным твердым телом, то граничное условие для скорости жидкости на границе раздела фаз отражает т. н. условие прилипания жидкости к неподвижной твердой поверхности [3, с. 75]

$$\mathbf{v}_1|_S = 0. \quad (5)$$

Приведем выражения (2) и (3) применительно к случаю цилиндрической поверхности контакта с радиусом  $a = R_1$ : для двух жидкостей рассмотрим выражение (2); для жидкости (область 1) и твердого тела (область 2) — выражение (3).

В обоих случаях внутреннюю область занимает жидкость с индексом 1 (очевидно, что  $R_2 = \infty$ )

$$(p_1 - p_2)n_i = (\sigma_{ik}^{(1)} - \sigma_{ik}^{(2)})n_k + \alpha_{12} \frac{1}{a} n_i, \quad (2a)$$

$$p_1 n_i = (\sigma_{ik}^{(1)} - \sigma_{ik}^{(2)})n_k + \alpha_{12} \frac{1}{a} n_i. \quad (3a)$$

Соответствующие выражения для сферической поверхности контакта с радиусом  $a$  таковы:

$$(p_1 - p_2)n_i = (\sigma_{ik}^{(1)} - \sigma_{ik}^{(2)})n_k + \alpha_{12} \frac{2}{a} n_i, \quad (2б)$$

$$p_1 n_i = (\sigma_{ik}^{(1)} - \sigma_{ik}^{(2)})n_k + \alpha_{12} \frac{2}{a} n_i. \quad (3б)$$

### Коэффициент поверхностного натяжения — функция координат (эффект Марангони)

Условия (2), (3) требуют уточнения в случае, если коэффициент поверхностного натяжения  $\alpha$  является функцией координат, например, в случае наличия переменного поля температуры, от которой величина коэффициента  $\alpha$  существенно зависит. В этом случае выражение (2) трансформируется к виду [3, с. 338]

$$\left[ p_1 - p_2 - \alpha \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \right] n_i = (\sigma_{ik}^{(1)} - \sigma_{ik}^{(2)})n_k + \frac{\partial \alpha}{\partial x_i}. \quad (2в)$$

Отметим, что это условие справедливо только для вязких жидкостей [1, с. 338]. В случае невязких жидкостей слева в (2в) будет стоять вектор, нормальный к поверхности раздела фаз, а справа — вектор, касательный к ней, в силу равенства нулю вязких тензоров напряжения. Аналогичный диссонанс с размерностью возникнет в случае покоящихся жидкостей (тензоры вязких напряжений также в этом случае тождественно равны нулю). Отсюда следует, что скорости фаз не могут быть нулевыми при наличии градиента коэффициента поверхностного натяжения. При ненулевом градиенте поверхностного натяжения фазы приходят в движение.

Аналогично выражение (3) для случая, когда одна из фаз упругая, приводится к виду

$$\left[ p_1 - \alpha \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \right] n_i = (\sigma_{ik}^{(1)} - \sigma_{ik}^{(2)})n_k + \frac{\partial \alpha}{\partial x_i}. \quad (3в)$$

Как видно из выражений (2в), (3в), наряду с нормальным давлением на поверхности жидкости могут действовать тангенциальные силы, вы-

званные градиентом коэффициента поверхностного натяжения. Тангенциальная сила, отнесенная к единице поверхности, согласно [4, с. 378], равна (последний член справа в выражениях (2в) и (3в))

$$\mathbf{p}_t = \nabla \alpha.$$

Знак плюс перед градиентом означает, что сила  $\mathbf{p}_t$  стремится привести поверхность жидкости в движение в направлении от мест с меньшим поверхностным натяжением к местам с большим поверхностным натяжением. Вектор силы  $\mathbf{p}_t$ , как и градиент  $\nabla \alpha$  в каждой точке поверхности лежат в касательной к ней плоскости. Поэтому в последнем выражении градиент следует рассматривать на поверхности жидкости  $S$

$$\mathbf{p}_t = \nabla_s \alpha.$$

Причиной изменения поверхностного натяжения могут служить поверхностно-активные вещества, микро- и наночастицы, электрические поля на поверхности жидкости и т. д. Однако простейшей причиной, вызывающей изменение поверхностного натяжения на поверхности жидкости, может являться изменение температуры жидкости.

Под действием тангенциальных сил, действующих на поверхность жидкости, в ней начнется движение, которое называют капиллярной конвекцией [4, с. 383]. На практике так происходит, когда жидкость помещена в сосуд, стенки которого имеют различную температуру. Тогда и температура самой жидкости будет переменной, и, в частности, будет меняться температура жидкости на границе раздела жидкости с сосудом. Переменная температура стенок сосуда вызовет в жидкости наряду с капиллярной конвекцией также и обычное конвективное движение. Однако в случаях, когда поверхность жидкости достаточно велика по отношению к ее объему, капиллярная конвекция доминирует над обычной объемной конвекцией [4, с. 383]. Такое становится возможным в тонких капиллярах при большом отношении поверхности объема к самому объему, т. е. при доминировании поверхностных сил над объемными силами. Поскольку температурная зависимость коэффициента поверхностного натяжения может существенно зависеть от температуры (см. ниже), то можно записать

$$\nabla_s \alpha = \frac{\partial \alpha}{\partial T} \nabla_s T \quad \Rightarrow \quad \mathbf{p}_t = \frac{\partial \alpha}{\partial T} \nabla_s T.$$

Полученное выражение для касательного напряжения, вызванного температурным градиентом коэффициента поверхностного натяжения, следует учитывать в выражениях для краевых условий (2б) и (3б), как, впрочем, следует учитывать и движение

жидкости, вызванное капиллярной конвекцией.

В заключение, по-видимому, полезно привести вид оператора  $\nabla_s$ , например, в цилиндрических координатах. Как известно, оператор градиента  $\nabla$  в цилиндрических координатах  $(\rho, \varphi, z)$  имеет вид

$$\nabla\psi(\rho, \varphi, z) = \frac{\partial\psi(\rho, \varphi, z)}{\partial\rho}\mathbf{e}_\rho + \frac{1}{\rho}\frac{\partial\psi(\rho, \varphi, z)}{\partial\varphi}\mathbf{e}_\varphi + \frac{\partial\psi(\rho, \varphi, z)}{\partial z}\mathbf{e}_z.$$

Здесь  $\psi(\rho, \varphi, z)$  — некоторая, в данном случае скалярная, функция;  $(\mathbf{e}_\rho, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_z)$  — соответствующие единичные орты. Пусть рассматривается боковая поверхность цилиндра  $\rho = r_0 = \text{const}$ , где  $r_0$  — радиус цилиндра. Тогда в силу неизменности  $\rho$  градиент на поверхности  $\rho = r_0$  равен

$$\nabla_s\psi(r_0, \varphi, z) = \frac{1}{r_0}\frac{\partial\psi(r_0, \varphi, z)}{\partial\varphi}\mathbf{e}_\varphi + \frac{\partial\psi(r_0, \varphi, z)}{\partial z}\mathbf{e}_z,$$

а в случае осевой симметрии

$$\nabla_s\psi(r_0, z) = \frac{\partial\psi(r_0, z)}{\partial z}\mathbf{e}_z.$$

Для произвольной системы координат, где оператор  $\nabla_s$  рассматривается на координатной поверхности, действия аналогичны.

### О температурной зависимости коэффициента поверхностного натяжения

Одним из наиболее часто используемых соотношений, выражающих температурную зависимость коэффициента поверхностного натяжения жидкостей, является линейное соотношение Этвеша [7, с. 50, выражение (III-10)]:

$$\alpha_{f-g}(T)V^{2/3} = k(T_c - T), \quad (6)$$

где  $V$  — молярный объем, равный  $V = \frac{M}{\rho}$ ;  $M$  — масса моля вещества;  $\rho$  — его плотность;  $T_c$  — температура критической точки (в которой коэффициент  $\alpha_{f-g}$  обращается в нуль);  $T$  — температура жидкости;  $k = 2.1 \cdot 10^{-7}$  Дж/(К · моль<sup>2/3</sup>).

Применительно к воде, граничащей с воздухом, выражение (6) имеет вид [8]

$$\alpha(T) = 0.07275(1 - 0.002(T - 291)), \quad \left[ \frac{\text{Н}}{\text{м}} \right]. \quad (6a)$$

Как отмечено в упомянутой вики-статье [8], приведенная формула (6a) справедлива в диапазоне от 0 до 100 °С. Из формул (6), (6a) следует линейное снижение величины  $\alpha$  с ростом температуры. В диапазоне от 10 до 100 °С величина  $\alpha$  из (6a) уменьшается на 20 %. Это весьма существенно, например, для цилиндрических капилляров малого радиуса. Так, простейшее выражение (1) для цилиндрического капилляра  $R_1 = a$ ,  $R_2 = \infty$  преобразуется к виду

$$p_1 - p_2 = \frac{\alpha(T)}{a},$$

где  $a$  — радиус капилляра. При величине  $a = 5 \cdot 10^{-7}$  м (диаметр капилляра 10 мкм) при изменении коэффициента  $\alpha(T)$  в диапазоне 20 % величина зависимости  $[p_1 - p_2](T)$  будет меняться (также на 20 %) весьма значительно с порядком  $10^4 - 10^5$  Па ( $\square 0.1 - 1$  атм). Здесь, однако, следует иметь в виду, что в случае контакта воды со стеклом зависимость коэффициента поверхностного натяжения будет отличной от (6a) (см. ниже). Кроме того, при контакте жидкости с твердой фазой следует отдельно рассмотреть вопрос о влиянии продольного градиента коэффициента поверхностного натяжения с учетом эффекта прилипания на границе жидкость—твердое тело. Здесь скорее всего возникнет задача на учет эффектов пограничного слоя.

### Об определении коэффициента поверхностного натяжения на границе твердое тело—жидкость

Предлагаемая в настоящей работе процедура определения коэффициента поверхностного натяжения на границе твердое тело—жидкость основана на использовании значений хорошо известных в поверхностных явлениях величин. Складывается она из следующих шагов.

Согласно [9, с. 236], определение поверхностного натяжения твердых тел на границе с воздухом и жидкостями весьма проблематично. Тем не менее, в этой работе покажем существование возможности определения искомых коэффициентов поверхностного натяжения, например, через работу адгезии. Работа адгезии твердого тела  $W_{s-f}$  к жидкости, аналогичная работе адгезии  $W_{f_1-f_2}$  между двумя жидкостями, может быть легко измерена и представляет собой работу, которую нужно затратить против адгезионных сил для отрыва твердого тела от жидкости в направлении нормали к их поверхности раздела. Работа адгезии  $W_{s-f}$  между твердым телом и жидкостью равна [9, с. 236]

$$W_{s-f} = \alpha_{s-g} + \alpha_{f-g} - \alpha_{s-f}, \quad (7)$$

где  $\alpha_{s-g}$  и  $\alpha_{s-f}$  — поверхностные натяжения на границах твердого тела соответственно с газом и жидкостью, а  $\alpha_{f-g}$  — поверхностное натяжение жидкости на границе с газом. Сюда входит разность между двумя неизвестными величинами  $\alpha_{s-g} - \alpha_{s-f}$  — поверхностными натяжениями твердого тела с газом и жидкостью. Эта разность определяется величиной краевого угла  $\theta$ , который образуют твердое тело и жидкость в газе. Окончательно для работы адгезии  $W_{s-f}$  между твердым телом и жидкостью справедливо выражение [9, с. 237]

$$W_{s-f} = \alpha_{f-g} (1 + \cos \theta). \quad (8)$$

Отсюда следует возможность: после определения  $W_{s-f}$  из (8) определить из выражения (7) коэффициент поверхностного натяжения твердое тело—жидкость  $\alpha_{s-f}$  при условии, что коэффициент поверхностного натяжения твердое тело—газ  $\alpha_{s-g}$  известен.

Техника измерения краевого угла  $\theta$  приведена в [7, с. 362–372]. Техника определения коэффициента поверхностного натяжения  $\alpha_{s-g}$  приведена там же: п. 5. Experimental Estimates of Surface Energies and Free Energies [7, п. VII-5]. При этом в [7] указывается возможность получения температурной зависимости коэффициента  $\alpha_{s-g}$ , что позволяет получить соответствующую зависимость для коэффициента  $\alpha_{s-f}(T)$ .

Остановимся подробнее на методе определения коэффициента поверхностного натяжения  $\alpha_{s-g}$  на границе твердое тело—газ. Вначале приведем суть метода по публикации [7, с. 278]. По мнению авторов [7], существует единственная универсальная эмпирическая процедура оценки величины поверхностного натяжения твердых тел  $\alpha_{s-g}$  по соответствующему коэффициенту  $\alpha_{f-g}$ , полученному для них же, но в жидком состоянии. Она основана на известном факте, что твердое тело в окрестности температуры точки плавления имеет поверхностное натяжение на 10–20 % больше, чем оно же в окрестностях этой точки, но в жидком состоянии. Эта разница определяется отношением величин теплоты сублимации твердого тела к величине теплоты парообразования его же в жидком состоянии. Оценка поверхностного натяжения в точке плавления позволяет с помощью

уравнений, подобных (6) [7, (III-10)], произвести экстраполяцию в диапазон меньших температур.

**Замечание 2.** Испарение твердого тела (минуя фазу плавления) называется сублимацией. Законы сублимации вполне аналогичны законам испарения жидкостей [10, с. 503–504]. Теплота сублимации соответствует сумме теплоты плавления и теплоты парообразования. Теплота плавления (мольная) — количество теплоты, которое необходимо сообщить молю вещества в равновесном изобарно-изотермическом процессе, чтобы полностью перевести его из твердого кристаллического состояния в жидкое [11, с. 81]. Теплота парообразования (мольная) — количество теплоты, которое необходимо сообщить молю вещества в равновесном изобарно-изотермическом процессе для полного превращения жидкого вещества в пар [11, с. 81]. Отметим, что упомянутые величины табулированы и широко анонсированы.

**Замечание 3.** Изложенной в этом и предыдущем разделах информации достаточно для вычисления температурной зависимости коэффициента поверхностного натяжения на границе твердое тело—жидкость для тех конкретных пар жидкость—твердое тело, для которых известны из таблиц или могут быть вычислены по известным выражениям такие величины, как работа адгезии, краевого угла  $\theta$ , температура в точке плавления, теплота сублимации, теплота парообразования и температура критической точки.

Дополнительную информацию по теме "коэффициент поверхностного натяжения" см. в Приложении.

### О капиллярной неустойчивости Рэля—Плато

Говоря о явлении поверхностного натяжения, необходимо упомянуть о капиллярной неустойчивости струй. Открыто это явление было Плато (Plateau) в 1873 г. [12], а теоретически исследовано Рэлеем в 1878 г. [13]. Явление получило в научной среде название капиллярной неустойчивости Рэля—Плато и популярно описано, например, в работах [7, 14, 15].

Как потом стало ясно, теория Рэля оказалась адекватной для объяснения ряда других явлений, связанных с течением жидкости и влиянием на него поверхностного натяжения. Это такие явления, как явление неустойчивости Рэля—Тейлора, возникающей между двумя несмешивающимися жидкостями разной плотности, контактирующими на границе раздела; явление движения тонкой пленки покрытия цилиндрического стержня или волокна; образование капель в неплотно закрытых вентилях и ряд других.

После работы [13] теория устойчивости потоков вязкой несжимаемой жидкости была значительно развита. Ввиду общеизвестности этих теорий в настоящей работе на конкретном формализме останавливаться не будем, опишем лишь качественные физические допущения [13, 16 и др.]. За основу берется система уравнений Навье—Стокса для несжимаемой вязкой жидкости в безразмерном виде. Система характеризуется единственным критерием подобия — числом Рейнольдса  $Re$ . Система уравнений Навье—Стокса решается для стационарного течения, характеризуемого скоростью  $\mathbf{v}_0$  и давлением  $p_0$ , возмущенных малыми нестационарными скоростью  $\mathbf{v}'$  и давлением  $p'$ :

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 + \mathbf{v}', \quad p = p_0 + p'.$$

Ввиду малости возмущений исходная система уравнений Навье—Стокса трансформируется в линейную систему уравнений с частными производными для возмущений  $\mathbf{v}'$  и  $p'$ . После принятия анзаца  $\mathbf{v}', p' \propto e^{\lambda t} e^{ikx}$ , где  $\lambda$  и  $k$  — неизвестные параметры;  $x$  — переменная, вдоль которой распространяется стационарный поток, последняя линейная система уравнений в частных производных трансформируется к задаче на собственные значения  $k_n$  для дифференциального уравнения с обыкновенными производными. Первыми такое уравнение получили Orr и Зоммерфельд применительно к задаче устойчивости плоскопараллельного потока вязкой несжимаемой жидкости [17]. В соответствующей краевой задаче на собственные значения, полученной Рэлеем, автор пренебрегает членом с обратной степенью числа Рейнольдса  $Re$ , что требует не только предположения о большой величине  $Re$ , но и о малых значениях четвертой производной скорости возмущения от продольной координаты. Полученные в результате решения собственные значения позволяют рассчитать длину волны возмущения (гармонической модуляции боковой поверхности невозмущенной струи).

#### **О некоторых особенностях течений жидкости в тонких капиллярах**

Согласно [18, с. 558–560], формально в заполненных жидкостью трубках малого диаметра течение носит, как правило, ламинарный характер, а турбулентный характер течения весьма нереалистичен, т. к. число Рейнольдса для круглых труб в этом случае практически всегда много меньше его критического значения  $Re \ll Re_{кр} \approx 2300$ . Однако в реальной микрофлюидике имеются существенные особенности, связанные с наличием сильного

влияния шероховатостей внутренней поверхности микрофлюидного канала, по размерам соизмеримых с внутренними размерами канала. Согласно [19], описаны случаи, когда уже при  $Re \geq 500$  в микроканалах формируется турбулентный поток, и этот факт необходимо учитывать при работе в микрофлюидике.

Во-вторых, весь гидродинамический формализм, справедливый для ламинарного течения жидкостей (см. [18, с. 558–560], а также [2]), а именно уравнения переноса импульса (Навье—Стокса), энергии (теплопереноса) и массы (массопереноса), будучи проверенными экспериментально, остаются справедливыми для капилляров диаметром не менее 17 микрон. А теоретический прогноз для большинства жидкостей распространяется на трубки с гидравлическим диаметром вплоть до 1 микрона и даже меньше. Сама задача изучения явлений переноса в микроканалах является в настоящее время актуальным предметом научных исследований.

## **ПРИЛОЖЕНИЕ**

### **Некоторые аспекты поведения коэффициента поверхностного натяжения**

Коэффициент поверхностного натяжения, как отмечалось выше, зависит от температуры (чем выше температура, тем меньше коэффициент поверхностного натяжения), от количества примесей, содержащихся в жидкости. Так поверхностно-активные вещества (ПАВ), содержащиеся во всех стиральных порошках и прочих моющих жидкостях, снижают поверхностное натяжение воды. Наличие небольшого количества мыла или клея в воде способно снизить коэффициент поверхностного натяжения вдвое [20, с. 4].

Коэффициент поверхностного натяжения также зависит от плотности вещества, с которым контактирует жидкость. Чем выше плотность второго вещества, тем меньше коэффициент. Так, на границе двух жидкостей коэффициент поверхностного натяжения всегда меньше, чем на границе жидкость—разреженный газ. Например, на поверхности раздела (вода—эфир) он равен 0.0122 Н/м; (вода—бензол) — 0.0336 Н/м. На поверхности раздела твердого тела с жидкостью поверхностное натяжение меньше, чем на свободной поверхности жидкости. Например, на свободной поверхности (границе раздела жидкой и газообразной фаз) ртути коэффициент поверхностного натяжения равен 0.465 Н/м, на поверхности раздела ртути с водой — 0,427 Н/м, а со спиртом — 0.399 Н/м (при комнатной температуре) [20, с. 4].

### **Свойства поверхности жидкости (твердого тела), контактирующей с паром (воздухом)**

В этом случае молекулы, расположенные в поверхностном слое жидкости (твердого тела), находятся в иных условиях по сравнению с молекулами внутри жидкости (тела). На каждую молекулу жидкости (тела), окруженную со всех сторон другими молекулами, действуют силы притяжения, быстро убывающие с расстоянием, следовательно, начиная с некоторого минимального расстояния силами притяжения между молекулами можно пренебречь. Это расстояние (порядка  $10^{-9}$  м [21, с. 19]) называется радиусом молекулярного действия  $r$ , а сфера радиуса  $r$  — сферой молекулярного действия. Молекулы на поверхности жидкости (тела) и в ее глубине находятся в различных условиях. На молекулу, находящуюся в толще жидкости (тела), действуют средние силы притяжения, равные нулю. Если молекула расположена от поверхности на расстоянии, меньшем  $r$ , то сфера молекулярного действия лишь частично расположена внутри жидкости (тела). Над поверхностью жидкости (тела) находится пар (воздух), плотность которого во много раз меньше плотности жидкости (тела) (при температурах ниже критической), поэтому взаимодействием молекул пара (воздуха) с молекулами жидкости (тела) можно пренебречь. Именно поэтому равнодействующая всех сил притяжения  $\mathbf{F}$ , приложенных к каждой молекуле поверхностного слоя, не равна нулю и направлена внутрь жидкости. Поверхностная энергия границы характеризуется в этом случае коэффициентом поверхностного натяжения  $\alpha$ .

### **Свойства поверхности контакта двух несмешивающихся жидкостей или жидкости и твердого тела**

В этом случае поверхностная энергия сконцентрирована в окрестности границы раздела фаз, которая представляет собой суммарный слой толщиной  $r_1 + r_2$ , где  $r_i$  — радиус молекулярного действия фазы  $i$ ,  $i = 1, 2$  (см. [6, рис. 3.18]). В этом случае поверхностная энергия (совокупная) границы характеризуется коэффициентом поверхностного натяжения  $\alpha_{12}$ , а равнодействующая всех сил притяжения  $\mathbf{F}$  направлена в сторону той фазы, в которой силы притяжения молекул выше (отсюда смачивание и несмачивание данной жидкостью данного твердого тела).

## **ВЫВОДЫ**

В настоящей работе подробно рассмотрены особенности учета сил поверхностного натяжения в микрофлюидике: постановка краевых условий на границах раздела фаз между несмешивающи-

мися жидкостями и жидкостями и твердыми телами; учет влияния температуры на силы поверхностного натяжения; эффект переноса вещества вдоль границы раздела двух сред, возникающий вследствие наличия градиента поверхностного натяжения (эффект Марангони). Предлагается алгоритм, позволяющий оценивать коэффициент поверхностного натяжения на границе твердое тело—жидкость с учетом изменения температуры. Рассмотрен вопрос о капиллярной неустойчивости Рэлея—Плато. Эти аспекты приобретают важное значение при моделировании микрофлюидных процессов на вычислительных пакетах и в реальном научном приборостроении.

## **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. *Bruus H.* Theoretical Microfluidics. Oxford University Press. 2008. 346 p.
2. *Шарфарец Б.П.* Обзор теории явлений переноса и поверхностных явлений применительно к решению некоторых задач научного приборостроения // Научное приборостроение. 2015. Т. 25, № 3. С. 45–64. URL: <http://213.170.69.26/mag/2015/full3/Art6.pdf>.
3. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. VI. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 736 с.
4. *Левич В.Г.* Физико-химическая гидродинамика. М.: ГИФМЛ, 1959. 700 с.
5. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. Т. 2. Термодинамика и молекулярная физика. М.: Наука, 1975. 565 с.
6. *Савельев И.В.* Курс общей физики. Т. 1. Механика, колебания и волны, молекулярная физика. М.: Наука. 1970. 511 с.
7. *Adamson A.W., Gast A.P.* Physical chemistry of surfaces. 6th edition. N.Y.: John Wiley & Sons, Inc., 1997. 808 p.
8. Правило Этвеша. URL: [https://en.wikipedia.org/wiki/E%C3%B6tv%C3%B6s\\_rule](https://en.wikipedia.org/wiki/E%C3%B6tv%C3%B6s_rule).
9. *Адам Н.К.* Физика и химия поверхностей. М.: ОГИЗ, 1947. 552 с.
10. *Путинин К.А.* Курс физики. Т. 1. Механика. Акустика. Молекулярная физика. Термодинамика. М.: ГИФМЛ, 1963. 560 с.
11. Физическая энциклопедия. Т. 5. М.: Большая Российская энциклопедия, 1998. 760 с.
12. *Plateau J.* Experimental and theoretical statics of liquids subject to molecular forces only. Vol. I. Paris-London, 1873. 427 p.
13. *Rayleigh, Lord.* On the instability of jets // Proceedings of the London mathematical Society. 1878. Vol. 10. P. 4–13.
14. *Шарпу Ф.* Неустойчивость в гидродинамике. М.–Ижевск. 2015. 472 с.
15. *Breslouer O.* Rayleigh-Plateau Instability: Falling Jet. Analysis and Applications. MAE 559, 1/08/10, Final Project Report. 22 p. URL: <http://www.princeton.edu/~stonelab/Teaching/Oren%20Breslouer%20559%20Final%20Report.pdf>.

16. Устойчивость двумерного течения. URL: <http://www.pvsm.ru/fizika/33186>.
17. Уравнение Орра-Зоммерфельда. URL: [https://en.wikipedia.org/wiki/Orr%E2%80%93Sommerfeld\\_equation](https://en.wikipedia.org/wiki/Orr%E2%80%93Sommerfeld_equation).
18. *Incropera F.P., DeWitt D.P., Bergman T.L., Lavine A.S.* Principles of Heat and Mass Transfer. 7th Ed. Wiley & Sons, 2013. 1048 p.
19. *Papautsky I., Ameer T.* A review of laminar single-phase flow in microchannels // Proc. ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition. Nov. 11–16, 2001, New York. 9 p.
20. Лабораторный практикум по молекулярной физике. Изучение явления поверхностного натяжения. Задача № 204. М.: МГУ им. М.В. Ломоносова. 2011. 14 с.
21. *Бэтчелор Дж.* Введение в динамику жидкости. М.: Мир, 1973. 760 с.

**Институт аналитического приборостроения РАН,  
г. Санкт-Петербург**

Контакты: *Шарфарец Борис Пинкусович,*  
[sharb@mail.ru](mailto:sharb@mail.ru)

Материал поступил в редакцию: 7.07.2016

## THE MODELING OF MICROFLUIDIC PROCESSES. ACCOUNT OF THE SURFACE FORCES

**A. A. Evstrapov, V. E. Kurochkin, B. P. Sharfarets**

*Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint-Petersburg, Russia*

We consider the features of the surface tension forces in microfluidic. Given boundary conditions on the interfaces between immiscible fluids, and liquids and solids taking into account the surface pressure. We also consider the effect of mass transfer along the interface of two media, arising due to the presence of surface tension gradient (Marangoni effect), take into account the influence of temperature on surface tension forces. The algorithm, allowing estimating the coefficient of surface tension on the boundary solid-liquid with changes in temperature is given. Considered the capillary instability of the Rayleigh—Plateau. Emphasizes the importance of these aspects in the creation of a real microfluidic models using computing packages and physical models in the interests of scientific instrumentation.

*Keywords:* microfluidics, surface forces, surface pressure, Marangoni effect, capillary instability of the Rayleigh—Plateau

### REFERENCES

1. Bruus H. *Theoretical Microfluidics*. Oxford University Press, 2008. 346 p.
2. Sharfarets B.P. [An overview of the theory of transport phenomena and surface phenomena in relation to the solution of some problems of analytical instrumentation]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2015, vol. 25, no. 3, pp. 45–64. Doi: 10.18358/np-25-3-i4564. (In Russ.).
3. Landau L.D., Lifshic E.M. *Teoreticheskaya fizika. T. VI. Gidrodinamika* [Theoretical physics. Vol. VI. Hydrodynamics]. Moscow, Nauka Publ., 1986. 736 p. (In Russ.).
4. Levich V.G. *Fiziko-himicheskaya gidrodinamika* [Physical and chemical hydrodynamics]. Moscow, GIFML Publ., 1959. 700 p. (In Russ.).
5. Sivuhin D.V. *Obshchij kurs fiziki. T. 2. Termodinamika i molekulyarnaya fizika* [General course of physics. Vol. 2. Thermodynamics and molecular physics]. Moscow, Nauka Publ., 1975. 565 p. (In Russ.).
6. Savel'ev I.V. *Kurs obshchej fiziki. T. 1. Mekhanika, kolebaniya i volny, molekulyarnaya fizika* [Course of the general physics. Vol. 1. Mechanics, fluctuations and waves, molecular physics]. Moscow, Nauka Publ., 1970. 511 p. (In Russ.).
7. Adamson A.W., Gast A.P. *Physical chemistry of surfaces*. 6th edition. N.Y., John Wiley & Sons, Inc., 1997. 808 p.
8. *Eötvös rule*. URL: [https://en.wikipedia.org/wiki/E%C3%B6tv%C3%B6s\\_rule](https://en.wikipedia.org/wiki/E%C3%B6tv%C3%B6s_rule).
9. Adam N.K. *Fizika i chimiya poverchnostey* [Physics and chemistry of surfaces]. Moscow, OGIZ Publ., 1947. 552 p. (In Russ.).
10. Putilin K.A. *Kurs fiziki. T. 1. Mekhanika. Akustika. Molekulyarnaya fizika. Termodinamika* [Physics course.

- Vol. 1. Mechanics. Acoustics. Molecular physics. Thermodynamics]. Moscow, GIFML Publ., 1963. 560 p. (In Russ.).
11. *Fizicheskaya ensiklopediya. T. 5.* [Physical encyclopedia. Vol. 5]. Moscow, Bol'shaya Rossiyskaya ensiklopediya Publ., 1998. 760 p. (In Russ.).
  12. Plateau J. *Experimental and theoretical statics of liquids subject to molecular forces only. Vol. I.* Paris-London, 1873. 427 p.
  13. Rayleigh, Lord. On the instability of jets. *Proceedings of the London mathematical Society*, 1878, vol. 10, pp. 4–13.
  14. Sharru F. *Neustoychivost' v gidrodinamike* [Instability in hydrodynamics]. Moscow-Izhevsk, 2015. 472 p. (In Russ.).
  15. Breslouer O. *Rayleigh-Plateau Instability: Falling Jet. Analysis and Applications.* MAE 559, 1/08/10, Final Project Report. 22 p. URL: <http://www.princeton.edu/~stonelab/Teaching/Oren%20Breslouer%20559%20Final%20Report.pdf>.
  16. *Ustoychivost' dvumernogo techeniya* [Stability of a two-dimensional current]. URL: <http://www.pvsm.ru/fizika/33186>. (In Russ.).
  17. *Uravnenie Orra-Zommerfel'da* [Orr-Sommerfeld's equation]. URL: [https://en.wikipedia.org/wiki/Orr%E2%80%93Sommerfeld\\_equation](https://en.wikipedia.org/wiki/Orr%E2%80%93Sommerfeld_equation).
  18. Incropera F.P., DeWitt D.P., Bergman T.L., Lavine A.S. *Principles of Heat and Mass Transfer.* 7th ed., Wiley & Sons, 2013. 1048 p.
  19. Papautsky I., Ameel T. A review of laminar single-phase flow in microchannels. *Proc. ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition.* Nov. 11–16, 2001, New York. 9 p.
  20. *Laboratornyy praktikum po molekulyarnoy fizike. Izucheniye yavleniya poverchnostnogo natyazheniya. Zadacha N 204* [Laboratory workshop on molecular physics. Studying of the phenomenon of a superficial tension. Task N 204]. Moscow, MGU im. M.V. Lomonosova, 2011. 14 p. (In Russ.).
  21. Batchelor Dzh. *Vvedeniye v dinamiku zhidkosti* [Introduction to fluid dynamics]. Moscow, Mir Publ., 1973. 760 p. (In Russ.).

Contacts: *Sharfarets Boris Pinkusovich,*  
sharb@mail.ru

Article received in edition: 7.07.2016