## ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ РАН

На правах рукописи

Вагнер Сергей Александрович

# Численное моделирование особенностей течения псевдопластичных полимерных жидкостей в микроканалах

02.00.06 – Высокомолекулярные соединения

# ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

> Научный руководитель доктор физико-математических наук Патлажан Станислав Абрамович

## Оглавление

Введение
Глава 1. Обзор литературы12
1.1. Общие представления о течении жидкостей в микроканалах
1.2. Псевдопластичные жидкости14
1.3. Скольжение на гладких поверхностях17
1.3.1. Пристенное скольжение ньютоновских жидкостей17
1.3.2. Пристенное скольжение полимерных жидкостей
1.4. Супергидрофобные поверхности
1.4.1 Смачивание шероховатых поверхностей
1.4.2. Типы супергидрофобных поверхностей
1.4.3. Эффективное скольжение на супергидрофобной поверхности
1.4.4. Теоретический анализ эффективной длины скольжения
1.4.5. Течение полимерных жидкостей над супергидрофобной поверхностью
1.5. Перемешивание жидкостей в микроканалах
1.5.1. Типы микромиксеров
1.5.2. Использование супергидрофобных покрытий для перемешивания жидкостей в
микроканалах
1.5.3. Перемешивание псевдопластичных жидкостей
1.6. Формирование капель в коаксиальных микрокапиллярах
1.6.1. Типы устройств для производства микрокапель
1.6.2. Режимы течения в коаксиальных капиллярах
1.6.3. Размер капель в соосных капиллярах
1.6.4. Формирование капель в соосных капиллярах при обтекании псевдопластичной
жидкостью40
1.7. Гидродинамическое поведение однородной и композитной капель в микроканалах при
течении простого сдвига42
1.7.1. Однородная капля
1.7.2. Композитная капля45
Выводы по литературному обзору49
ГЛАВА 2. МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕЧЕНИЯ ОДНОРОДНЫХ

И ДИСПЕРСНЫХ ЖИДКОСТЕЙ	50
2.1. Математическая поставка задач	50

2.2. Методы аппроксимации межфазных границ	52
2.2.1. Метод функции уровня	53
2.2.2. Метод объема жидкости	54
2.3. Решение системы уравнений Навье-Стокса несжимаемых жидкостей	55
2.3.1. Процедура решения методом конечных разностей	56
2.3.2. Процедура решения методом конечных объемов	58
2.4. Выбор расчетных сеток	61
2.4.1. Кажущееся скольжение псевдопластичной жидкости в канале с	
супергидрофобной стенкой	61
2.4.2. Оценка интенсивности геликоидального течения	62
2.4.3. Течение жидкостей в коаксиальных капиллярах	63
2.4.4. Деформационное поведение двухмерной композитной капли	63
2.4.5. Деформация и распад трехмерной композитной капли	64

# ГЛАВА 3. ОСОБЕННОСТИ ТЕЧЕНИЯ ПСЕВДОПЛАСТИЧНОЙ ПОЛИМЕРНОЙ ЖИДКОСТИ В КАНАЛЕ С СУПЕРГИДРОФОБНОЙ СТЕНКОЙ ......65

3.1. Сравнение численного моделирования с известными аналитическими результатами.66
3.2. Поле возмущений скорости при сдвиговом течении ньютоновской жидкости над
супергидрофобной текстурой67
3.3. Скольжение псевдопластичной полимерной жидкости над супергидрофобной
текстурой
3.3.1. Длины эффективного и кажущегося скольжения ньютоновской и
псевдопластичной полимерной жидкостей
3.2.2. Структура псевдопластичной полимерной жидкости при течении над
супергидрофобной текстурой71
3.3.3. Механизм кажущегося скольжения псевдопластичной полимерной жидкости76
3.3.4. Зависимость длины кажущегося скольжения псевдопластичной жидкости от
скорости сдвига
3.4. Геликоидальное течение в микроканале с наклонной ориентацией супергидрофобной
текстуры
Выводы по Главе 3

ГЛАВА 4. ОСОБЕННОСТИ ТЕЧЕНИЯ ДИСПЕРСНЫХ НЬЮТОНОВСКИХ И	
ПСЕВДОПЛАСТИЧНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ЖИДКОСТЕЙ В КОАКСИАЛЬНЫХ	
КАПИЛЛЯРАХ	.90

	01
4.1. Сравнение численных расчетов с экспериментальными результатами	91
4.2 Диаграммы морфологических состояний двухфазных ньютоновских жидкостей в	
коаксиальных капиллярах	92
4.3. Формирование капель в коаксиальных капиллярах при обтекании псевдопластично	ой
полимерной жидкостью	97
4.4. Влияние скольжения на размер капель в коаксиальных капиллярах	99
Выводы по Главе 4	.100
ГЛАВА 5. ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ КОМПОЗИТНОЙ КАПЛИ В УЗКО	M
КАНАЛЕ ПРИ ТЕЧЕНИИ ПРОСТОГО СДВИГА	.101
5.1. Сравнение численных расчетов с известными экспериментальными и теоретически	ІМИ
результатами	.101
5.2. Стационарная деформация двухмерной композитной капли в узком канале при	
течении простого сдвига	.103
5.2.1. Влияние конфайнмента	.104
5.2.2. Влияние состава капли. Подпирающий эффект	.106
5.2.3. Влияние капиллярного числа	.108
5.2.4. Влияние материальных характеристик среды	.108
5.3. Деформация и разрушение трехмерной композитной капли с высоковязкой оболоч	кой
в узком канале при течении простого сдвига	.110
Выводы по Главе 5	.113
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	.115
СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ	.117
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	.121

## Введение

#### Актуальность работы

На фоне стремительного развития микро- и нанотехнологий получило развитие новое междисциплинарное научное направление – микрофлюидика, предметом которого, является исследование особенностей течения гомогенных и многофазных жидких сред в микроскопических каналах. Такие каналы составляют основу разнообразных микрожидкостных устройств («лабораторий-на-чипе»), которые находят широкое применение в химии, медицине, фармацевтике, микробиологии для решения разнообразных научных задач и практических приложений.

К числу наиболее актуальных проблем, стоящих перед микрофлюидикой, относятся чрезвычайно высокое гидродинамическое сопротивление и слабое перемешивание жидкостей при течении в микроканалах. В последние годы эти проблемы находят частичное решение путем использования супергидрофобных свойств шероховатых поверхностей, в углублениях которых локализованы пузырьки газа. Последние позволяют существенно понизить гидродинамическое сопротивление вследствие скольжения вдоль таких поверхностей. Применение анизотропных супергидрофобных текстур дает также возможность заметно повысить эффективность смешивания жидкостей в микроканале при наклонной ориентации текстуры относительно оси канала. Однако, полученные на сегодняшний день результаты касаются в основном поведения ньютоновских жидкостей, в то время как поведение полимерных сред в микроканалах оставалось изученной слабо. Вязкость полимерных растворов зависит от скорости сдвига, что может приводить к ряду нетривиальных особенностей их транспорта в микроканалах.

С другой стороны, заметный интерес представляет изучение закономерностей течения многокомпонентных дисперсных сред. Не в последнюю очередь это обусловлено необходимостью создания новых технологий производства монодисперсных капель микронных размеров, которые применяются во многих областях, в том числе, в качестве микроконтейнеров химических и лекарственных препаратов. Помимо конкуренции вязких и капиллярных сил, гидродинамическое поведение таких объектов в значительной степени определяется их взаимодействием со стенками микроканалов (эффекты конфайнмента). В частности, научный и практический интерес представляют вопросы, связанные с генерацией микрокапель в процессе совместного течения термодинамически несовместимых жидкостей в коаксиальных капиллярах. В этом случае формирование капель может протекать по нескольким механизмам: за счет их срыва с внутреннего капилляра либо вследствие неустойчивости струи дисперсного компонента. В связи с этим заметную актуальность приобретают вопросы взаимосвязи возможных режимов течения с гидродинамическими параметрами и реологическими характеристиками полимерных и низкомолекулярных жидкостей. Течение капель в микроканалах, в свою очередь, может сопровождаться их деформацией или разрушением. Эти процессы очень чувствительны к условиям конфайнмента, когда размеры капель соизмеримы с поперечным сечением микроканалов. При этом открытыми оставались вопросы, связанные с динамикой деформирования и распада композитных капель, содержащих жидкое ядро заданной вязкости, при течении сдвига.

### Цели и задачи работы.

Цель диссертационной работы состояла в исследовании методами численного моделирования ряда гидродинамических особенностей, возникающих при течении однородных и дисперсных ньютоновских и псевдопластичных полимерных жидкостей в микроскопических каналах. Для достижения данной цели основное внимание было сосредоточено на решении следующих задач:

– Исследование механизмов скольжения псевдопластичных полимерных жидкостей в микроканале с анизотропным супергидрофобным покрытием при течении простого сдвига.

 Изучение закономерностей образования геликоидального течения и процессов перемешивания ньютоновских и псевдопластичных полимерных жидкостей в микроскопических каналах с наклонной ориентации супергидрофобной страйп-текстуры.

 Математическое моделирование механизмов формирования капель в коаксиальных капиллярах при их обтекании ньютоновской и псевдопластичной жидкостями.

 Исследование деформационного поведения и механизмов разрушения одноядерных композитных капель при течении простого сдвига в условиях конфайнмента в зависимости от их состава, относительных вязкостей компонентов среды и режимов течения.

#### Научная новизна.

– Впервые доказано, что скольжение псевдопластичной полимерной жидкости в микроканале с анизотропным супергидрофобным покрытием обусловлено возникновением периодических возмущений вязкости над участками с граничными условиями скольжения (жидкость-газ) и прилипания (жидкость-твердая стенка).

 Впервые установлена немонотонная зависимость длины кажущегося скольжения псевдопластичной полимерной жидкости от скорости сдвига и ее высокая чувствительность к изменению степени наклона реологической кривой вязкости.

– Впервые обоснованы физические механизмы формирования геликоидального течения и установлены закономерности перемешивания ньютоновской и псевдопластичной полимерной жидкостей в микроскопических каналах с наклонной ориентацией анизотропного супергидрофобного покрытия.

 Методами численного моделирования впервые установлены условия формирования струйного и капельного режимов истечения дисперсной фазы при течении несовместимых ньютоновских жидкостей в коаксиальных капиллярах при разных расходах и вязкостях компонентов среды.

– Впервые показано, что диаметр вязких капель, формирующихся в коаксиальных капиллярах при обтекании псевдопластичной полимерной средой, практически не зависит от расходов жидкостей и значительно больше, капель, образованных при обтекании ньютоновской жидкостью.

– Впервые установлено, что тейлоровская деформация двухмерной одноядерной композитной капли при течении простого сдвига достигает максимального значения при определенном значении относительного радиуса ядра, величина которого определяется значением капиллярного числа (эффект подпирания).

– Впервые показано, что маловязкое ядро в композитной капле с высоковязкой оболочкой в условиях конфайнмента приводит к снижению стационарной деформации и повышению критического капиллярного числа ее распада при течении простого сдвига по сравнению с аналогичной однородной каплей.

#### Практическая значимость работы.

Полученные в ходе работы над диссертацией результаты свидетельствуют о перспективности применения псевдопластичных полимерных жидкостей для повышения производительности микрожидкостных систем за счет многократного снижения гидродинамического сопротивления микроскопических каналов с супергидрофобными покрытиям. Установленные в работе условия формирования капель в соосных капиллярах определяют диапазон гидродинамических параметров и относительных вязкостей компонентов среды, при которых возможно производство монодисперсных капель. Данные о гидродинамическом поведении композитных капель могут быть использованы при создании жидких микроконтейнеров с заданными прочностными и деформационными свойствами.

#### Методы исследования.

Основные исследования, выполненные в диссертационной работе, осуществлялись методами численного моделирования. С этой целью исходные системы дифференциальных уравнений решали численно с применением методов конечных объемов и конечных разностей. Моделирование динамической эволюции формы межфазных границ раздела многокомпонентных жидкостей проводили методами объема жидкости и функции уровня. Методология вычислительных процедур базировалась на объектно-ориентированном подходе с использованием языка C++ на основе открытой вычислительной платформы OpenFOAM, а также программном комплексе, разработанном сотрудниками лаборатории вычислительной

гидродинамики ИПХФ РАН. Наиболее ресурсоемкие расчеты производили методами параллельных вычислений на многопроцессорных кластерах Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

Достоверность научных результатов, полученных в диссертационной работе, обеспечена применением общепризнанных методов математического моделирования, сходимостью численных решений на оптимизированных расчетных сетках и подтверждена соответствием полученных решений с известными экспериментальными и теоретическими результатами.

#### Основные положения, выносимые на защиту:

 Механизмы кажущегося скольжения псевдопластичной полимерной жидкости в микроскопических каналах с анизотропным супергидрофобным покрытием.

 Закономерности перемешивания ньютоновской и псевдопластичной полимерной жидкостей в микроскопическом канале при наклонной ориентации супергидрофобной страйп-текстуры.

– Обобщенные диаграммы капельного и струйного режимов течения несовместимых жидкостей в коаксиальных капиллярах в широком диапазоне скоростей и вязкостей.

 Механизмы формирования монодисперсных капель в коаксиальных капиллярах при обтекании ньютоновской и псевдопластичной полимерной жидкостью.

– Гидродинамическое поведение двухмерных и трехмерных одноядерных композитных капель при течении простого сдвига в микроканалах в условиях конфайнмента.

### Апробация результатов работы.

По материалам диссертационной работы были опубликованы 6 статей в рецензируемых научных изданиях, входящих в перечень ВАК и индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus:

- Вагнер С.А., Патлажан С.А. Особенности сдвигового течения в микроканалах с супергидрофобной стенкой // ДАН, Физическая Химия — 2014. — Vol. 459, no. 6. — Р. 707–710.
- Patlazhan S. A., Vagner S. A., Kravchenko I. V. Steady-state deformation behavior of confined composite droplets under shear flow // Phys. Rev. E. — 2015. — Vol. 91. — P. 063002 (1-9).
- Vagner S. A., Patlazhan S. A. Hydrodynamics of Newtonian and power-law fluids in microchannel with superhydrophobic wall // J. Phys. Conf. Ser. — 2016. — Vol. 774 — P. 012027 (1-9).
- Patlazhan S. A., Vagner S. Apparent slip of shear thinning fluid in a microchannel with a superhydrophobic wall // Phys. Rev. E. 2017. Vol. 96. P. 013104 (1-12).

- Vagner S. A., Patlazhan S. A., Kravchenko I. V. Hydrodynamics of composite droplet with high-viscosity shell subjected to shear flow in the narrow channel // J. Phys. Conf. Ser. — 2018. — Vol. 946 — P. 012116 (1-7).
- Vagner S. A., Patlazhan S. A., Serra C.A. Formation of microdroplets in Newtonian and shear thinning fluids flowing in coaxial capillaries. Numerical modeling // J. Phys. Conf. Ser. — 2018. — Vol. 946 — P. 012117 (1-6).

Статья в рецензируемом сборнике статей

 Вагнер С.А., Кравченко И. В., Патлажан С. А. Гидродинамика композитной капли в условиях конфайнмента // сборник «Проблемы нелинейной динамики и физики конденсированных сред» / под ред. Л.И. Маневича, М.А. Мазо, В.В. Смирнова. – Москва.– 2013. – С. 307-313.

14 тезисов докладов на всероссийских и международных научных конференциях:

- Вагнер С.А., Кравченко И.В., Патлажан С.А. Особенности гидродинамического поведения композитной капли в узком канале при течении сдвига. Численное моделирование // Тезисы 6-ой Всероссийской Каргинской конференции «Полимеры 2014». — Москва, 2014 — С. 217.
- Vagner, S.A., Patlazhan S.A. Shear-induced helical flow in a microchannel with superhydrophobic wall // Book of abstracts of XXIX International Conference on «Equation of State for Matter» — Kabardino-Balkaria, Russia, 2014. — P. 52.
- Patlazhan S.A., Vagner S.A., Kravchenko I.V. Dynamics of composite droplets subjected to shear flow in a narrow channel // Book of abstracts 6th International conference on polymer behavior (ICPB6) — Vienna, Austria, 2014. — P.37
- Vagner S.A., Patlazhan S.A., Kravchenko. I.V. The formation dynamics of composite droplets and Janus particles // Book of abstracts XXX International Conference on «Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter» — Kabardino-Balkaria, Russia, 2015. — P. 193.
- Patlazhan S.A., Vagner S.A. Hydrodynamics of homogeneous and multiphase fluids in a narrow channel // Book of abstracts of XXX International Conference on «Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter» — Kabardino-Balkaria, Russia, 2015. — P. 193.
- Вагнер, С.А. Патлажан С.А. Особенности течения степенной жидкости в канале с супергидрофобной стенкой. Численное моделирование // Сборник докладов IV Конференции молодых учёных «Реология и физико-химическая механика гетерофазных систем». — Москва, 2015 — С. 19.
- Патлажан С.А., Вагнер С.А., Кравченко И. В. Влияние конфайнмента на особенности течения ньютоновских и степенных жидкостей // Материалы 28 Симпозиума по реологии. — Москва, 2016. — С. 31-32.

- Patlazhan S.A., Vagner S.A. Hydrodynamics of power-law fluids in microchannel with superhydrophobic wall // Book of abstracts of XXXI International Conference on «Equation of State for Matter» — Kabardino-Balkaria, Russia, 2016. — P. 88.
- Вагнер С.А., Патлажан С.А. Геликоидальное течение в микроканалах с супергидрофобной стенкой. Численное моделирование // Материалы 27 Симпозиума по реологии. — Тверь, 2016. — С. 20.
- Vagner S.A., Patlazhan S.A. The generation of microdroplets in the co-flowing Newtonian and non-Newtonian fluids. Mathematical modeling / Book of abstracts of XXXII International Conference on «Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter» — Kabardino-Balkaria, Russia, 2016. — P. 319.
- 11. Вагнер С.А., Кравченко И.В., Патлажан С.А. Гидродинамика полимерных жидкостей в микроскопических каналах // Сборник тезисов VI Бакеевской всероссийской с международным участием школы для молодых ученых «Макромолекулярные нанообъекты и нанокомпозиты» — Москва, 2016. — С. 34.
- 12. Вагнер С.А., Кравченко И.В., Патлажан С.А. Гидродинамика композитной капли с высоковязкой оболочкой при течении простого сдвига в узком канале // Сборник материалов V Конференции молодых ученых «Реология и физико-химическая механика гетерофазных систем». — Москва, 2017. — С. 59-63.
- Patlazhan S.A., Vagner S.A., Kravchenko I.V. Deformation and breakup of composite droplets in the narrow channel under shear flow. Numerical simulation // Book of Abstracts of XXXII International Conference on «Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter» — Kabardino-Balkaria, Russia, 2017. — P. 318.
- 14. Вагнер С.А., Патлажан С.А. Кажущееся скольжение полимерных жидкостей в микроканалах с супергидрофобным покрытием. Численное моделирование // Сборник тезисов VII Всероссийской Каргинской конференция «Полимеры 2017» — Москва, 2017 — С. 52.

#### Личный вклад автора.

Автор диссертации принимал участие в обсуждении постановок задач, планировании и проведении всего объема численного моделирования, анализе полученных результатов, их оформлении, а также написании научных статей и тезисов докладов.

## Структура диссертации.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка обозначений и списка цитируемой литературы. **Первая глава** представляет собой литературный обзор, в котором даны современные научные представления о течениях однородных и дисперсных ньютоновских и псевдопластичных жидкостей в микроканалах. Освещены основные известные на се-

годняшний день результаты исследований транспортных свойств супергидрофобных анизотропных поверхностей, формирования капель в соосных капиллярах и гидродинамического поведения композитных капель в микрокапиллярах. Вторая глава посвящена описанию численных методов решения системы уравнений Навье-Стокса для однородных и многофазных вязких несжимаемых жидкостей, используемых в работе. В третьей главе рассматривается механизм скольжения неньютоновских псевдопластичных жидкостей в микроканале с анизотропной супергидрофобной текстурой. Рассчитываются длины кажущегося скольжения вдоль и поперек текстуры. Исследуется механизм формирования геликоидального течения в микрокапилляре при течении под некоторым углом к супергидрофобной текстуре. Производится оценка эффективности перемешивания ньютоновской и псевдопластичной жидкостей.

**Четвертая глава** диссертации посвящена исследованию условий реализации разных морфологических состояний двухфазной ньютоновской жидкости в коаксиальных капиллярах. Рассматриваются особенности формирования капель при обтекании полимерным раствором. В **пятой главе** представлены результаты численного моделирования гидродинамического поведения двухмерной и трехмерной композитных капель при течении простого сдвига. Особое внимание уделяется исследованию влияния стенок канала.

# Глава 1. Обзор литературы

## 1.1. Общие представления о течении жидкостей в микроканалах

Микрофлюидика – это сравнительно новое междисциплинарное научное направление, предметом которого является исследование закономерностей течения однородных и многофазных жидкостей в каналах микронных размеров различных форм и конфигураций [1-3]. Микроканалы составляют основу микрожидкостных устройств (рис. 1.1), которые находят разнообразные применения при химическом анализе [4-6], в медицине (диагностирование инфекционных заболеваний [7] и анализ крови [8, 9], регенерация и восстановление тканей [10-12]), в фармакологии (производство функциональных микрогелей и микрокапсул с целью адресной доставки лекарственных препаратов [13, 14]), в биологии и цитологии [15-19], в микрожидкостной хроматографии [20, 21], электрофорезе [22-24] и т.д. По сравнению с классическими методами использование микрожидкостных устройств в химическом анализе дает ряд преимуществ: (i) возможность полноценного анализа при чрезвычайно малых объемах вещества (доли микролитра), (ii) высокая скорость получения результатов, (iii) возможность интеграции всех необходимых процедур (введение вещества, подготовка, проведение анализа, обработка результатов и пр.) в одном устройстве, (iv) минимальный риск отравления, интоксикации, ожогов, взрывов и прочих нежелательных эффектов [27-30]. Таким образом, исследователь получает в свое распоряжение целую химическую лабораторию в виде чипа площадью от нескольких квадратных миллиметров до нескольких квадратных сантиметров, получившей наименование «лаборатория-на-чипе» («laboratory-on-a-chip») [31, 32].

Простая оценка показывает, что уменьшение характерных размеров  $\zeta$  системы и диаметра *а* микрокапель приводит к доминированию поверхностных сил. Действительно, в этом случае отношение поверхностных сил  $F_{surf}$  (капиллярное давление или вязкие напряжения) к объемным  $F_{vol}$  пропорционально отношению площади поверхности *S* к элементу объема жидкости *V*, на которые эти силы действуют,  $F_{surf} / F_{vol} \sim S / V \sim \zeta^{-1} \xrightarrow{}{}_{\zeta \to 0} \infty$  [33]. Такое соотношение сил приводит к ряду характерных особенностей течения жидкостей в микроканалах: (i) высокое гидродинамическое сопротивление, (ii) доминирование капиллярных сил в многокомпонентных средах, (iii) сильное влияние стенок канала на деформационное поведение и предельные характеристики дисперсной фазы (эффекты конфайнмента). Помимо этого, течение в микроканалах отличается малостью числа Рейнольдса  $Re = \rho Uh/\eta$ , характеризующего отношение инерционных и вязких сил ( $\rho$  и  $\eta$  – плотность и динамическая вязкость жидкости, U – средняя скорость течения, h – толщина канала) [34]. В самом деле, при типичных размерах поперечного сечения микроканалов от 1 до 100 мкм и скорости течения от 1 мкм/с до 1 см/с, число Рейнольдса лежит в пределах от 10<sup>-6</sup> до 10. При таких значениях *Re*, вязкие



**Рис. 1.1.** Примеры микрожидкостных устройств: (а) микрочип для биохимических анализов [1], (б) микромиксер [25], (в) микрочип для анализа крови [26].

силы доминируют над инерционными, что приводит к существенно ламинарному характеру течения в прямолинейных микроканалах с гладкими стенками. Напомним, что переход к турбулентному течению имеет место при  $Re > Re_{cr}$ , где  $Re_{cr} \simeq 2000$  в этом случае [35]. Ламинарное течение, однако, препятствует эффективному перемешиванию жидкостей в микроканалах. Это затрудняет их использование в ряде приложений, связанных с химическими или биологическими процессами, которые требуют интенсивного перемешивания реагентов.

В то же время в силу малости поперечных размеров, в микроканалах могут развиваться высокие скорости сдвига  $\dot{\gamma} \sim U/h$ , что приводит к большим сдвиговым напряжениям  $\sigma = \eta \dot{\gamma}$ . Поэтому для поддержания даже небольших расходов жидкости в микроканале, требуются значительные перепады давления. Перепад давления  $\Delta p$  при течении вязкой жидкости в капилляре длиной  $L_0$  с круглым поперечным сечением диаметра d и объемным расходом Q равен  $\Delta p = \frac{128 \eta L_0 Q}{\pi d^4}$  [36]. Отсюда следует, что при постоянном расходе Q уменьшение диаметра капилляра в десять раз требует увеличения перепада давления  $\Delta p$  в 10<sup>4</sup> раз. Таким образом, течение в микроскопических каналах, действительно, характеризуется чрезвычайно высоким гидродинамическим сопротивлением [33, 37].

Характер течения многофазных систем в микроканалах (капли, струи) определяется двумя конкурирующими силами, доминирующими в микроканале: вязкими напряжениями  $\eta \dot{\gamma} u$  давлением Лапласа  $\gamma/a$ , возникающим вблизи искривленной границы раздела вследствие межфазного натяжения [34] ( $\gamma$  – коэффициент межфазного натяжения, a – радиус капли (струи)). Капиллярное число  $Ca = \eta \dot{\gamma} a / \gamma$ , определяемое как отношение этих сил, позволяет оценить характер течения дисперсных сред [38-40].

При течении многокомпонентных жидкостей в микроканалах, частицы дисперсной фазы, как правило, соизмеримы с поперечным сечением микроканалов (условия конфайнмента). Гидродинамическое поведение дисперсной жидкости в этом случае существенно отличается от ее поведения в неограниченном канале. Степень конфайнмента определяется параметром конфайнмента n = 2a/h [41, 42].

## 1.2. Псевдопластичные жидкости

Динамическая вязкость  $\eta$  многих жидкостей не зависит от скорости сдвига. В этом случае выполняется закон Ньютона, согласно которому сдвиговое напряжение линейно зависит от градиента скорости жидкости, как  $\sigma = \eta \frac{\partial u}{\partial y}$ . Такое поведение соответствует прямым 1 [43] на рис. 1.2 (в координатах напряжение - скорость сдвига (а) и в координатах вязкость - скорость сдвига (б)). В тензорной форме закон Ньютона можно представить, как

$$\sigma_{ij} = \eta D_{ij}, \tag{1.1}$$

где  $D_{ij} = (\nabla_i u_j + \nabla_j u_i)/2$  – тензор скоростей деформаций скорости, а индексы *i* и *j* соответствуют осям лабораторной системы координат *x*, *y*, *z*. Соотношения, связывающие напряжения и скорость деформации, иногда называют конституционными или реологическими уравнениями [44, 45]. Жидкости, подчиняющиеся закону Ньютона, называют ньютоновскими. Примерами таких жидкостей могут служить вода, различные типы масел, низкомолекулярные органические растворители, глицерин и пр.

Иное поведение демонстрируют вязкопластичные (или бингамовские) жидкости [46, 47]. Течение таких сред возможно только при напряжениях, превышающих некоторое критическое значение  $\sigma_y$ , которое называется пределом текучести. При достижении предела текучести  $\sigma_y$ , жидкость Бингама начинает течь. Это схематически демонстрирует кривая 2 на рис. 1.2(а). Такое поведение свойственно концентрированным суспензиям и эмульсиям [48], к которым относятся тяжелые сорта нефти, разнообразные пасты и кремы. Подобное критическое поведение связано с разрушением твердообразной структуры при достижении предела текучести, что и приводит к резкому падению вязкости [45] (см. рис. 1.2(б), кривая 2).



**Рис. 1.2.** Зависимость сдвигового напряжения (а) и вязкости (б) от скорости сдвига:1 – ньютоновская жидкость, 2 – вязкопластическая жидкость Бингама, 3 – псевдопластичная жидкость) [43].



**Рис. 1.3.** (а) Зависимость вязкости ПДМС различной молекулярной массы от скорости сдвига при температуре 294 К: ПДМС-100 (1), ПДМС-200 (2), ПДМС-1000 (3) [49]. (б) Зависимости вязкости дисперсии кристаллов глицерина моностеарата в рапсовом масле с различной концентрацией кристаллов: 1% (1), 2% (2), 3% (3) [50].

Промежуточное положение между ньютоновскими и бингамовскими жидкостями занимают псевдопластичные среды [46, 48]. Они проявляют ньютоновское поведение лишь при достаточно малых или очень больших скоростях сдвига, тогда как между этими предельными случаями наблюдается снижение вязкости в широком диапазоне скоростей сдвига (см. рис. 1.2 (б), кривая 3), что контрастирует со скачкообразным падением вязкости, характерным для жидкостей Бингама (ср. рис. 1.2(б), кривая 2).

Псевдопластичные свойства проявляют некоторые дисперсии, растворы и расплавы полимеров. На это, в частности, указывает рис. 1.3, на котором представлены кривые течения расплава полидиметилсилоксана (ПДМС) при различных молекулярных весах [49] (рис. 1.3(а)) и дисперсии кристаллов глицерина моностеарата в рапсовом масле с различной концентрацией кристаллов [50] (рис. 1.3(б)). Видно, что при достаточно малых скоростях сдвига эти системы демонстрируют ньютоновский характер течения, а с увеличением скорости сдвига наблюдается падение их вязкости на несколько порядков.

Помимо неньютоновского поведения вязкости, полимерным жидкостям свойственна также вязкоупругая реакция. Растяжение полимерных цепей в процессе течения влечет за собой изменение упругой энергии системы, что приводит к более сложной зависимости напряжения от скорости деформаций [44]. Снижение упругой реакции и преобладание вязкопластического поведения возможно (i) в расплавах олигомеров и (ii) в разбавленных и полуразбавленных растворах полимеров. В данной работе вязкоупругие эффекты рассматриваться не будут, а полимерные среды будут исследоваться с точки зрения их псевдопластичного поведения.

Падение вязкости полимерных жидкостей обусловлено растяжением полимерных клубков вдоль направления течения [51, 52]. Степень снижения вязкости зависит также от полидисперсности полимерных систем. Чем длиннее макромолекула, тем большая скорость сдвига необходима для максимального растяжения клубка. Таким образом, полимерные фракции с различными молекулярными весами последовательно достигают максимального растяжения, что и приводит к постепенному уменьшению вязкости [53, 54].

Простейшей моделью псевдопластичных сред является модель Оствальда-де-Вела. В ней вязкость зависит от скорости сдвига степенным образом, как  $\eta(\dot{\gamma}) = \lambda \dot{\gamma}^{g^{-1}}$ , где  $\lambda$  определяет порядок величины вязкости, а параметр *g* характеризует тип жидкости. При *g* < 1 с увеличением скорости сдвига  $\dot{\gamma}$  вязкость жидкости будет снижаться, а при *g* > 1 имеет место увеличение вязкости. Последнее соответствует т.н. *дилатантным* жидкостям. При *g* = 1 модель Оствальда-де-Вела соответствует ньютоновской жидкости с вязкостью  $\eta = \lambda$ . Недостатком данной модели является отсутствие ньютоновского плато, характерного для псевдопластичных жидкостей при малых скоростях сдвига [51, 52] (см. рис. 1.3).

Для более детального описания реологического поведения псевдопластичных жидкостей, применяют модель Каро-Ясуда [47, 55]. При произвольном характере течения, вязкость такой среды является функцией второго инварианта тензора скоростей деформаций  $J_2 \equiv \sum_{i,j} D_{ij} D_{ji}$  и может быть представлена как

$$\eta(J_2) = \eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty}) \left[ 1 + (2\lambda^2 J_2)^{\frac{f}{2}} \right]^{\frac{g-1}{f}}.$$
(1.2)

В частном случае течения простого сдвига  $J_2$  выражается через скорость сдвига  $J_2 = \frac{1}{2}\dot{\gamma}^2$ , а соотношение Каро-Ясуда представляется в виде

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_{\infty} + \left(\eta_0 - \eta_{\infty}\right) \left[1 + (\dot{\gamma}\lambda)^f\right]^{\frac{g-1}{f}}, \qquad (1.2a)$$

где  $\eta_0$  и  $\eta_{\infty}$  – ньютоновские вязкости среды, соответствующие предельно малым и большим скоростям сдвига; показатель *f* определяет форму перехода между ньютоновским плато при малых скоростях сдвига и псевдопластичным поведением с ростом  $\dot{\gamma}$ ; параметр  $\lambda$  определяет скорость сдвига, при которой ньютоновское плато переходит в область снижения вязкости; показатель степени *g* определяет угол наклона кривой в зоне уменьшения вязкости. На рис. 1.4 представлены экспериментальные зависимости вязкости водного раствора полиакриламида (ПАА) с концентрацией 500 ppm (символы) от скорости сдвига. Сплошная кривая соответствует наилучшему соответствию модели Каро-Ясуда экспериментальным данным [56].



Рис. 1.4. Экспериментальные зависимости вязкости раствора ПАА с концентраций 500 ppm от скорости сдвига (символы) и соответствующая ей кривая Каро-Ясуда ( $\eta_0 = 1.08 \Pi a \cdot c$ ,  $\eta_{\infty} = 0.0023 \Pi a \cdot c$ ,  $\lambda = 5, f = 1, g = 0.2$ ) [56].

Модель Каро-Ясуда успешно применялась для описания течения крови [57, 58, 60] и полимерных растворов (водные растворы ксантовой камеди (xanthan gum) [61], полиакриламида [56] и карбоксиметилциллюлозы [62]) в микрокапиллярах.

## 1.3. Скольжение на гладких поверхностях

### 1.3.1. Пристенное скольжение ньютоновских жидкостей

Пристенное скольжение – это физическое явление, при котором касательная компонента скорости жидкости на границе раздела с твердой поверхностью отлична от нуля. Вопросам обоснования пристенного скольжения посвящено большое число публикаций. Они нашли отражение в ряде современных обзоров [63-70]. Простейшее граничное условие скольжения, было предложено Навье в 1823 году [71]. Согласно этому условию, скорость скольжения жидкости пропорциональна сдвиговому напряжению на границе раздела с твердой стенкой  $u|_s = \xi \sigma|_s$ , где  $u|_s$  – скорость скольжения,  $\sigma|_s$  – сдвиговое напряжение, а  $\xi$  – коэффициент трения. Для ньютоновской жидкости условие Навье можно представить как

$$u\Big|_{s} = l\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)\Big|_{s},\tag{1.3}$$

где  $l = \zeta \eta$  – длина скольжения, которая соответствует расстоянию от границы раздела, на которой эпюра скорости экстраполируется к нулевому значению (рис. 1.5(а)). Длина скольжения является основной характеристикой интенсивности скольжения. При l = 0 граничное условие (1.3) сводится к классическому условию прилипания, при котором относительная



**Рис. 1.5.** Типы граничных условий: (а) условия скольжения, (б) условия «прилипания», (в) условия идеального скольжения [76]

скорость жидкости на твердой стенке равна нулю [72] (рис. 1.5(б)). В отсутствие трения  $(\xi \rightarrow 0) \ l \rightarrow \infty$ . В этом случае говорят об идеальном скольжении, при котором имеет место пробкообразное течение с нулевым градиентом скорости,  $\partial u / \partial y = 0$  (рис. 1.5(в)).

Целесообразность использования тех или иных граничных условий зависит от соотношения длины скольжения к ширине или диаметру канала *l/h*. Так, при течении простого сдвига скорость сдвига в общем случае можно представить, как  $\dot{\gamma}_{slip} = \frac{\dot{\gamma}_{stick}}{1 + l / h}$ . В широком канале  $h \gg l$  скорость сдвига близка к скорости сдвига в канале без скольжения,  $\dot{\gamma}_{slip} \xrightarrow{} \dot{\gamma}_{stick} = U / h$ , которое имеет место при l = 0 (рис. 1.5(б)). С другой стороны, в очень узком канале  $h \ll l$  скорость сдвига стремится к нулю  $\dot{\gamma}_{slip} \xrightarrow{} 0$  и профиль скорости принимает плоскую (пробкообразную) форму (рис. 1.5 (в)). Таким образом, пристенное скольжение необходимо принимать во внимание, если ширина канала сопоставима,  $h \sim l$ , или меньше, h < l, длины скольжения (рис. 1.5(а,в)). Эксперимент и молекулярно динамическое (МД) моделирование показали, что на гладкой гидрофильной поверхности длина скольжения не превышает 10 нм [73-75], тогда экспериментальные исследования скольжения на гидрофобной поверхности показали, что длина скольжения может достигать 100 нм [75, 77]. Таким образом, граничные условия прилипания можно использовать для каналов с шириной порядка 10 мкм с гладкими гидрофильными или гидрофобными стенками. В гидрофобных нано- и микроканалах с шириной  $h \sim l$  или h < l, требуется учет пристенного скольжения. Отметим, что под гидрофильными понимают поверхности, у которых краевой угол смачивания  $\theta$ меньше 90° (рис. 1.6(a)), тогда как у гидрофобных поверхностей он может достигать 120° [78] (рис 1.6(б)). Взаимосвязь краевого угла с длиной скольжения обоснована в работе [79].

На сегодняшний день рассматривают два основных механизма скольжения – истинное и кажущееся скольжение [64, 65, 80]. Модель истинного (молекулярного) скольжения предполагает движение молекул жидкости в пристенном слое и демонстрирует длины скольже-



Рис.1.6. Гидрофильные (а) и гидрофобные (б) поверхности

ния не более 10 нм в соответствии с молекулярно-динамическим моделированием [73]. Таким образом, на гидрофильных поверхностях реализуется молекулярный механизм скольжения. В ряде экспериментов с гидрофобными поверхностями длина скольжения достигала сотен нанометров [75, 77, 81-84], что значительно превышало результаты модели молекулярного скольжения. В связи с этим была разработана модель кажущегося скольжения, которая предполагает формирование газообразной подушки (или жидкой пленки малой вязкости  $\eta_{\varepsilon} \ll \eta$ ) толщины  $\varepsilon$  вблизи твердой стенки (см. рис. 1.7) [80, 83, 85]. Кажущееся скольжение обеспечивается за счет более высокой скорости сдвига в маловязком  $\varepsilon$ -слое, по сравнению с объемной скоростью сдвига. Длина кажущегося скольжения определяется следующим выражением [80]

$$l_{\rm app} = \varepsilon \left( \frac{\eta}{\eta_{\varepsilon}} - 1 \right). \tag{1.4}$$

Модель кажущегося скольжения было обоснована в ряде теоретических работ [83, 85], а также экспериментальных исследованиях, показавших наличие нанопузырков газа на твердых стенках [86-88]. Подтверждением модели «газовой подушки» может также служить снижение скольжения жидкостей при уменьшении концентрации растворенного газа [81, 89].



Рис. 1.7. Модель кажущегося скольжения [76].

Длина скольжения ньютоновских жидкостей может зависеть от скорости сдвига. Впервые это было обнаружено в работе [90] методами МД моделирования для течения простого сдвига. Было показано, что при малых скоростях сдвига  $\dot{\gamma}$  длина скольжения ньютоновской жидкости остается постоянной, тогда как при достижении некоторого критического значения  $\dot{\gamma}_c$ , длина скольжения начинала резко возрастать, что объяснялось слабой энергией взаимодействия между молекулами воды и гидрофобной стенки. С другой стороны, шероховатости на такой поверхности приводят к заметному снижению длины скольжения и устранению сингулярности при  $\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_c$  [91]. Зависимость длины скольжения от средней скорости сдвига ньютоновских жидкостей была также обнаружена экспериментально в процессе нормальных колебаний скрещенных гидрофобных цилиндров [92]. Однако, в последнем случае механизм зависимости скольжения от скорости сдвига отличается от того, что происходит при сдвиговом скольжении. Теоретически было показано, что рост длины скольжения обусловлен динамикой нанопузырьков, локализованных на твердых стенках осциллирующих поверхностей [93].

#### 1.3.2. Пристенное скольжение полимерных жидкостей

Растворы и расплавы полимеров могут скользить по твердой поверхности благодаря нескольким механизмам [69]. Первый из них – адгезионный – преобладает при течении расплавов полимеров. Он заключается в том, что адсорбированные макромолекулы могут отрываться от стенки (десорбция) за счет перепутанности с вышележащими цепями (рис. 1.8(а)) [94-96]. Флуктуации адсорбции и десорбции полимерных цепей могут приводит к динамическим переходам «прилипание-скольжение», что обуславливает появление специфического рельефа на поверхности полимерного экструдата, так называемой «акульей кожи» [97]. Подобные дефекты образуются при некотором критическом напряжении на стенках канала, величина которого зависит от энергии взаимодействия молекул полимера и твердой стенки. Исследование внутренней поверхности фильер после экструдирования показало, что у их выхода формируются микрополости, связанные с отрывом полимерных цепочек от стенок канала, что подтверждает справедливость адгезионного характера скольжения [98]. Второй тип скольжения – когезионный, возникает при частичном распутывании полимерных цепей, прилегающих к сильно адсорбированному слою полимера (рис. 1.8(б)) [99]. Для обоих механизмов длина скольжения составляет несколько микрон. В этих случаях говорят о режимах слабого скольжения. При увеличении скорости сдвига происходит переход к режиму сильного скольжения, который связан с конформационными переходами макромолекул из клубкового в растянутое состояние. В этом режиме длина скольжения может изменяться в пределах от 0.1 до 1.5 мм.

В расплавах и растворах полимеров может иметь место кажущееся скольжение, которое образуется за счет формирования вблизи стенки тонкого маловязкого слоя. Причины образования такого слоя могут быть разными и зависят от концентрации, молекулярного веса и степени полидисперсности макромолекул. В частности, в расплавах полимеров с широким молекулярно-массовым распределением (MMP) маловязкий слой может возникать вслед-



**Рис. 1.8.** Механизмы скольжения расплава полимеров: (а) адгезионный механизм скольжения, (б) когезионный механизм скольжения

ствие диффузии коротких цепей в направлении стенки [100]. Такой же механизм формирования маловязкого слоя имеет место в концентрированных полимерных растворах за счет вытеснения растворителя в направлении твердой стенки [69].

# 1.4. Супергидрофобные поверхности

## 1.4.1 Смачивание шероховатых поверхностей

Краевой угол смачивания определяется условиями взаимодействиями жидкой и газообразной фаз между собой и гладкой поверхностью и потому полностью описывается значениями коэффициентов межфазного натяжения на границах раздела твердая стенка-газ  $\gamma_{sg}$ , твердая стенка-жидкость  $\gamma_{sf}$ , жидкость-газ  $\gamma$ :

$$\cos\theta_{\gamma} = \frac{\gamma_{\rm sg} - \gamma_{\rm sf}}{\gamma}.$$
(1.5)

Данное соотношение называется уравнением Юнга [101]. Наибольший краевой угол  $\theta_{\rm Y}$  гладких гидрофобных поверхностей составляет 120° [78]. Однако, наличие нано- или микрорельефа на гидрофобной поверхности может существенно повысить его значение [102]. При контакте жидкости с текстурированной поверхностью возможны два состояния: а) жидкость полностью заполняет впадины между выступами (состояние Венцеля) (рис. 1.9(а)) [103] или б) полости остаются заполненными газом (состояние Касси-Бакстера) (рис. 1.9(б)) [104].

За счет увеличения площади контакта, состояние Венцеля характеризуется бо́льшей энергией взаимодействия жидкости с твердой стенкой по сравнению с гладкой поверхностью. Это приводит к увеличению краевого угла  $\theta_W$  по сравнению с углом Юнга  $\theta_Y$  и определяется соотношением  $\cos \theta_W = r \cos \theta_Y$  [103]. Параметр *r* характеризует шероховатость поверхности. Его значение  $r \ge 1$  определяется отношением полной площади границы жидкость - твердая стенка к площади проекции этой границы на горизонтальную плоскость. Как видно, с увеличением степени шероховатости поверхности краевой угол Венцеля  $\theta_W$  возрастает.



22

С точки зрения усиления гидрофобных свойств поверхности, состояние Касси-Бакстера является более предпочтительным. Краевой угол в этом состоянии определяет выражение  $\cos \theta_{CB} = r(1-\varphi)\cos \theta_Y - \varphi$  [104], где поверхностная доля контакта жидкость - газ для страйптекстуры  $\varphi = \delta/L - (cm. puc. 1.9(6))$ . Как видно, увеличение эффективного краевого угла  $\theta_{CB}$  в состоянии Касси-Бакстера достигается за счет увеличения доли контакта жидкость - газ  $\varphi$ . На сегодняшний день известны поверхности с  $\varphi \sim 0.997$ , краевой угол смачивания  $\theta_{CB}$  которых близок к 180° [105]. Благодаря таким выдающимся водоотталкивающим свойствам, шероховатые гидрофобные поверхности в состоянии Касси-Бакстера называют *супергидрофобными* (СГФ) поверхностями.

Состояние Касси-Бакстера может быть неустойчивым. Поэтому понимание механизмов перехода между двумя предельными состояниями является критически важным [106-109]. Из простых термодинамических соображений, основанных на сравнении свободной энергии состояний Касси-Бакстера и Венцеля, был получен следующий критерий: состояние Касси-Бакстера устойчиво, если краевой угол Юнга  $\theta_{Y}$  материала из которого сделана поверхность превышает критическое значение  $\theta_{cr}$ , которое определяется из выражения [110]:

$$\cos\theta_{cr} = -\frac{\varphi}{r-1+\varphi},\tag{1.6}$$

Из соотношения следует, что для выполнения условия устойчивости состояния Касси-Бакстера, материал твердой стенки должен быть гидрофобным ( $\theta_{\rm y} > 90^{\circ}$ ).

## 1.4.2. Типы супергидрофобных поверхностей

Листья некоторых растений обладают супергидрофобными свойствами за счет особого микрорельефа на их поверхности. Наиболее известным примером служит лист лотоса, который показан вместе с микроструктурой его поверхности на рис. 1.10(а) и 1.10(б). Благодаря СГФ свойствам, капли воды на поверхности листьев обладают высокой подвижностью, что позволяет растениям быстро избавляться от лишней влаги и/или самоочищаться [111, 112]. Перья птиц, особенно водоплавающих, также часто обладают СГФ свойствами [113]. Водомерки могут передвигаться по поверхности воды благодаря микрощетинкам на их конечностях (рис. 1.10(в) и 1.10(г)) [114]. Некоторые пауки могут продолжительное время находить-



**Рис. 1.10.** Лист лотоса (а) и микроструктура его поверхности (б) [116]; водомерка (в) [117] и микроструктура ее ножек (г) [118]; ряды микростолбиков (д) [119]; страйп-текстура (е) [120]; фрактальная СГФ поверхность (ж) [121].

ся под водой и дышать за счет воздушных пузырьков, содержащимся в микроскладках на их поверхности [115].

Современные технологии позволяют производить искусственные СГФ поверхности, обладающие микрорельефом с заданными геометрическими характеристиками: периодические массивы микростолбиков (рис. 1.10(д)), микроволокон, микроотверстий, страйптекстуры (рис. 1.10(е)), фрактальные поверхности (рис. 1.10(ж)) [102, 121] и пр. Искусственные СГФ поверхности находят применения: (i) для снижения гидродинамического сопротивления в микроканалах [122], (ii) в качестве антизагрязняющих [123, 124], (iii) противотуманных [125], (iv) антиобледенительных [126, 127], (v) антикоррозийных [128, 129] и (vi) антибактериальных [130, 131] покрытий.

По типу рельефа природные и искусственные СГФ поверхности можно разделить на два класса – изотропные и анизотропные [108, 132]. Краевой угол, гистерезис краевого угла и длина скольжения изотропных СГФ покрытий не зависят от направления измерений. Примерами изотропных СГФ структур могут служить периодические или случайные множества микровыступов и микроуглублений [119], поверхности, покрытые разориетированными микроволокнами [133], фрактальные структуры [102, 121] и пр. Напротив, смачивающие и гидродинамические свойства анизотропных СГФ текстур зависят от направлений измерения [107, 134, 135]. К природным анизотропным СГФ текстурам можно отнести крылья некоторых насекомых (например, бабочки и цикады) [136].

### 1.4.3. Эффективное скольжение на супергидрофобной поверхности

Супергидрофобные поверхности позволяют повысить длину скольжения до нескольких сотен микрон [137] за счет устойчивой газовой фазы, заключенной в полостях микрорельефа. Это делает их использование чрезвычайно привлекательными для снижения гидродинамического сопротивления микроканалов высотой от десятка до нескольких сотен микрон. Длину скольжения по СГФ поверхности можно грубо оценить по формуле (1.4) [80], которую в данном случае можно переписать в виде  $l_{app} \approx e\eta/\eta_c$ , где e - глубина бороздок (ср. рис. 1.8(б)), а  $\eta_g$  – вязкость газа в микропузырьках. Принимая во внимание, что глубина бороздок (ср. рис. 1.8(б)), а  $\eta_g$  – вязкость газа в микропузырьках. Принимая во внимание, что глубина бороздок микротекстуры лежит в диапазоне от 0.1 до 10 мкм, а отношение вязкостей жидкости и газа примерно равно  $\eta/\eta_g = 50$ , то в соответствии с (1.4), длина скольжения может составлять от 5 до 500 мкм. Такая оценка, однако, является весьма грубой, поскольку не учитывает чередованием контактов жидкости с твердыми выступами и газовыми включениями. Кроме того, течение газа происходит в малых полостях текстуры, что также ограничивает точность приведенной оценки [138]. Длина скольжения зависит от поверхностной доли  $\varphi$  межфазных границ и их формы, глубины e и геометрических особенностей микрорельефа. Это делает задачу расчета длины скольжения на СГФ поверхности нетривиальной.

В силу различия граничных условий на твердых выступах и областях контакта жидкость-газ, скольжение по СГФ поверхности необходимо описывать в терминах эффективной длины скольжения [31, 139, 140], которая равна отношению средних значений скорости и градиента скорости на стенке канала:

$$I_{\rm eff} = \left\langle u \right|_{s} \right\rangle / \left\langle \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{s} \right\rangle. \tag{1.7}$$

Таким образом, эффективная длина скольжения характеризует интенсивность скольжения жидкости по некоторой эффективно гладкой поверхности с длиной скольжения  $l_{eff}$ . Одни из первых экспериментальных исследований эффективной длины скольжения ньютоновской жидкости были выполнены на примере течения в микроканале с прямоугольным сечением и СГФ покрытием на нижней стенке [141, 142]. В качестве СГФ покрытия использовались поверхности с периодическими наборами микростолбиков или параллельных бороздок с поверхностной долей участков жидкость-газ  $\varphi$  в диапазоне от 0.5 до 0.9. Высота микроканалов *h* варьировалась от 76 до 264 мкм. Было установлено, что увеличение поверхностной доли газовых участков  $\varphi$  и высоты канала *h* приводит к росту длины скольжения. Для обоих типов СГФ структуры максимальная длина скольжения составила более 20 мкм при  $\varphi = 0.9$ . Рост длины скольжения с увеличением поверхностной доли газовой фазы  $\varphi$  согласуется с результатами теоретических исследований [143-145]. Однако, как отмечалось выше, при высокой доле газовой фазы  $\varphi$  может нарушаться устойчивость состояния Касси-Бакстера, в результате чего жидкость будет проникать в углубления между выступами. При течении жидкости в микроканале, помимо термодинамического критерия устойчивости (1.6), необходимо также учитывать баланс сил, действующих на межфазную границу жидкость-газ [105, 137]. Было показано, что устойчивость состояния Касси-Бакстера в виде набора столбиков определяется неравенством [137]

$$2\gamma\cos\theta_{\rm Y}\left(\Delta p\varphi L\right)^{-1}\sqrt{\pi(1-\varphi)} \le 1, \tag{1.8a}$$

а для анизотропной страйп-текстуры имеет вид [137]

$$2\gamma\cos\theta_{\rm Y}\left(\Delta p\varphi L\right)^{-1} \le 1,\tag{1.86}$$

где  $\Delta p$  – разница давлений в жидкости и газе. Как видно, максимально возможное значение  $\varphi_{\text{max}}$ , при котором состояние Касси-Бакстера остается устойчивым, уменьшается с ростом перепада давления  $\Delta p$  и периода неоднородности текстуры *L* и, напротив, увеличивается с ростом краевого угла Юнга  $\theta_{\text{Y}}$ . Измеренная в реометре конус-плоскость эффективная длина скольжения при  $\varphi = \varphi_{\text{max}}$  в диапазоне давлений  $\Delta p$  от 200 до 300 Па с периодом СГФ структур *L* от 50 до 250 мкм составила 94 и 185 мкм при  $\varphi_{\text{max}} = 0.993$  и 0.976 для изотропной и анизотропной текстур, соответственно [105].

В работе [105] использовалось гидрофобное покрытие с максимально возможным краевым углом на гладкой гидрофобной поверхности  $\theta_{\rm Y} = 120^{\circ}$ . Как видно из неравенств (1.8a) увеличение краевого угла потенциально способно увеличить значение  $\varphi_{\rm max}$ , что в свою очередь может привести к росту длины скольжения. Краевой угол смачивания  $\theta_{\rm Y}$  был увеличен за счет нанесения дополнительного нанорельефа поверх микрорельефа [137]. Это привело к росту краевого угла до 150°, что позволило увеличить  $\varphi_{\rm max}$  до 0.997 для микростолбиков и до 0.98 для бороздок в соответствии с условиями (1.8a). Соответствующие длины скольжения значительно возросли и составили 140 и 400 мкм для изотропной и анизотропной текстур, соответственно. Отметим, что столь значительный рост длины скольжения с увеличением  $\varphi$ на доли процента обусловлен экспоненциальной зависимостью эффективной длины скольжения от  $\varphi$  при  $\varphi > 0.9$  [105].

## 1.4.4. Теоретический анализ эффективной длины скольжения

Теоретический анализ позволяет дать количественную оценку влияния различных факторов на эффективную длину скольжения, объяснить экспериментальные результаты, а также рассчитать оптимальную структуру СГФ стенки. Первый аналитический расчет эффективной длины скольжения был выполнен на примере анизотропной страйп-текстуры с периодом L [143, 144] при следующих допущениях: (i) рассматривается широкий канал ( $h \gg L$ ), (ii) на межфазных поверхностях жидкость - газ рассматривались условия идеального скольжения, (iii) межфазные границы жидкость - газ принимались плоскими. Это привело к следующим соотношениям [143, 144]:

$$l_{\rm eff}^{\perp} \simeq \frac{L}{2\pi} \ln \left[ \sec \left( \frac{\pi \varphi}{2} \right) \right], \qquad l_{\rm eff}^{\parallel} \simeq 2 l_{\rm eff}^{\perp} .$$
 (1.9)

Как видно, эффективная длина скольжения  $l_{\text{eff}}^{\parallel}$  при течение вдоль страйп-текстуры в два раза больше длины скольжения  $l_{\text{eff}}^{\perp}$  при поперечном течении. При течении жидкости под производным углом  $\Theta$  к оси текстуры длину скольжения следует рассматривать в тензорной форме,  $\mathbf{l}_{\text{eff}} = \{l_{ij}^{\text{eff}}\}$ . В этом случае граничное условие Навье (1.3) в общем виде представляет-ся как [31, 146]

$$\left\langle u_{i}\right\rangle = \sum_{i,k} l_{ij}^{\text{eff}} n_{k} \left\langle \frac{\partial u_{j}}{\partial x_{k}} \right\rangle_{S}$$
 (1.10)

где  $\langle u_i |_s \rangle$  – *i*-тая компонента средней скорости скольжения на СГФ страйп-текстуре *S*, **n** – нормаль к поверхности *S*, а  $x_k$  –декартовая координата. Тензор эффективной длины скольжения представляется в виде симметричной положительно определенной матрицы 2×2, которую можно диагонализировать с помощью матрицы поворота **M**<sub> $\Theta$ </sub>:

$$\mathbf{I}_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} l_{\text{eff}}^{\parallel} & 0\\ 0 & l_{\text{eff}}^{\perp} \end{pmatrix} = \mathbf{M}_{\Theta} \begin{pmatrix} l_{11}^{\text{eff}} & l_{12}^{\text{eff}}\\ l_{21}^{\text{eff}} & l_{22}^{\text{eff}} \end{pmatrix} \mathbf{M}_{-\Theta}, \ \mathbf{M}_{\Theta} = \begin{pmatrix} \cos\Theta & \sin\Theta\\ -\sin\Theta & \cos\Theta \end{pmatrix}.$$
(1.11)

Таким образом, зная эффективные длины скольжения вдоль и поперек бороздок  $l_{\text{eff}}^{\perp}$  и  $l_{\text{eff}}^{\parallel}$ , можно найти длину скольжения при течении под произвольным углом  $\Theta$  к оси текстуры.

Допущения, положенные в основу расчета длины скольжения по формуле (1.9) представляются достаточно ограниченными. В последующих теоретических работах были получены выражения с учетом вязких диссипаций в газе (конечность длины скольжения на участках жидкость-газ), а также конечной ширины канала ( $L \sim h$ ) и ненулевой кривизны мениска. Так в работах О.И. Виноградовой и А.В. Беляева [145, 147] рассматривалось течение Пуазейля с анизотропной страйп-текстурой с периодом L и конечной локальной длиной скольжения l жидкости над газовыми бороздками с произвольной поверхностной долей  $\varphi$ . Границы раздела жидкость - газ принимались плоскими. На них выполнялось граничное условие Навье (1.3). На твердых участках использовались граничные условия прилипания. В пределе узкого канала ( $h \ll L$ ) эффективные длины скольжения  $l_{eff}^{\parallel}$  и  $l_{eff}^{\perp}$  вдоль и поперек страйп-текстуры оказались равными [145, 147]:

$$l_{\rm eff}^{\parallel} \simeq \frac{lh\varphi}{h+l(1-\varphi)}, \quad l_{\rm eff}^{\perp} \simeq \frac{lh\varphi}{h+4l(1-\varphi)} . \tag{1.12}$$

Из соотношений видно, что при очень малой локальной длине скольжения,  $l \ll h$ , эффективное скольжение в узком канале изотропно,  $l_{\text{eff}}^{\parallel} \simeq l_{\text{eff}}^{\perp} \simeq l\varphi$ , тогда как при  $l \gg h$  эффективная длина скольжения вдоль текстуры примерно в четыре раза больше поперечной длины скольжения,  $l_{\text{eff}}^{\parallel} \simeq 4 l_{\text{eff}}^{\perp} \simeq h \frac{1-\varphi}{\varphi}$ . Это в два раза больше, чем в соотношении (1.9) [144].

В приближении широкого канала, *h* ≫ *L*, выражения для эффективных длин скольжения вдоль и поперек страйп-текстуры принимают другой вид [145, 147]:

$$l_{\text{eff}}^{\parallel} \simeq \frac{L}{\pi} \frac{\ln\left[\sec\left(\frac{\pi\varphi}{2}\right)\right]}{1 + \frac{L}{\pi l}\ln\left[\sec\left(\frac{\pi\varphi}{2}\right) + \tan\left(\frac{\pi\varphi}{2}\right)\right]} \stackrel{\text{M}}{=} \frac{l_{\text{eff}}^{\parallel}}{2\pi} \simeq \frac{L}{2\pi} \frac{\ln\left[\sec\left(\frac{\pi\varphi}{2}\right)\right]}{1 + \frac{L}{2\pi l}\ln\left[\sec\left(\frac{\pi\varphi}{2}\right) + \tan\left(\frac{\pi\varphi}{2}\right)\right]}.$$
(1.13)

Отсюда следует, что в широком канале собственные значения тензора эффективной длины скольжения определяются величиной отношения локальной длины скольжения к периоду текстуры *l/L*. При *l/L* >1 соотношения (1.13) сводятся к уже известным формулам (1.9) [143, 144]. При уменьшении отношения *l/L* анизотропия скольжения  $l_{\text{eff}}^{\parallel} / l_{\text{eff}}^{\perp}$  снижается и при *l/L* <1 течение снова становится изотропным  $l_{\text{eff}}^{\parallel} \approx l_{\text{eff}}^{\perp} \approx l$ . Таким образом, локальная длина скольжения над заполненными газом бороздками влияет не только на величину эффективных длин скольжения вдоль и поперек страйп-текстуры, но и на анизотропию скольжения. При уменьшении *l* характер скольжения жидкости микроканале с СГФ страйп-текстурой меняются от анизотропного к изотропному как в широком (*h* > *L*), так и в узком (*h* < *L*) каналах.

Другим важным результатом является вывод о том, что эффективная длина скольжения существенно зависит от высоты канала (рис. 1.11) [147]. В частности, собственные значения длины скольжения возрастают с увеличением соотношения h/L и достигают предельной величины при  $h \approx L$ . Таким образом, можно заключить, что эффективные длины скольжения являются характеристикой не только СГФ страйп-текстуры, но и всего микроканала в целом. Этот вывод подтверждается экспериментальными данными, представленными в работах [141, 142].

В дополнение к цитированным работам [145, 147], в которых локальная длина скольжения *l* на участках жидкость-газ принималась постоянной, была развита обобщенная модель «газовой подушки», в которой принималось во внимание влияние течения газа в полостях микрорельефа на граничные условия скольжения на участках жидкость - газ [148]. Пре-



**Рис. 1.11.** Эффективные длины скольжения вдоль  $l_{\text{eff}}^{\parallel}$  (сплошная кривая) и поперек  $l_{\text{eff}}^{\perp}$  (пунктирная кривая) страйп-текстуры ( $l/L = 20, \varphi = 0.75$ ) [147].

имущество данного подхода состоит в том, что он позволяет учитывать распределение и величину локальной длины скольжения, оставаясь при этом в рамках однофазной модели (без учета течения газа).

Влияние кривизны мениска на межфазной границе жидкость - газ исследовалось в ряде работ как численно, так и аналитически [149-153]. Показано, что небольшие отклонения мениска от плоской формы приводят к увеличению площади контакта жидкость-газ, что способствует росту эффективной длины скольжения. Значительное увеличение кривизны мениска, выпуклого в сторону верхней стенки канала, приводит к эффективному уменьшению ширины канала, что сопровождается ростом вязких напряжений. В то же время, увеличение кривизны мениска внутрь бороздок способствует истончению газового слоя и увеличению вязких напряжений при движении газа. В обоих случаях имеет место уменьшение эффективной длины скольжения.

Форма мениска зависит от разности давлений в жидкости и пузырьках (полосках) газа, в углублениях микрорельефа поверхности. В работе [141] экспериментально исследовалась форма мениска воды в процессе течения в микроканале высотой h = 127 мкм с СГФ покрытием, состоящим из квадратных микростолбиков высоты 30 мкм, расположенных на расстоянии 30 мкм. Было показано, что при максимальной средней скорости течения U = 0.36 м/с прогиб мениска составил 4 мкм (6% от периода неоднородности L СГФ текстуры). Аналитическая оценка влияния формы мениска [149] на эффективную длину скольжения, основанная на теории возмущений, показала, что малый параметр, связанный с такой кривизной мениска, порядка 0.06. Таким образом, в пределах указанных параметров течения, приближение плоских границ между жидкой и газовой фазами является вполне оправданным. В работах [120, 154, 155] теоретически и численно исследовалось влияние течения газа в бороздках СГФ страйп-текстуры на ее эффективную длину скольжения. Сравнение полученных решений с формулой (1.9) показало, что при достаточно глубоких бороздках,  $e/\delta > 0.5$  (см. рис. 1.9(б)), и небольшой доле газовых участков,  $\varphi \le 0.5$ , расхождение составляет не более 5%. В то же время, уменьшение  $e/\delta$  и увеличение  $\varphi$  приводит к более существенному расхождению результатов (до 50% при  $e/\delta \sim 0.05$  и  $\varphi \sim 0.99$ ).Таким образом, рассмотрение идеального скольжения на границах раздела жидкость-газ обоснованно при относительно небольшой доле достаточно глубоких бороздок.

## 1.4.5. Течение полимерных жидкостей над супергидрофобной поверхностью

Несмотря на то, что неньютоновские жидкие среды – растворы полимеров [156-158], кровь [156, 159, 160] и иные биологические жидкости [161] активно используются в микрожидкостных устройствах, абсолютное большинство исследований течения в микроканалах с СГФ поверхностями были выполнены на примере ньютоновских жидкостей. Поскольку в окрестности СГФ стенок имеют место существенные вариации скорости сдвига, можно ожидать, что это будет оказывать значительное влияние на характер скольжения псевдопластичных полимерных жидкостей, вязкость которых нетривиальным образом зависит от скорости сдвига (см. п. 1.2 и рис. 1.2-1.4).

Отметим работу [61], посвященную исследованию влияния псевдопластичности на эффективную длину скольжения в микроканале при течении поперек СГФ страйп-текстуры (эта работа вышла в печать незадолго до публикации нашей статьи [273] применительно к течению простого сдвига водного раствора полиакриламида, результаты которой изложены в Главе 3 настоящей диссертации). В работе [61] проведено численное моделирование течения водного раствора ксантановой камеди (xanthan gum) вязкость которого падает с увеличением скорости сдвига. Рассматривалось течение Пуазейля в микрокапилляре, нижняя стенка которого является поперечной страйп-текстурой в состоянии Касси-Бакстера. В качестве граничных условий принимались граничные условия прилипания и идеального скольжения на участках жидкость - твердая стенка и жидкость - газ, соответственно. Расчеты показали, что длина скольжения немонотонно зависит от градиента давления. При этом максимальное значение полученной длины скольжения примерно в три раза больше соответствующей длины скольжения ньютоновской жидкости. Также было показано, что уменьшение показателя *g* в соотношении Каро-Ясуда (1.2) приводит к увеличению максимума длины скольжения и сдвигу кривой в сторону больших значений средней скорости.

В указанном исследовании [61], однако, не уделялось внимание физическому механизму такого аномального роста длины скольжения. Также не рассматривался вопрос о продольном скольжении псевдопластичной жидкости. Все эти вопросы обсуждаются в Главе 3 настоящей диссертации.

## 1.5. Перемешивание жидкостей в микроканалах

Выше отмечалось, что течение жидкостей в прямолинейных микроканалах с гладкими стенками характеризуется малым числами Рейнольдса, и, соответственно, является ламинарным. Это препятствует эффективному перемешиванию жидкостей. В отсутствии конвекции, диффузия является единственным механизмом смешивания. Однако, из-за медленности диффузионных процессов (особенно в полимерных средах), реализация эффективного перемешивания в микроканалах является нетривиальной и весьма актуальной задачей. Это особенно важно применительно к созданию микрореакторов для химического анализа малых объемов жидкостей, поскольку степень смешения реагентов напрямую влияет на качество получаемого продукта [162, 163]. При этом благодаря большим значениям отношения площади к объему микроканалов по сравнению с традиционными реакторами, процессы в микрореакторе сопровождаются быстрым теплообменом с окружающей средой, что позволяет осуществлять химические реакции в условиях близких к изотермическим [164].

### 1.5.1. Типы микромиксеров

Существующие микромиксеры можно разделить на два типа – активные и пассивные [165]. Активные микромиксеры используют внешние источники энергии для создания возмущений при течении жидкостей. Такие миксеры можно классифицировать по типу внешнего источника энергии: акустические [166], температурные [167], электромагнитные [168] и др. Как правило, активные микромиксеры более эффективны, чем пассивные, однако, при их использование возникает ряд трудностей. В частности, интегрирование источника внешней энергии в микрожидкостные устройства делает их более сложными в эксплуатации, повышает размер и стоимость. Применение ультразвуковых волн и высоких температур в некоторых случаях может привести к порче исследуемых образцов [165]. В связи с этим активные микромиксеры практически не используются в микрожидкостных устройствах, которые предназначены для химического и биологического анализа.

Пассивные микромиксеры, в свою очередь, используют энергию текущей жидкости. С этой целью создаются микроканалы сложной формы, в которых создаются течения, увеличивающие площадь контакта смешиваемых жидкостей, что способствует интенсификации диффузионного смешивания. Существуют разнообразные формы пассивных микромиксеров. Один из способов интенсификации смешивания приведен на рис. 1.12 (а). Он направлен на многократное разделение и слияние потоков жидкости [169, 170]. Другой способ основан на механизме хаотической адвекции [171], который характеризуется многократным растя-



**Рис. 1.12.** Различные типы пассивных миксеров: (а) разделение и слияние потоков жидкости [169], (б) зигзагообразный капилляр [172], (в) канал в виде серпантина [173], (г) канал с наклонными бороздками [174], (д) канал с препятствиями [175].

жением и складыванием объемов жидкостей в микроканале. Отметим несколько способов инициации хаотической адвекции: (i) зигзагообразные капилляры (рис. 1.12(б)) [172], (ii) каналы в виде серпантина (рис. 1.12(в)) [173], (iii) формирование вторичного течения за счет гравировки наклонных бороздок (рис. 1.12(г)) [174], (iv) геометрические препятствия внутри канала (рис. 1.12(д)) [175].

## 1.5.2. Использование супергидрофобных покрытий для перемешивания жидкостей в микроканалах

Несмотря на простоту и эффективность пассивных микромиксеров, они не лишены недостатков. Во-первых, очевидно, что использование микроканалов сложной формы, как правило, приводит к еще большему увеличению гидродинамического сопротивления. Вовторых, вблизи резких границ и внутри полостей рельефа, как правило, формируются застойные зоны, что негативно отражается на процессе смешивания и, соответственно, на конечном продукте реакции [176].

Для устранения отмеченных недостатков в качестве пассивных микромиксеров рассматривались микроканалы с анизотропными СГФ покрытиями [122, 177-179]. Возможность их использования для усиления перемешивания жидкостей обосновано тем, что наклонная ориентация страйп-текстур относительно оси микроканала приводит к формированию вторичного течения, способствующего хаотической адвекции. Данный механизм смешивания обусловлен разными значениями эффективных длин скольжения  $l_{\rm eff}^{\parallel}$  и  $l_{\rm eff}^{\perp}$  вдоль и поперек страйп-текстуры (см. формулы (1.9), (1.12) и (1.13)). Очевидными преимуществами таких миксеров по сравнению с грубой гравировкой или созданием препятствий на пути потока является значительно более низкое гидродинамическое сопротивление, что облегчает их использование в микроскопических масштабах, а также отсутствие застойных зон, ввиду того,



**Рис. 1.13.** Зависимость степени смешивания  $\Phi$  от координаты вдоль оси канала: черные квадраты – смешивание в канале со страйп-текстурой в состоянии Касси-Бакстера ( $\Theta = 45^{\circ}$ ), открытые квадраты – смешивание в канале со страйп-текстурой в состоянии Венцеля ( $\Theta = 45^{\circ}$ ), черные ромбы – смешивание в канале с гладкой стенкой [177].

что полости рельефа заполнены газом. Впервые, экспериментальное исследование по смешиванию двух жидкостей в микроканале с анизотропным СГФ покрытием было осуществлено в работе [177]. В качестве оценки степени смешивания использовали параметр

$$\boldsymbol{\Phi} = 1 - 2\left(\left\langle c^2 \right\rangle - \left\langle c \right\rangle^2\right)^{1/2}, \tag{1.14}$$

где c – концентрация одного из жидких компонентов. При  $\Phi = 1$  достигается полное перемешивание жидкостей. Полученные результаты представлены на рис. 1.13, где показана зависимость степени смешивания  $\Phi$  от координаты вдоль оси микроканала с наклонной страйп-текстурой на нижней стенке в состояниях Касси-Бакстера и Венцеля. Кроме того, на графике представлена соответствующая зависимость для канала с гладкими стенками. Оказалось, что наклонная страйп-текстура в состоянии Касси-Бакстера дает наибольшую эффективность смешивания в микроканале по сравнению с текстурой в состоянии Венцеля (примерно на 20%) и тем более по сравнению с гладкими стенками.



**Рис 1.14.** Зависимости оптимального значения  $|J_z/J_x|$  от относительной высоты канала h/L при разных долях скользких участков  $\varphi$  (l/L = 1000) [147].

Интенсивность геликоидального течения зависит от скорости жидкости в направлении, перпендикулярном направлению основного течению. Теоретическое исследование генерации поперечного потока в микроканале с анизотропной СГФ текстурой, ориентированной под углом  $\Theta$  к основному направлению течения, было проведено в работе [147]. Определялся максимум отношения  $|J_z/J_x|$  поперечной и продольной компонент плотности потока жидко-

сти, усредненного по ширине канала  $J_i = \int_0^h \langle u_i \rangle dy$ . Найдено выражение для оптимального уг-

ла наклона страйп-текстуры  $\Theta_{\text{max}} = \pm \arctan \left[ \frac{\left(1 + 4l_{\text{eff}}^{\parallel} / h\right) \left(1 + l_{\text{eff}}^{\perp} / h\right)}{\left(1 + l_{\text{eff}}^{\parallel} / h\right) \left(1 + 4l_{\text{eff}}^{\perp} / h\right)} \right]^{1/2}$  и соответствующее

значение максимального отношения расходов  $|J_z/J_x| = \frac{1}{2} \left[ \tan \Theta_{\max} - (\tan \Theta_{\max})^{-1} \right]$ . На основе

полученных соотношений были построены зависимости оптимального значения  $|J_z/J_x|$  от относительной высоты канала h/L при разных долях скользких участков  $\varphi$  (рис. 1.14). Видно, что перемешивание жидкости в широком канале (h/L >> 1) неэффективно при любых значениях  $\varphi$ , так как в этом случае отношение  $|J_z/J_x|$  стремится к нулю. В узком канале максимальное значение поперечного потока достигается при  $\varphi = 0.5$ . Таким образом, параметры СГФ страйп-текстуры, приводящие к наиболее эффективному смешиванию жидкостей, значительно отличаются от параметров текстур, при которых реализуется наибольшая длина скольжения [147].

В работе [177] теоретически исследованы особенности формирования вторичного течения в микроканале, верхняя и нижняя стенка которого покрыты перекрестными СГФ страйптекстурами, направленными под углом  $45^{\circ}$  к оси канала. Показано, что при числах Рейнольдса Re > 1 такая конфигурация приводит к формированию периодических вихрей независимо от наличия боковых стенок микроканала, что открывает новые возможности для использования СГФ поверхностей для интенсификации перемешивания жидкостей в микроканалах.

## 1.5.3. Перемешивание псевдопластичных жидкостей

В связи с тем, что многие биологические и медицинские приложения микрофлюидики имеют дело с процессами переноса неньютоновских полимерных жидкостей, задача об эффективности их перемешивания в микроскопических каналах представляется важной и своевременной. Тем не менее, на сегодняшний день существует весьма небольшое число работ, посвященных смешиванию неньютоновских и, в частности, псевдопластичных полимерных жидкостей в микроканалах. Так, численное моделирование [180] процессов смешивания жидкостей в микроканале с неоднородным распределением электрокинетического дзета-потенциала показало, что смешивание псевдопластичных сред происходит более эффективно, по сравнению с ньютоновскими жидкостями. С другой стороны, численные исследования течения в микромиксере в форме серпантина [58, 181] выявили, что при малых расходах интенсивность перемешивания ньютоновской и псевдопластичной жидкостей мало отличаются друг от друга, тогда как при увеличении расхода перемешивание псевдопластичных жидкостей протекает менее эффективно.

На сегодняшний день в литературе практически отсутствуют исследования по смешиванию псевдопластичных полимерных сред в каналах с СГФ стенкой. Следует, однако, отметить теоретические работы по перемешиванию псевдопластичных жидкостей в канале с переменной длиной скольжения – аналитический [182] и молекулярно-динамический [183] расчеты. Рассматривалось течения простого сдвига и Пуазейля ньютоновских и полимерных псевдопластичных жидкостей над гладкой стенкой с параллельными гидрофобными (с граничными условиями прилипания) и гидрофильными (с граничными условиями скольжения) полосками. Показано, что при поперечном течении формируется вторичной поток жидкости за счет возникновения вертикальной составляющей скорости, что способствует интенсификации смешивания. При этом перемешивание псевдопластичных жидкостей происходит менее интенсивно по сравнению с ньютоновскими жидкостями [182]. Более детальное МД моделирование [183] течения полимерного раствора над такими стенками с неоднородными граничными условиями показало, что вторичное течение становится более интенсивным, если радиус инерции полимерных цепей меньше, чем период неоднородности граничных условий. В противном случае течение полимерного раствора «нечувствительно» к переменным граничным условиям.

## 1.6. Формирование капель в коаксиальных микрокапиллярах

Капли микроскопического размера представляют значительный интерес в разнообразных приложениях, а также в химических, физических, медицинских и биологических исследованиях. Примерами могут служить химические микрореакторы [184, 185], микроконтейнеры для целевой доставки лекарственных препаратов [186, 187], микросферы фотонных и фононных кристаллов [188] и т.д. Одной из ключевых задач в данном направлении является получение монодисперсных капель заданного размера. Для решения этой проблемы используются разнообразные микрожидкостные устройства [189-195]. В отличие от традиционных макроскопических диспергаторов, в которых имеет место широкий разброс капель по размерам [196], микрожидкостные устройства позволяют формировать микрокапли с высокой степенью монодисперсности, а их размер зависит только от геометрии каналов и характеристик течения.

## 1.6.1. Типы устройств для производства микрокапель

Рассмотрим три наиболее распространенных типа микрожидкостных устройств для производства монодисперсных капель. К ним относятся микроустройства (i) с поперечным течением компонентов среды [190, 197, 198], (ii) с фокусирующим потоком [199-201], а также (iii) коаксиальные капилляры [202-204]. Устройства с поперечным течением дисперсной жидкости и сплошной среды представляют собой Т- или Ү-образные микроканалы (рис. 1.15(а)), в которых потоки двух несовместимых жидкостей встречаются под некоторым углом Ф. Устройство с Т-образным соединением было предложено в работе [197] для формирования монодисперсных капель воды в масле. Тобразные каналы широко используются и имеют коэффициент полидисперсности менее 2% [190]. Для получения капель минимального размера применяются устройства с фокусирующим капилляром (рис. 1.15(с)), в котором дисперсная и дисперсионная жидкости протекают через узкое фокусирующее отверстие или щель. В работе [199] такое устройство впервые было использовано для получения монодисперсной эмульсии с коэффициентом полидисперсности порядка 5%. Основной недостаток устройств с поперечным течением и фокусирующим потоком связан с тем, что режим течения в них сильно зависит от условий смачиваемости стенок канала дисперсной жидкостью [205-208].



**Рис 1.15.** Принципы формирования капель (а) в Т-образном (і) и Ү-образном капиллярах (іі); (в) в соосных прямолинейных капиллярах (і) и с использованием микросопла (іі); (в) в фокусирующем капилляре

Не менее эффективными, но более простыми и дешевыми являются микрожидкостные устройства на основе коаксиальных капилляров [204, 209]. Такие приборы состоят из двух или более соосных капилляров разных диаметров (рис. 1.15(б)). По внешнему капилляру протекает дисперсионная среда, а по внутреннему – дисперсная жидкость. Такое устройство впервые было использовано в работе [202]. Коэффициент полидисперсности в такой системе зависит от режима течения – капельного (dripping) или струйного (jetting). При капельном режиме течения формирующиеся капли характеризуются очень низким коэффициентом полидисперсности (< 1%) [204], тогда как при струйном режиме размер образующихся капель варьируется в достаточно широком диапазоне [191]. Таким образом, при использовании соосных капилляров важно понимать условия реализации того или иного режима формирования капель. Использование трех капилляров позволяет генерировать одноядерные композитные капли [210] (см. п. 1.7) и Янус-частицы [211].

## 1.6.2. Режимы течения в коаксиальных капиллярах

Режим формирования капель в коаксиальных капиллярах зависит от ряда параметров: вязкостей  $\eta_d$ ,  $\eta_c$ , средних скоростей течения  $U_d$ ,  $U_c$  дисперсной и внешней сред, межфазного натяжения  $\gamma$ , диаметров внутреннего и внешнего капилляров  $d_d$ ,  $d_c$ , формы каналов, условий взаимодействия дисперсной жидкости со стенкой канала (краевого угла смачивания  $\theta$ ), наличия скольжения на стенках капилляров, а также реологических свойств жидкостей [212]. Интерес представляет капельный (рис. 1.16(а)) и струйный (рис. 1.16(б, в)) режимы течения. Разные режимы течения двухфазной среды называют также динамическими или морфологическими состояниями. Механизм формирования капель при капельном режиме течения описывается следующим образом (рис. 1.16(а)) [191, 213]. При небольших скоростях обоих жидкостей, в процессе вытекания из внутреннего капилляра дисперсная жидкость формирует каплю под действием сил межфазного натяжения (рис. 1.16(a,i)). За счет поступающей из внутреннего капилляра жидкости, капля постепенно увеличивается. При этом между капилляром и каплей образуется тонкая шейка (рис. 1.16(a,ii)). С ростом капли, возрастают вязкие силы, действующие на нее со стороны набегающего потока дисперсионной жидкости, текущей по внешнему капилляру. Отрыв капли происходит в момент равенства внешних вязких сил и сил межфазного натяжения в наиболее узкой ее части – шейке,  $\eta_c U_d D \approx \gamma d_{neck}$  (D – диаметр капли, *d*<sub>neck</sub> – диаметр шейки) (рис. 1.16(a,*iii*)) [191, 213].



**Рис. 1.16.** Режимы формирования капель: (а) капельный (*dropping*) [216], (б) сужающаяся струя (*narrowing jetting*) [191], (в) расширяющаяся струя (*widening jetting*) [216].


Рис. 1.17. Диаграммы режимов течения при больших числах Рейнольдса  $Re_d > 1$  в координатах ( $Ca_c$ - $We_d$ ) (а) ( $\eta_d/\eta_c = 0.01$  (квадраты, ромбы), 0.1 (круги, шестиугольники), 1 (пятиугольники), 10 (треугольники, звезды)) [191] и при малых числах Рейнольдса  $Re_d < 1$  в координатах ( $Ca_c$ - $Ca_d$ ) в соответствии с работами [213] (б) и [216] (в).

С увеличением расходов жидкостей, происходит переход от капельного режима к струйному, который сопровождается формированием струи с последующим ее распадом вследствие капиллярной неустойчивости Релея-Плато [214]. Отметим, что струйный режим течения не подходит для формирования монодисперсных капель из-за высокого коэффициента полидисперсности. Однако, этот режим может быть использован для получении микроволокон [215]. Режим струеобразования можно разделить на два типа [191]: режим сужающейся струи (*narrowing jetting*) и режим расширяющейся струи (*widening jetting*). Переход к режиму сужающейся струи наблюдается при увеличении скорости потока внешней жидкости. В момент, когда диаметр формирующейся капли становится равным диаметру внутреннего капилляра, происходит резкий переход к струйному режиму, а диаметр образующейся струи уменьшается по мере отдаления от внутреннего капилляра (рис. 1.16(б)). Поскольку переход к режиму сужающейся струи определяется конкуренцией вязких сил внешней среды и капиллярных сил на межфазной границе, то данный переход описывается капиллярным числом внешней жидкости ( $Ca_c = \eta_c U_c/\gamma$ . В момент переход к режиму сужающейся струи критическое капиллярное число примерно равно  $Ca_c^* \approx 0.5$  [191, 213].

Переход к режиму расширяющейся струи возникает при увеличении скорости дисперсной жидкости. В устройствах с внутренним капилляром в форме микросопла (см. рис. 1.15(б,*ii*)), скорость истечения дисперсной жидкости может достигать нескольких метров в секунду при диаметре выходного отверстия порядка 20-100 мкм [62, 216]. В таких устройствах переход к этому режиму происходит за счет доминирования инерционных силы [191] и описывается числом Вебера  $We_d = \rho_d d_d U_d / \gamma$ , которое характеризует соотношение инерционных и капиллярных сил. Переход к режиму расширяющейся струи в прямолинейных внутренних капиллярах с диаметрами выходного отверстия 100-300 мкм ( $Re_c < 1$ ) обусловлен преобладанием вязких сил над капиллярными и имеет место при увеличении вязкости дисперсной жидкости даже при небольших скоростях истечения  $U_d \approx 1$  мм/с [213, 217].

Результаты исследований образования различных динамических структур течения обобщались в виде диаграмм 1) в координатах  $Ca_c$ - $We_c$  для систем с числом Рейнольдса  $Re_d > 1$  (рис. 1.17(а)) [191] и 2) в координатах  $Ca_c$ - $Ca_d$  для  $Re_d < 1$  (рис. 1.17(б,в)) [213, 218]. Как видно, условия перехода между капельным и струйным режимами достаточно подробно исследовались при  $Re_d > 1$ , тогда как для систем со сравнительно небольшими числами Рейнольдса,  $Re_d < 1$  дисперсной жидкости, условия для образования различных режимов исследованы недостаточно. В частности, в работе [213] (см. рис. 1.17(б)) рассмотрен ограниченный диапазон значений  $Ca_d$ , тогда как в работе [216] (рис. 1.17(в)), наоборот, рассмотрен ограниченный диапазон значений  $Ca_c$ .

Помимо капельного и струйного режимов течения, в соосных капиллярах были классифицированы и другие режимы. Среди них – поток мелких капель с острого кончика дисперсной фазы (*tip-streamming*) [217, 219] (рис. 1.18(a)). Такой режим возникает при малых значениях  $Ca_d$  и больших  $Ca_c$  и может быть использован для формирования субмикронных капель [220]. Еще один механизм формирования капель, который можно назвать усадочным (*«interface - shrinkage – driven» mechanism*), был обнаружен при высоком краевом угле дисперсной жидкости на поверхности внутреннего канала [221]. Особенность этого механизма заключается в том, что отрыв капли происходит внутри малого капилляра (рис. 1.18(б)), что приводит к существенному снижению размера капель. Кроме того, в этом случае размер капель слабо зависит от расхода внешней жидкости [221].



Рис. 1.18. (а) Тип-стримминг [218, 219], (б) усадочный механизм [221].

#### 1.6.3. Размер капель в соосных капиллярах

Вопрос о влиянии физических и гидродинамических параметров системы на размер микрокапель чрезвычайно важен для формирования капель заданного размера. На рис. 1.19 представлены экспериментальные зависимости размера капель от отношения расходов  $Q_c/Q_d$  (рис. 1.19(а)) и капиллярных чисел  $Ca_c/Ca_d$  непрерывной и дисперсной сред (рис. 1.19(б)) [217] при небольших числах Рейнольдса  $Re_d < 1$ . Видно, что микрокапли уменьшаются с увеличением скорости и вязкости во внешнем капилляре. Такое поведение связано с тем, что увеличением скорости или вязкости обтекающей жидкости приводит к росту срывающих напряжений [191, 213, 216, 217].



**Рис. 1.19.** Зависимости размеров капель *D* от отношения расходов  $Q_c/Q_d$  (а) и капиллярных чисел  $Ca_c/Ca_d$  (б) внешнего и внутреннего капилляров при различных вязкостях внешней среды при  $\eta_d = 0.72$  сП [217]. Диаметры каналов –  $d_d^{out} = 260$  мкм,  $d_c = 1.6$  мм.



Рис. 1.20. Зависимости размера капель от отношения диаметров внешнего и внутреннего капилляров  $d_c / d_d^{out}$  (средние скорости течения жидкостей  $U_d = 0.0066$  м/с,  $U_c = 0.3411$  м/с) (а) и от краевого угла дисперсной жидкости на стенке внутреннего канала ( $Q_d = 83.33$  мл/час,  $Q_c = 0.03$  мл/час) (б) [216]. Диаметры капилляров  $-d_d^{out} = 40$  мкм,  $d_c = 300$  мкм. Вязкости –  $\eta_d = 49 \cdot 10^{-3}$ Па·с (соевое масло),  $\eta_c = 10^{-3}$  Па·с (вода).

Кроме того, на размер капель существенно влияет величина отношения диаметров внешнего и внутреннего капилляров  $d_c/d_d^{out}$  ( $d_d^{out}$  – диаметр внутреннего капилляра с учетом толщины стенок). В работе [216] показано, что увеличение этого отношения от 1.1 до 8 приводит к увеличению размера капель, тогда как при  $d_c/d_d^{out} > 8$  достигается предельный размер капель, который не зависит от диаметра внешнего капилляра (см. рис. 1.20(а)). Также в работе [216] было показано, что уменьшение краевого угла смачивания способствует росту размера капель за счет частичного смачивания внешней поверхности внутреннего капилляра (рис. 1.20(б)).

#### 1.6.4. Формирование капель в соосных капиллярах при обтекании псевдопластичной жидкостью

На сегодняшний день существует лишь одна работа, в которой экспериментально и численно исследуются закономерности формирования ньютоновских капель при их обтекании псевдопластичной жидкостью в соосных капиллярах [62]. В качестве дисперсной среды использовалось силиконовое масло вязкостью 10 сП, а в качестве сплошной среды – водные растворы полиэтиленгликоля и карбоксиметилцеллюлозы. Для численных расчетов использовалась модель Каро-Ясуда (1.2). Внутренним капилляром служило микросопло с диаметром выходного сечения 49 мкм. Была построена диаграмма режимов течения в координатах We<sub>d</sub>-Ca<sub>c</sub> (рис. 1.21) и выполнено сравнение с диаграммой, построенной в работе [191] (см. рис. 1.17(а) и пунктирная линую линию на рис. 1.21). Капиллярное число псевдопластичной жидкости на диаграмме принималось равным  $Ca = \eta_0 U_c / \gamma$ , где  $\eta_0$  – нулевая вязкость. На данной диаграмме наблюдается широкая область с переходным режимом течения (синие символы), который сопровождается формированием длинной устойчивой шейки между каплей и капилляром. Отметим, что данная область отсутствует на соответствующей диаграмме для ньютоновских жидкостей. Это связано с тем, что увеличение скорости истечения дисперсной фазы (увеличение числа We<sub>d</sub>) приводит к росту скорости сдвига вблизи границы раздела жидкостей и, вместе с этим – к снижению вязкости сплошной среды (см. рис. 1.3). Таким образом, при значениях числа Вебера We<sub>d</sub>, которые для ньютоновской сплошной среды соответствуют развитому струйному режиму течения, в данном случае реализуется лишь переходный режим течения, что обусловлено снижением вязких напряжений в псевдопластичной жидкости.

Также исследовалось влияние капиллярного числа  $Ca_c$  сплошной среды на размер капель при разных значениях числа Вебера  $We_d$  дисперсной жидкости (рис. 1.22). Показано, что локальное уменьшение вязкости псевдопластической жидкости вблизи межфазной границы приводит к увеличению размера капель по сравнению с ньютоновской обтекающей

40



**Рис. 1.21.** Диаграмма режимов ( $Ca_c$ - $We_d$ ) формирования ньютоновских капель при обтекании псевдопластичной жидкостью [62]. Пунктирной линией представлена граница перехода между капельным и струйным режимами для случая обтекания ньютоновской жидкостью (ср. рис. 1.17(а)) [189].



**Рис. 1.22.** Зависимость диаметра капель от капиллярного числа дисперсионной среды при  $We_d = 1.852$  (синие символы - псевдопластичная, зеленые – ньютоновская дисперсионная среда) (а) и  $We_d = 1.852$  (псевдопластичная жидкость) (б) [62].

средой (рис. 1.22(а)). При этом при больших значениях числа Вебера дисперсного компонента  $We_d$  зависимость размера капель от  $Ca_c$  является монотонной (рис. 1.22(а)), что объясняется увеличением вязких напряжений обтекающей жидкости. Однако, с уменьшением  $We_d$ данная зависимость становится немонотонной (рис. 1.22(б)). Сначала вязкость обтекающей жидкости вблизи капли уменьшается в силу того, что скорость сдвига лежит в области псевдопластичного поведения среды, где имеет место уменьшение вязкости с ростом скорости сдвига (рис. 1.3 и рис. 1.4). Это способствует уменьшению вязких напряжений и росту капель. Дальнейшее увеличение капиллярного числа, приводит к тому, что скорость сдвига вокруг капель достигает значений, при которых вязкость почти не меняется, и размер капель начинает снижаться за счет увеличения вязких напряжений, как это происходит в ньютоновской среде (ср. рис. 1.21(а)). Из исследования, проведенного в работе [62] следует, что на размер формирующихся капель основное влияние оказывает локальные изменения вязкости псевдопластичной жидкости за счет изменения локальных градиентов скорости сдвига вблизи межфазной границы.

Таким образом, в настоящее время остается неизученным вопрос о влиянии псевдопластичной сплошной среды на закономерности формирования капель в соосных капиллярах с относительно большими диаметрами внутреннего канала и небольшими скоростями истечения дисперсной среды ( $Re_d < 1$ ). Решению этой задачи посвящена четвертая глава диссертации.

## 1.7. Гидродинамическое поведение однородной и композитной капель в микроканалах при течении простого сдвига

В связи с активной разработкой таких важных проблем, как переработка тройных смесей полимеров, целевая доставка лекарственных препаратов, создание функциональных микрокапсул и микрореакторов, исследование закономерностей гидродинамического поведения капель, содержащих одно или более включений с отличными гидродинамическими свойствами, является весьма актуальной задачей. Такие структуры получили название композитных капель. В данном обзоре мы ограничимся рассмотрением деформационного поведения однородных и одноядерных композитных капель, состоящих из ньютоновских жидкостей.

#### 1.7.1. Однородная капля

Сначала остановимся на работах, посвященных исследованию гидродинамического поведения однородных капель при течении простого сдвига (течении Куэтта) (рис. 1.23(а)). В широком канале такое поведение определяется двумя безразмерными параметрами: капиллярным числом  $Ca = \eta_1 a \dot{\gamma} / \gamma$  и отношением  $m = \eta_2 / \eta_1$  вязкостей капли  $\eta_2$  и окружающей среды  $\eta_1$  (*a* – радиус капли). В зависимости от значений *m* и *Ca* в данном случае возможны четыре типа гидродинамического поведения капли [222] (рис. 1.23(б)): (i) при очень малом отношении вязкостей,  $m \sim 10^{-4} \ll 1$ , капля принимает S-образную форму с отделяться заостренными концами, от которых с увеличением Ca начинают микроскопические капли (tip-streaming); (ii) при  $10^{-4} \ll m < 1$ , рост *Ca* приводит к растяжению капли и последующему ее распаду на множество более мелких капель; (iii) при  $m \sim 1$  разрушению капли предшествует образование шейки, а после ее распада образуются две большие и несколько микроскопических (сателлитных) капель; (iv) высоковязкая капля (m > 4) сохраняет целостность при любых значениях Ca, и лишь слегка вытягивается, ориентируясь вдоль потока.



**Рис. 1.23.** Деформация и ориентация капли при течении простого сдвига (а) и гидродинамическое поведение ньютоновской капли при разных отношениях вязкостей с увеличением капилярного числа *Ca*: (*i*)  $m \sim 10^{-4}$ , (*ii*)  $10^{-4} << m < 1$ , (*iii*)  $m \sim 1$ , (*iv*) m > 4 (б) [222].

Предельное поведение капли определяется критическим капиллярным числом  $Ca_{cr}$ , выше которого капля разрушается. В работе [223] были проанализированы все известные на тот момент экспериментальные данные при течении простого сдвига и построена зависимость  $Ca_{cr}$  от отношения вязкостей *m*, которая получила название кривой Грейса (рис. 1.24). Видно, что наименьшие критические капиллярные числа соответствуют равным вязкостям капли и матрицы ( $m \sim 1$ ). Уменьшение или увеличение отношения *m* приводит к росту критического капиллярного числа. При этом при течении простого сдвига высоковязкую каплю ( $m \ge 4$ ) невозможно разрушить даже при очень больших значениях капиллярных чисел.

Одна из первых теоретических работ по исследованию деформации капли при течении сдвига была выполнена Тейлором в 1932 г. [224]. Было показано, что в режиме медленных течений,  $Ca \ll 1$ , стационарная тейлоровская деформация  $D_{\rm T} = (A-B)/(A+B)$  ( $A \parallel B - 6$ ольшая и малая полуоси капли, см. рис. 1.23(а)) однородной капли пропорциональна капиллярному числу и определяется, как  $D_{\rm T} = Ca \frac{19m+16}{16m+16}$ . Другой предельный случай был теоретически изучен в работе [225], в которой рассматривалась сильно вытянутая маловязкая капля ( $Ca \gg 1, m \ll 1$ ) (синяя линия на рис. 1.24). Для описания деформационного и предельного поведения однородной капли при промежуточных значениях капиллярных чисел использовались численные методы [226].

Представленные выше результаты справедливы для случая широкого канала, когда его ширина h много больше диаметра капли 2a ( $2a \ll h$ ). В этом случае влиянием стенок канала можно пренебречь. Если же диаметр капли соизмерим с шириной канала (*режим конфайн-мента*), то твердые стенки оказывают существенное влияние на гидродинамику капли. Степень стеснённости капли характеризуется *параметром конфайнмента* n = 2a/h. Численные расчеты показывают, что при n < 0.4 влияние стенок на деформационное поведение однородной капли пренебрежимо мало [227, 228]. Для малых деформаций была рассчитана по-



**Рис. 1.24.** Зависимость критического капиллярного числа *Ca*<sub>cr</sub> от отношения вязкостей *m* ньютоновских капли и окружающей среды при течениях простого сдвига: экспериментальные данные (символы) [223], сплошные линии соответствуют теоретическим решениям – синяя линия соответствует модели сильно вытянутой капли [225], а черная линия – модели малых деформаций [224].

правка к формуле Тейлора, которая учитывает близость стенок канала:  

$$D_{\rm T} = Ca \frac{19m+16}{16m+16} \left[ 1 + C_{\rm w} \frac{1+2.5m}{8(1+m)} n^3 \right]$$
 [228], где  $C_{\rm w}$  – параметр, зависящий от расстояния меж-

ду центром капли и стенками. Кроме того, применительно к узкому каналу в работе [230] была модифицирована теория сильновытянутых маловязких капель [225].

Экспериментальное исследование закономерностей деформирования вязкой капли при течении простого сдвига в узком канале впервые было проведено в работе [231]. Вязкости капли и сплошной ньютоновской среды подбирались равными m = 1, а капиллярное *Ca* число изменялось от 0.1 до 0.3. При выбранных параметрах капля не разрушалась и достигала не-которой стационарной деформации. Как видно из рис. 1.25(а), с увеличением параметра кон-файнмента *n* стационарная тейлоровская деформация  $D_{\rm T}$  капли возрастает при всех рассмотренных значениях *Ca*. Также в работе показано, что при n = 1 в процессе течения возникают осцилляции относительного удлинения капли *A/a* во времени (рис. 1.25(б)).

Особенности разрушения однородной капли при течении простого сдвига в условиях конфайнмента исследовалось в работах [42, 232] при различных отношениях вязкостей m. Показано, что при m = 1 конфайнмент не оказывает существенного влияния на критическое капиллярное число  $Ca_{cr}$ . При m < 1 увеличение параметра конфайнмента n приводит к росту  $Ca_{cr}$ , откуда можно заключить, что сужение зазора между твердыми стенками приводит к дополнительной стабилизации маловязкой капли. В то же время при m > 1 соответствующие критические капиллярные числа, напротив, уменьшаются. Оказалось, что уже при n > 0.6 вы-

44



**Рис. 1.25.** Влияние конфайнмента на деформационное поведение однородной капли: (a) – зависимости стационарной тейлоровской деформации  $D_{\rm T}$  от параметра конфайнмента *n* при Ca = 0.1, 0.2 и 0.3; (б) – эволюции удлинения капли A/a во времени при и n = 1 (условия конфайнмента) и n = 0.1 (широкий канал) (вставка). Отношение вязкостей m = 1 [231].

соковязкая капля (m > 4) может разрушаться при сравнительно небольших значениях капиллярного числа. Таким образом, при разных вязкостях капли и окружающей среды влияние конфайнмента на деформационное и предельное поведение однородных капель носит различный характер.

#### 1.7.2. Композитная капля

При рассмотрении тройной смеси термодинамически несовместимых жидкостей с двумя дисперсными фазами 1 и 3 в дисперсионной среде 2 возможно как раздельное распределение капель 1 и 3, так и поглощение компонента 1 фазой 3 или компонента 3 фазой 1. Условия устойчивости таких конфигураций определяется путем минимизации свободной энергии системы и зависит от знаков коэффициентов растекания  $S_i = \gamma_{ik} - (\gamma_{ij} + \gamma_{ik})$  [233]. Если принять, что межфазное натяжение  $\gamma_{12}$  на границе раздела сплошной среды 2 и фазы 1 больше межфазного натяжения  $\gamma_{23}$  ( $S_1 < 0$ ), то конфигурация системы будет определяться значениями коэффициентов  $S_2$  и  $S_3$  (рис. 1.26(a)): (i) при  $S_2 > 0$ ,  $S_3 < 0$  фазы 2 и 3 изолированы друг от друга; (ii) при  $S_2 < 0$ ,  $S_3 < 0$  фазы 2 и 3 частично слипаются и образуют т.н. янус-частицы; (iii) при  $S_2 < 0$ ,  $S_3 > 0$  фаза 1 инкапсулируется в фазу 3 и образует одноядерную композитную каплю. Таким образом, композитная капля формируется только при определенных знаках коэффициентов растекания. На рис. 1.26 представлены примеры морфологий трехфазных



**Рис. 1.26.** Возможные состояния трехкомпонентной смеси (а). Композитная капля в трехфазной системе силиконовое 1-масло/2-вода/3-sextolphtalate (б) и Янус частица в системе 1-вода/2-силиконовое масло/3-касторовое масло (в) [233].

смесей при разных значениях коэффициентов растекания – композитные капли (рис. 1.26(б)) и янус-частицы (рис. 1.26(в)).

Композитная капля является более сложным для исследований объектом, поскольку в отличие от однородной капли содержит две межфазные границы раздела, а ее гидродинамическое поведение определяется пятью параметрами: капиллярным числом Са, отношением вязкостей внешнего слоя и матрицы  $m_{21}$ , отношением вязкостей ядра и оболочки  $m_{32}$ , отношением межфазных натяжений  $\chi = \gamma_{32}/\gamma_{21}$  и отношением невозмущенных радиусов ядра и оболочки k = b/a. По этой причине аналитическое решение задачи о деформировании композитной капли можно получить только при достаточно малых капиллярных числах [224, 229], тогда как общее решение может быть получено только с использованием численных методов. Так, в работе [234] методом функции уровня (level set method) было проведено компьютерное моделирование структурирования двухмерной композитной капли в процессе течения простого сдвига при различных отношениях межфазных натяжений χ и вязкостей m<sub>32</sub>. Рассматривались два предельных случая:  $\chi \ll 1$ ,  $m_{32} >> 1$  и  $\chi \gg 1$ ,  $m_{32} << 1$  (рис. 1.27). В первом случае ядро практически не деформируется из-за большой вязкости. Гидродинамическое поведение такой капли существенно отличается от поведения однородной капли вследствие эффекта подпирания со стороны ядра (рис. 1.27(а)). Во втором случае, маловязкое ядро, окруженное сильновязкой оболочкой, принимает форму гантели, концы которой растекаются вдоль внешнего периметра окружающего слоя (рис. 1.27(б)). Такому движению способствует два вихря, образующихся на концах внутренней капли.

Методами численного моделирования были изучены процессы деформирования и разрушения композитной капли с равными плотностями фаз и коэффициентами межфазных натяжений [235]. Показано, что конкуренция вязких напряжений и капиллярных сил приво-

46



**Рис. 1.27.** Эволюция композитной капли при течении простого сдвига: (*a*) деформированное состояние капли в момент времени t = 1 при k = b/a = 0.8,  $m_{32} = 10$ ,  $m_{21} = 1$ ,  $\chi \ll 1$ ,  $Ca_{23} = 1$ , Re = 0.005, (б) перемешивание маловязкого ядра внутри сильновязкого слоя в момент времени t = 3 при k = 0.8,  $m_{32} = 0.001$ ,  $m_{21} = 1$ ,  $\chi \gg 1$ ,  $Ca_{21} = 0.05$ , Re = 0.005 [234].

дит к образованию вихрей скорости в окрестности внешней границы капли. При этом ядро капли растягивается в основном под влиянием вихревого течения внутри капли, что существенно ограничивает его деформацию. Было доказано, что наличие ядра существенно влияет на критическое капиллярное число  $Ca_{cr}$  распада капли, которое уменьшается при любых значениях относительных вязкостей ядра и оболочки  $m_{32}$  и  $m_{21}$  по сравнению с однородной каплей.

Влияние конфайнмента на деформационное поведение композитной капли при  $m_{32} = m_{21} = 1$  впервые было рассмотрено в работе [236] методами численного моделирования. Показано, что, как и в случае однородной капли, влияние стенок приводит к значительному увеличению деформации композитной капли. Расчеты показали, что чем больше параметр конфайнмента *n*, тем больше разница в поведение однородной и композитной капель. В работе [237] исследована динамика достижении стационарного состояния однородной и композитной капли: (i) без осцилляций (*overdamped*) (малые деформации и капиллярные числа) и (ii) с осцилляциями (*underdamped*) (большие деформации и капиллярные числа). Построена диаграмма деформационных состояний в зависимости от капиллярные числа и состава композитной капли *k* = *b/a* (рис.1.28). Как видно, с ростом ядра осцилляционный режим начинает проявляться при меньших значениях капиллярного числа.

В работе [238] выполнено экспериментальное и численное исследование стационарной деформации композитной капли при равных вязкостях компонентов среды, разных капиллярных числах *Ca* и отношениях радиусов ядра и оболочки *k*. Показано, что ядро может приводить как к увеличению деформации композитной капли, так и к ее уменьшению в зависимости от значений относительного размера ядра k = b/a и капиллярных чисел. На рис. 1.29



**Рис.1.28.** Диаграмма деформационных состояний композитной капли в координатах капиллярного числа и относительного размера ядра *k*. Синие символы соответствуют осцилляционному режиму деформирования, красные – без осцилляций [237].

представлен график зависимости стационарной тейлоровской деформации капель от k при разных значениях капиллярных чисел *Ca*. Как видно, имеет место немонотонная зависимость от k. При этом с ростом капиллярного числа значения k, соответствующие максимальной деформации, уменьшаются. Отметим, что аналогичные результаты были независимо получены в статье [271], которая была опубликована несколькими месяцами позже в ходе работы над настоящей диссертацией (см. Главу 5).



**Рис. 1.29.** Зависимости тейлоровской деформации капель от относительного размера ядра при различных значениях капиллярного числа *Ca* [238].

#### Выводы по литературному обзору

Проведенный анализ литературы показал, что исследование особенностей течения однородных и многофазных жидкостей в микроскопических каналах является исключительно важной задачей. Среди наиболее актуальных проблем следует выделить поиск путей снижения гидродинамического сопротивления в микроканалах, интенсификация перемешивания жидкостей, исследование механизмов формирования монодисперсных микрокапель, а также деформационного и предельного поведения композитных капель в условиях конфайнмента.

Из литературного обзора следует:

- 1. Подавляющее большинство исследований в области микрофлюидики реализовано на примере ньютоновских жидкостей. В связи с этим, представляется целесообразным исследовать особенности течения неньютоновских жидкостей в микроканалах, в том числе псевдопластичных полимерных сред, вязкость которых нелинейно зависит от скорости сдвига.
- 2. Супергидрофобные анизотропные поверхности могут быть эффективно использованы для снижения гидродинамического сопротивления и перемешивания жидкостей в микроскопических каналах. Однако, вопрос об эффективности использования супергидрофобных страйп-текстур применительно к неньютоновским полимерным средам до недавнего времени оставался в значительной степени открытым. Решение этих задач на примере псевдопластичной полимерной среды будет рассмотрено в третьей главе диссертации.
- 3. Соосные капилляры являются эффективным инструментом для генерации монодисперсных микрокапель заданного размера, а также для формирования микроволокон. В литературе, однако, отсутствуют систематические исследования условий возникновения капельного и струйного режимов течения. По этой причине, построение диаграмм динамических состояний двухфазных жидкостей в широком диапазоне физических и гидродинамических параметров является своевременной и важной задачей. Не менее важной проблемой является влияние псевдопластичности дисперсионной среды на размер капель, формирующихся в соосных капиллярах. Эти вопросы будут освещены в четвертой главе диссертации.
- 4. Исследование гидродинамического поведения одноядерных композитных капель представляет заметный интерес для понимания функционирования микрореакторов и микроконтейнеров при целевой доставке веществ и лекарственных препаратов. Использование таких объектов в микрокапиллярах диктует необходимость исследования деформационного поведения и распада композитных капель в узких микроканалах (в условиях конфайнмента). В научной литературе эти вопросы освещены весьма слабо. Результаты, полученные в этом направлении, будут представлены в пятой главе диссертации.

## Глава 2. Методы численного моделирования течения однородных и дисперсных жидкостей

Анализ течения ньютоновских и неньютоновских однородных и многокомпонентных сред основан на решении системы нелинейных дифференциальных уравнений Навье-Стокса с учетом зависимости вязкости от скорости сдвига, а также динамической эволюции формы границ раздела между жидкими компонентами. Некоторые аналитические решения для распределения скорости течения таких сред в каналах с гладкими стенками и однородными граничными условиями были получены только (i) для ньютоновских жидкостей, вязкость которых остается постоянной, (ii) для простейшей степенной модели Оствальда-де-Вела, которая предполагает линейную зависимость вязкости от скорости сдвига (см. п. 1.2) [61, 239], а также (iii) при малой амплитуде возмущений межфазных границ [224, 230]. Исследование течений более сложных моделей неньютоновских жидкостей при произвольных решениях течений многокомпонентных сред и/или неоднородных граничных условиях требует использования методов численного моделирования.

В данной главе приводится математическая постановка и описание численных методов решения рассматриваемых в диссертации задач о течении однородных и дисперсных несжимаемых жидкостей в микроканалах с однородными и неоднородными граничными условиями.

В качестве базы для численного моделирования использовались программный код разработанный сотрудниками Отдела экстремального состояния вещества ИПХФ РАН [234] (метод конечных разностей, метод функции уровня), а также программные коды открытой вычислительной платформы OpenFOAM [242, 243] (метод конечных объемов и метод объемов жидкости).

#### 2.1. Математическая поставка задач

Поскольку средние межмолекулярные расстояния в жидкости по порядку величины составляют 0.3 нм [33], в каналах с характерными размерами от нескольких микрон справедлива гипотеза сплошности и, соответственно, вполне обосновано применение гидродинамических уравнений Навье-Стокса, которые отражают закон сохранения импульса сплошной среды [34, 244]. В диссертации рассматриваются течения однородных и многокомпонентных несжимаемых жидкостей в микроканалах шириной от 10 мкм до 1 мм. В этом случае система уравнений Навье-Стокса и условия несжимаемости записываются следующим образом:

$$\rho_{t}\left(\frac{d\mathbf{u}_{t}}{dt} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_{t} \otimes \mathbf{u}_{t})\right) = -\nabla p_{t} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{t} + \mathbf{F}$$
(2.1)

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_i = 0. \tag{2.2}$$

Здесь **u** – вектор скорости, *p* – давление, **F** – объемная сила, **σ** =  $2\eta$ **D** – тензор вязких напряжений, **D** =  $\frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$  – тензор скоростей деформации, **u**  $\otimes$ **u** - тензорное произведение векторов скорости. Греческий индекс *ι* соответствует номерам компонентов среды. Для однородной жидкости *i* = 1 (Глава 3), двухкомпонентной среды *i* = 1, 2 (Глава 4) и трёхкомпонентной среды *i* = 1, 2, 3 (Глава 5).

В зависимости от решаемых задач, в диссертационной работе рассматриваются различные граничные условия на стенках микроканалов: прилипание, скольжение или их чередование. В частности, в задаче о течении ньютоновской и псевдопластичной полимерной жидкостей над СГФ стенкой (Глава 3), границы раздела жидкость-твердая стенка и жидкость-газ представляются в виде плоских участков с граничными условиями прилипания  $\mathbf{u}|_{s} = 0$  и идеального скольжения  $\frac{\partial u}{\partial y}|_{s} = 0$ , соответственно. В задаче о формировании капель в коаксиальных капиллярах (Глава 4) рассматриваются оба вида граничных условий (прилипания и скольжения), тогда как при исследовании деформационного поведения композитной капли при течении простого сдвига (Глава 5) рассматриваются только граничные условия прилипания. При рассмотрении течения жидкости в микроканалах с СГФ стенкой кривизна менисков между жидкостью и заполненными газом бороздками принимается пренебрежимо малой. По этой причине границы раздела жидкость-газ моделируется в виде плоских участков с граничными условиями скольжения. При моделировании деформационного поведения и формирования микрокапель на межфазных границах принимаются условия непрерывности скоростей и сдвиговых напряжений между фазами *t* и  $\omega$ 

$$\mathbf{u}_{t} = \mathbf{u}_{\omega}, \quad \mathbf{t}_{s} \cdot (\mathbf{\sigma}_{t} - \mathbf{\sigma}_{\omega}) \cdot \mathbf{n}_{s} = 0, \quad (2.3)$$

где  $\mathbf{n}_s$  и  $\mathbf{t}_s$  – нормальный и касательный единичные векторы к границе раздела фаз. При этом межфазное натяжение приводит к скачку нормальных компонентов полного тензора напряжений:

$$\mathbf{n}_{s} \cdot (\boldsymbol{\sigma}_{t} - \boldsymbol{\sigma}_{\omega}) \cdot \mathbf{n}_{s} - (p_{t} - p_{\omega}) = \gamma \kappa , \qquad (2.4)$$

где  $\gamma$  – коэффициент межфазного натяжения, а  $\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}_s$  – кривизна границы раздела.

Дифференциальные уравнения (2.1), (2.2) вместе с соответствующими граничными условиями полностью определяют гидродинамическое поведение многокомпонентной жидкой среды в произвольный момент времени. Однако, для численных расчетов межфазное натяжение удобнее рассматривать в виде объемной силы  $\mathbf{F} = \gamma \kappa \delta(S) \mathbf{n}_s$ , локализованной на границе раздела фаз S и направленной перпендикулярно в каждой ее точке [245], где  $\delta(S)$  – поверхностная дельта-функция Дирака. С учетом такой поправки уравнение Навье-Стокса (2.1) принимает следующий вид

$$\rho_i \left( \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i) \right) = -\nabla p_i + \nabla \cdot (2\eta_i \mathbf{D}) - \gamma \kappa \delta(S) \mathbf{n}_s , \qquad (2.5)$$

а граничные условия (2.3) и (2.4) выполняются автоматически.

В качестве псевдопластичной жидкости, рассматривается водный раствор полиакриламида (ПАА) с концентрацией полимера 500 ppm [56] (см. рис. 1.4). Зависимость вязкости такой среды от скорости деформаций моделируется соотношением Каро-Ясуда (1.2).

#### 2.2. Методы аппроксимации межфазных границ

При моделировании гидродинамического поведения многокомпонентных жидких сред, важную роль играет процедура расчета текущей формы межфазных границ раздела в произвольный момент времени. Существующие подходы к решению такой задачи можно разделить на две группы. К первой группе относятся численные алгоритмы, в которых используется специальная расчетная сетка, которая привязана к границе раздела между компонентами среды и изменяется вместе с ней в процессе течения. В качестве примеров таких методов следует упомянуть (i) метод отслеживания фронта (Front tracking method) [246] и (ii) метод граничных элементов (Boundary element methods) [247]. Существенным недостатком такого подхода является сложность построения сетки, особенно в случаях, когда межфазная граница принимает достаточно сложную форму или при слиянии или разрушении капель. Ко второй группе относятся методы, в которых водится некоторый параметр, используемый для восстановления положения межфазной границы на каждом временном шаге и не зависит от расчетной сетки. Такие методы с легкостью позволяют воспроизводить разрывы и объединения межфазных границ. В настоящей работе используется вторая группы методов, а именно, метод функции уровня (LS – level set method) [248, 249] и метод объема жидкости (VOF – volume of fluid) [250]. В диссертации метод функции уровня применяется для моделирования деформационного поведения 2D композитной капли (Глава 5) наряду с методом конечных разностей (п. 2.3.1). В свою очередь, метод объема жидкости вместе с методом конечных объемов (п. 2.3.2) применяется при моделировании формирования капель в коаксиальных капиллярах (Глава 4), а также особенностей деформирования и разрушения высоковязкой 3D композитной капли (Глава 5).

#### 2.2.1. Метод функции уровня

В этом методе пространственное положение точек межфазной границы определяется координатами нулевого уровня некоторой гладкой функции  $\phi(\mathbf{x},t)$ , значения которой соответствуют расстоянию от границы раздела фаз *d* таким образом, что в сопряженных фазах  $\phi(\mathbf{x},t)$  принимает противоположные знаки  $\phi(\mathbf{x},t) = \pm d(t)$ , а на межфазной границе  $\phi(\mathbf{x},t) = 0$  [248, 249]. Построение функции уровня  $\phi(\mathbf{x},t)$  до границы раздела в начальный момент времени представляет самостоятельную задачу.

Поскольку межфазная граница движется вместе с частицами жидкости, ее положение в каждый момент времени подчиняется уравнению переноса

$$\frac{\partial \boldsymbol{\phi}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\phi} = 0, \qquad (2.6)$$

где  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_1$  при  $\phi \ge 0$  и  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_2$  при  $\phi < 0$ . Уравнение переноса (2.6) решается методом кубической интерполяции псевдочастицами (Cubic-Interpolated Pseudoparticle (CIP)), который был разработан для решения уравнений гиперболического типа [251-253]. Зная  $\phi(\mathbf{x}, t)$ , можно определить единичный вектор нормали  $\mathbf{n}_s$  и кривизну  $\kappa$  в произвольный точке границы раз-

дела 
$$\mathbf{n}_{s} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}\Big|_{\phi=0}$$
.  $\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}\right)\Big|_{\phi=0}$ 

Для сглаживания скачков плотности и вязкости, возникающих при переходе из одной фазы в другую, вводится симметричный относительно границы раздела переходный слой ширины 2є. В этом случае локальные вязкости и плотности двухкомпонентной системы можно представить в форме непрерывных функций

$$\rho(\phi) = \rho_2 + (\rho_1 - \rho_2)H(\phi),$$
(2.7a)

$$\eta(\phi) = \eta_2 + (\eta_1 - \eta_2)H(\phi), \qquad (2.76)$$

где  $H(\phi)$  – сглаженная функция Хевисайда [248]:

$$H(\phi) \equiv \begin{cases} 0 & \text{если } \phi < -\varepsilon \\ \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{\phi}{\varepsilon} + \frac{1}{\pi} \sin(\pi \phi/\varepsilon) \right] & \text{если } |\phi| \le \varepsilon \\ 1 & \text{если } \phi > \varepsilon. \end{cases}$$
(2.8)

Ширина переходного слоя  $2\varepsilon$ , как правило, выбирается равной нескольким ячейкам дискретной сетки (обычно по три со стороны каждого компонента). Такое представление позволяет устранить сингулярности производных материальных характеристик системы на границе раздела фаз. Таким образом, многокомпонентная система рассматривается как единая среда с

параметрами, зависящими от функции уровня  $\phi(\mathbf{x},t)$ . Поверхностные капиллярные силы аппроксимируются объемными силами, сосредоточенными в узком переходном слое  $2\varepsilon$ , где градиенты физических характеристик заметно отличны от нуля. Такой подход позволяет описать гидродинамическое поведение многокомпонентной среды единым уравнением: [248]:

$$\rho(\phi) \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[ 2\eta(\phi) \mathbf{D} \right] - \gamma \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi , \qquad (2.9)$$

где  $\delta(\phi) = \frac{dH(\phi)}{d\phi}$  – сглаженная дельта-функция, с помощью которой поверхностные силы

представляются в виде объемных, локализованных в узком переходном слое.

При изменении формы межфазных границ в ходе расчетов важно, чтобы толщина переходного слоя  $|\phi| \le \varepsilon$  не менялась. Это означает, что функция уровня должна удовлетворить условию  $|\nabla \phi| = 1$ . Однако, при решении уравнения переноса (2.6) накапливаются ошибки вычисления функции  $\phi(\mathbf{x}, t)$ , которые могут приводить к нарушению данного условия. Последнее требует периодического применения процедуры реинициализации функции уровня, корректирующей значение  $\phi(\mathbf{x}, t)$  без изменения положения ее нулевого уровня [254].

#### 2.2.2. Метод объема жидкости

В методе VOF (объема жидкости) используется так называемая индикаторная функция α(**x**,t). Для двухфазной среды она определяется следующим образом [250]

$$\alpha(\mathbf{x},t) = 0, \qquad \mathbf{x} \in 1$$
  

$$0 < \alpha(\mathbf{x},t) < 1, \qquad \mathbf{x} \in S \qquad (2.10)$$
  

$$\alpha(\mathbf{x},t) = 1, \qquad \mathbf{x} \in 2$$

То есть в одной фазе эта функция равна нулю, в другой – единице и изменяется от 0 до 1 на границе раздела *S* между ними (рис. 2.1).



Рис. 2.1. Распределение индикаторной функции *α* на расчетной сетке.

По аналогии с функцией уровня, индикаторная функция подчиняется уравнению переноса  $\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha = 0$ . Толщина переходного слоя между фазами может занимать 3-4 ячейки, в которых значение функции  $\alpha$  изменяется от 0 до 1. Ошибки, накапливающиеся в ходе многократного решения уравнения переноса на каждом временном шаге, могут приводить к нежелательному размытию границы раздела. В отличие процедуры реинициализации, применяемой в методе функции уровня, в методе VOF в уравнение переноса вводится дополнительный член  $\nabla \cdot [\mathbf{u}_r \alpha (1-\alpha)]$ , который «сжимает» границу раздела. Здесь вектор  $\mathbf{u}_r = \min[C_\alpha |\mathbf{u}_s|, \max(|\mathbf{u}|)]\mathbf{n}_s$  ( $\mathbf{u}_s$  – скорость границы раздела) соответствует скорости, направленной перпендикулярно к границе раздела. Множитель  $\alpha(1-\alpha)$  обеспечивает действие данного слагаемого только на межфазной границе, а коэффициент  $C_\alpha$  принимается равным 1.5. Таким образом, уравнение переноса для индикаторной функции  $\alpha$  выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha + \nabla \cdot \left[ \mathbf{u}_r \, \alpha \, (1 - \alpha) \right] = 0 \tag{2.11}$$

Данное уравнение решается с помощью метода MULES (Multidimentional Universal Limiter for Explicit Solution). Зная  $\alpha(\mathbf{x},t)$  можно определить единичный вектор нормали  $\mathbf{n}_{s}$  и кривизну

 $\kappa$  в произвольный точке границы раздела  $\mathbf{n}_s = \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|}\Big|_{0<\alpha<1}$ ,  $\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|}\right)\Big|_{0<\alpha<1}$ , а также плотность и вязкость в каждой точке расчетной области в виде непрерывных функций  $\rho(\alpha) = \rho_1 \alpha + \rho_2(1-\alpha), \ \eta(\alpha) = \eta_1 \alpha + \eta_2(1-\alpha)$ . Таким образом, использование метода объема жидкости дает возможность описывать гидродинамическое поведение многокомпонентной среды единым уравнением Навье-Стокса:

$$\rho(\alpha) \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[ 2\eta(\alpha) \mathbf{D} \right] - \gamma \kappa(\alpha) \nabla \alpha$$
(2.12)

## 2.3. Решение системы уравнений Навье-Стокса несжимаемых жидкостей

При решении поставленных в диссертации задач использовалось два метода решения систем дифференциальных уравнений: 1) метод конечных объемов [243, 255-257], с помощью которого решались задачи течения ньютоновской и псевдопластичной жидкостей в канале с СГФ стенкой (Глава 3), динамического формирования капель в коаксиальных капиллярах (Глава 4), деформация и разрушения композитной капли с высоковязкой оболочкой (Глава 5), и 2) метод конечных разностей [257-259], с помощью которого решалась задача о деформационном поведении двухмерной композитной капли (Глава 5). Основная трудность при решении системы уравнений для несжимаемой жидкости заключается в том, что уравнение Навье-Стокса включается в себя две искомые переменные – скорость **u** и давление *p*. Для решения этой проблемы в методе конечных разностей использовался способ расщепления по физическим переменным [258, 226], а в методе конечных объемов – метод PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators) [255, 256, 260]. Суть обоих подходов заключается в 1) нахождении промежуточной скорости с использованием давления, рассчитанного на предыдущем шаге по времени, либо без учета давления, 2) решении уравнения Пуассона для давления, полученного с использованием уравнения неразрывности, и 3) последующей корректировке скорости с учетом рассчитанного поля давления. Вторая трудность состоит в нелинейности конвективных слагаемых уравнений Навье-Стокса. Данная проблема решается методом линеаризации конвективных членов путем использования значений скорости с предыдущего шага по времени.

#### 2.3.1. Процедура решения методом конечных разностей

Для решения системы уравнений Навье-Стокса методом конечных разностей (Finite Difference Methods - FDM) расчетная двухмерная область дискретизируется равномерной по *x* и *y* сеткой ячеек

$$\begin{aligned} x_{i+1/2} &= (i+1/2)\Delta x, \quad \Delta x > 0, \quad i = 0, 1, ..., N_x \\ y_{i+1/2} &= (j+1/2)\Delta y, \quad \Delta y > 0, \quad j = 0, 1, ..., N_y \end{aligned}$$
(2.13)

где  $\Delta x$  и  $\Delta y$  – размеры шагов, а  $N_x$  и  $N_y$ – число ячеек сетки соответственно в направлении xи y. Точка с координатами ( $x_{i+1/2}$ ,  $y_{i+1/2}$ ) совпадает с центром ячейки (i, j) (рис. 2.2). Проекции скорости распределены в шахматном порядке на границах ячеек, а давление, плотность и вязкость определяются в центре ячейки. Ячейки такого типа называют ячейками MAC (Market and Cells) по названию метода, в котором впервые была использована такая декомпозиция [261]. Также данную сетку называют разнесенной или шахматной. Использование разнесенной сетки дает возможность наглядно интерпретировать каждую ячейку, как элемент объема среды, который характеризуется рассчитываемым в его центре давлением  $p_{i,j}$ . Кроме того, применение разнесенной сетки позволяет связать значения скорости и давления в соседних узлах и избежать осцилляций, которые возникают при использовании центральных разностей на неразнесенной сетке.

Пусть в некоторый момент времени  $t_N = N\Delta t$  ( $\Delta t$  – шаг по времени, N – число шагов) известны поля скоростей **u** и давления *p*. Тогда определение этих величин в момент времени  $t_{N+1} = (N+1)\Delta t$  можно представить в виде трехэтапной схемы расщепления по физическим переменным [225, 258]:



**Рис. 2.2.** Шаблон сетки, используемый при расчетах методом конечных разностей. Точки на гранях ячеек соответствуют координатам рассчитываемых компонентов скорости (×), а в центрах ячеек – давления, плотности и вязкости (•).

$$\frac{1 \text{ этап:}}{\Delta t} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^N}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u}^N \otimes \mathbf{u}^N) + \frac{1}{\rho(\phi^N)} \left( \frac{1}{Re} \nabla \cdot \left[ 2\eta(\phi^N) \mathbf{D}^N \right] - \frac{1}{We} \kappa(\phi^N) \delta(\phi^N) \nabla \phi^N \right); (2.14)$$

$$\frac{2 \text{ этап:}}{\nabla \left( \frac{\nabla p}{\rho(\phi^N)} \right)} = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t}; \qquad (2.15)$$

**3** этап: 
$$\frac{\mathbf{u}^{N+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{\nabla p}{\rho(\phi^N)}; \qquad (2.16)$$

Отметим, что при использовании метода конечных разностей уравнения решаются в безразмерном виде, вследствие чего в исходном уравнении возникают безразмерные числа Вебера  $We = \rho a U^2 / \gamma$  и Рейнольдса  $Re = \rho a U / \eta$ , a -радиус исследуемой капли.

Уравнение Пуассона (2.15) выводится путем взятия дивергенции от обеих частей равенства (2.16) с учетом условия несжимаемости  $\nabla \cdot \mathbf{u}^{N+1} = 0$ . На 1 этапе рассчитывается промежуточное поле скоростей  $\mathbf{u}^*$  (2.14), в котором не учитывается вклад от давления, но принимается во внимание значение скорости  $\mathbf{u}^n$ , рассчитанное на предыдущем шаге по времени. Полученное таким образом промежуточное поле скорости  $\mathbf{u}^*$ , вообще говоря, не удовлетворяет условию несжимаемости (2.2). Исходная система дифференциальных уравнений дискретизируется с помощью частично неявной разностной схемы, ранее предложенной в работе [226]. Дискретизация приводит к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с пятидиаганальной матрицей, прямое решение которой достаточно громоздко и неэффективно с точки зрения вычислительных ресурсов. В связи с этим, используется неявный метод переменных направлений (ADI - Alternative Direction Implicit) [262], который является одним из наиболее эффективных и экономичных методов решения таких СЛАУ. Идея данного метода заключается в использовании двух полушагов по времени для получения решения на новом временном слое  $t^*$ . При этом на первом полушаге скорость в направлении *х* рассчитывается неявным, а в направлении *у* – явным способом, а на втором полушаге – наоборот, по x – явным, по y – неявным. Под неявным (явным) способом расчета понимается неявная (явная) запись соответствующих производных. Таким образом, нахождение искомого поля скорости на каждом шаге по времени сводится к решению двух СЛАУ с циклическими трехдиаганальными матрицами, которые эффективно решаются с помощью простейшего метода циклической прогонки [263].

На 2 этапе по найденному промежуточному полю скорости из уравнения Пуассона (2.15) определяется поле давления с учетом условия несжимаемости. Для дискретизации уравнения Пуассона используется простейшая пятиточечная аппроксимация, которая приводит к несимметричной матрице, не имеющей диагонального преобладания. В этой связи, решение уравнения (2.15) является наиболее трудоемкой по вычислительным ресурсам процедурой, поскольку единственно возможный способ решения таких СЛАУ – итерационный. Для оптимизации временных затрат использовалась одна из разновидностей многосеточных алгоритмов FMG (Full Multigrid) [264]. Алгоритмическую основу многосеточных методов составляют два приема. Первый из них заключается в решении исходной задачи на более крупных сетках. Второй прием, предложенный в работе Р. П. Федоренко [265], основан на использовании высокой скорости сходимости некоторых итерационных процедур на первых итерациях.

На 3 этапе рассчитывается поле скорости на новом временном слое  $\mathbf{u}^{N+1}$  с использованием процедуры корректировки промежуточного поля скоростей,  $\mathbf{u}^{N+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\nabla p}{\rho(\phi^N)} \Delta t$  в соответствии с (2.16).

#### 2.3.2. Процедура решения методом конечных объемов

При использовании метода конечных объемов (Finite Volume Method - FVM) исходная область разбивается на контрольные объемы произвольной формы (расчетные ячейки), являющиеся непересекающимися выпуклыми многоугольниками, которые полностью покрывают расчетную область. Контрольный объем ограничен набором плоских поверхностей (граней), каждая из которых может граничить только с одним соседним контрольным объемом. Типичный контрольный объем изображен на (рис. 2.3) [255]. Расчетная точка P, расположенная в его центре, удовлетворяет условию  $\int_{V_p} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) dV = 0$ . Каждая грань характеризу-

ется вектором,  $\mathbf{S}_f = S \mathbf{n}_f$ , где S – площадь поверхности, а  $\mathbf{n}_f$  – нормальный вектор. Ячейки произвольной формы дают возможность применять метод конечных объемов для решения задач со сложной трехмерной расчетной областью.

В методе конечных объемов исходная система уравнений (2.12) и (2.2) представляется в интегральном виде для каждой ячейки расчетной области:



**Рис 2.3**. Контрольный объем [255].

$$\int_{t}^{t+\Delta t} \rho(\alpha) \left[ \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_{p}} \mathbf{u} \, dV + \int_{V_{p}} \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \, dV \right] dt =$$

$$= \int_{t}^{t+\Delta t} \left[ \int_{V_{p}} \nabla p \, dV + \int_{V_{p}} \nabla \cdot [2\eta(\alpha)\mathbf{D}] \, dV + \int_{V_{p}} \gamma \kappa(\alpha) \nabla \alpha \, dV \right] dt$$

$$\int_{V_{p}} \nabla \cdot \mathbf{u} \, dV = 0$$
(2.18)

При дискретизации уравнения (2.17) каждое слагаемое численно интегрируется с использованием значений искомых величин в центрах ячеек и на их гранях [243, 255, 256]. Проблема нелинейности конвективных слагаемых решается с использованием значений вектора скорости **u**<sup>N</sup> с предыдущего шага по времени (линеаризация):

$$\int_{V} \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \, dV = \int_{S} (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \cdot d\mathbf{S} \cong \sum_{f} \mathbf{u}_{f}^{N+1} \left( \mathbf{u}_{f}^{N} \cdot \mathbf{S}_{f} \right) = \sum_{f} F^{N} \mathbf{u}_{f}^{N+1} \,, \tag{2.19}$$

где  $F^N = \mathbf{u}_f^N \cdot \mathbf{S}_f$  – поток жидкости через грани ячеек. Индексом «*f*» обозначены величины на гранях контрольных объемов.

Чтобы получить соотношение для давления запишем уравнение Навье-Стокса (2.17) в полудискретном виде [255]:

$$a_{\rm p}\mathbf{u}_{\rm p} = \mathbf{H}(\mathbf{u}) - \nabla p \,, \tag{2.20}$$

где  $\mathbf{H}(\mathbf{u}) = \frac{\mathbf{u}_{P}}{\Delta t} - \sum_{f} a_{Nb} \mathbf{u}_{Nb}$ , а  $a_{P}$  и  $a_{Nb}$  – диагональные и недиагональные коэффициенты мат-

рицы СЛАУ. Дискретная форма уравнения несжимаемости выглядит следующим образом:

$$\int_{V_p} \nabla \cdot \mathbf{u} \, dV = \sum_f \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f = 0.$$
(2.21)

59

Выразим скорость **u**<sub>P</sub> из уравнения (2.20)  $\mathbf{u}_{P} = \frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_{P}} - \frac{1}{a_{P}} \nabla p$ . Значения скоростей  $\mathbf{u}_{f}$  на гранях

ячеек рассчитываются путем интерполяции скорости **u**<sub>P</sub> в их центрах:

$$\mathbf{u}_{f} = \left(\frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_{\mathrm{P}}}\right)_{f} - \left(\frac{1}{a_{\mathrm{P}}}\right)_{f} \left(\nabla p\right)_{f}.$$
(2.22)

Подставляя соотношение (2.22) в уравнение неразрывности (2.21), получим уравнение для поля давления:

$$\sum_{f} \left( \frac{\nabla p}{a_{\rm P}} \right)_{f} \cdot \mathbf{S}_{f} = \sum_{f} \left( \frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_{\rm P}} \right)_{f} \cdot \mathbf{S}_{f}$$
(2.23)

Таким образом, конечный вид дискретной системы уравнений, описывающей течение несжимаемой жидкости, состоит из уравнения (2.23) для давления и соотношения для скорости:

$$a_{\mathrm{p}}\mathbf{u}_{\mathrm{p}} = \mathbf{H}(\mathbf{u}) - \sum_{f} p_{f} S_{f} . \qquad (2.24)$$

Поток жидкости через грань контрольного объема рассчитывается с использованием формулы (2.22) для **u**<sub>f</sub>:

$$F = \mathbf{u}_{f} \cdot \mathbf{S}_{f} = \left(\frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_{p}}\right)_{f} \cdot \mathbf{S}_{f} - \left(\frac{\nabla p}{a_{p}}\right)_{f} \cdot \mathbf{S}_{f}$$
(2.25)

Из полученной системы уравнений (2.23) и (2.24) видно, что искомые поля скорости и давления линейно связаны друг с другом. Решение такой системы уравнений проводится методом PISO, последовательность применения которого можно описать следующим образом.

<u>Шаг 1</u>. Находится промежуточное поле скорости  $\mathbf{u}^*$ , путем решения уравнение (2.24) с полем давления, рассчитанным на предыдущем шаге по времени

$$a_{\mathrm{P}}\mathbf{u}_{\mathrm{P}}^{*} = \mathbf{H}(\mathbf{u}^{*}) - \sum_{f} p_{f}^{N} \mathbf{S}_{f},$$

Шаг 2. На втором этапе реашется уравнение (2.23) для давления

$$\sum_{f} \left( \frac{\nabla p^{N+1}}{a_{\mathrm{P}}} \right)_{f} \cdot \mathbf{S}_{f} = \sum_{f} \left( \frac{\mathbf{H}(\mathbf{u}^{*})}{a_{\mathrm{P}}} \right)_{f} \cdot \mathbf{S}_{f}$$

Шаг 3. Производится явная корректировка потока жидкости через грани ячеек (2.25) и поля скорости с использованием градиента нового поля давления

$$F = \mathbf{u}_{f}^{N+1} \cdot \mathbf{S}_{f} = \left(\frac{\mathbf{H}(\mathbf{u}^{*})}{a_{\mathrm{P}}}\right)_{f} \cdot \mathbf{S}_{f} - \left(\frac{\nabla p^{N+1}}{a_{\mathrm{P}}}\right)_{f} \cdot \mathbf{S}_{f}$$

$$\mathbf{u}_{P}^{N+1} = \frac{\mathbf{H}(\mathbf{u}^{*})}{a_{P}} - \frac{1}{a_{P}} \nabla p^{N+1}$$

Шаг 4. Если требуемая точность для давления и скорости не достигнута, возвращаемся к шагу 2.

#### 2.4. Выбор расчетных сеток

При решении поставленных в диссертации задач, расчетные сетки выбиралась исходя из следующих соображений. Для каждой из задач проводился ряд тестовых расчетов на сетках различной густоты. В расчетах использовалась такие сетки, дальнейшее увеличение густоты которых не приводило к существенным изменениям искомых величин.

### 2.4.1. Кажущееся скольжение псевдопластичной жидкости в канале с супергидрофобной стенкой

Для оптимизации расчетной сетки в задаче расчета длины кажущегося скольжения псевдопластичной полимерной жидкости (Глава 3), анализировали 1) усредненные профили скорости сдвига вблизи СГФ страйп-текстуры и 2) длину кажущегося скольжения при течении псевдопластичной жидкости поперек страйп-текстуры на сетках различной густоты. Течение поперек текстуры носит двухмерный характер. В связи с этим данная задача рассматривалась на двухмерной расчетной области (рис. 2.4(а)). Результаты расчетов представлены на рис. 2.5 и в табл. 2.1. Видно, что длина скольжения достигает своего предельного значения на сетке густотой 200х100 (200 и 100 – количество ячеек вдоль осей x и z, соответственно). При расчете течений вдоль оси страйп-текстуры рассматривалась трехмерная расчётная область (рис. 2.4(б)). В этом случае использовалась расчетная сетка 200х100х100, а длина канала вдоль бороздок принималась равной периоду L супергидрофобной текстуры.



**Рис. 2.4.** Расчетные области при моделировании течения простого сдвига поперек (а) и вдоль (б) страйп-текстуры.



Рис. 2.5. Усредненные профили скорости сдвига при поперечном течении простого сдвига псевдопластичной жидкости в окрестности СГФ страйп-текстуры ( $y / h \le 0.2$ ) при  $\varphi = 0.5$  и h/L = 0.5 для сеток разной густоты.

**Табл. 2.1.** Длины кажущегося скольжения при сдвиговом течении псевдопластичной полимерной жидкости поперек страйп-текстуры с  $\varphi = 0.5$  и h/L = 0.5, рассчитанная на сетках разной густоты

Размер сетки ( <i>N</i> <sub>y</sub> x <i>N</i> <sub>x</sub> )	50x25	100x50	150x75	200x100	250x125
$l^P_{\mathrm{app},\perp}$ / $L$	0.0328	0.0297	0.0284	0.0277	0.0277

#### 2.4.2. Оценка интенсивности геликоидального течения

В третьей главе исследуется геликоидальное течение, образующееся в трехмерном канале с прямоугольным сечением шириной w = 100 мкм, высотой h = 60 мкм и длиной  $L_0 = 5$ мм при наклонной ориентации СГФ страйп-текстуры с периодом L = 60 мкм и поверхностной долей бороздок  $\varphi = 0.5$  (рис. 2.6). Для оценки интенсивности геликоидального течения рассчитывался следующий интегральный параметр  $T = V^{-1} \int_{V} |u_y/u_x| dV$  (см. п. 3.4). В табл. 2.2 представлены результаты расчетов при течении ньютоновской жидкости со средней скоростью U = 0.1 мм/с при угле наклона текстуры  $\Theta = 45^{\circ}$  к оси канала. Видно, что наиболее оптимальная сетка имеет 750х25х15 ячеек вдоль осей *x*, *y* и *z*, соответственно.



**Рис. 2.6.** Расчётная область для моделирования течения Пуазейля в канале с наклонной СГФ страйп-текстурой.

62

Размер сетки $N_y x N_z x N_y$	300x10x6	600x20x12	750x25x15	900x30x18
Т	0.03	0.03316	0.0333	0.03331

Табл. 2.2. Значения интегрального парамера Т при разной густоте расчетной сетки.

#### 2.4.3. Течение жидкостей в коаксиальных капиллярах

Поскольку задача о течении жидкостей в коаксиальных капиллярах имеет выраженную осевую симметрию, было целесообразно использовать двухмерную клинообразную расчетную область (см. рис. 2.7) с углом расклинивания – 1°. Внутренний и внешний диаметры внутреннего капилляра составляли  $d_{\rm d}^{\rm in}=260\,$  мкм и  $d_{\rm d}^{\rm out}=514\,$ мкм, а внутренний диаметр внешнего капилляра – d<sub>c</sub> = 1.6 мм. Эти размеры выбраны в соответствии с экспериментальной работой [217]. Длины внешнего и внутреннего капилляров L<sub>c</sub> и L<sub>d</sub> принимались равными 7.8 мм и 2.6 мм, соответственно. При выборе густоты сетки оценивались время отрыва и размер формируемой капли при капельном режиме течения  $(\eta_c = \eta_d = 1 \Pi a \cdot c,$  $U_{\rm c} = U_{\rm d} = 0.1$  мм/с ). Табл. 2.3 показывает, что время формирования и размер капель практически не меняются при увеличении густоты сетки более, чем 300х32.



Рис. 2.7. Расчетная область при моделировании течения жидкостей в соосных капиллярах.

**Табл 2.3.** Время формирования и размер капели при формировании капли в коаксиальных капиллярах с параметрами:  $\eta_c = \eta_d = 1 \text{ Па} \cdot \text{c}$ ,  $U_c = U_d = 0.1 \text{ мм/c}$ .

Размер сетки <i>N</i> <sub>y</sub> x <i>N</i> <sub>x</sub>	225x23	275x28	300x32	450x48
Время формирования, с	33	36	37.5	38
Размер капли, мкм	710	740	760	760

#### 2.4.4. Деформационное поведение двухмерной композитной капли

В табл. 2.4 представлены результаты расчетов стационарной тейлоровской деформации  $D_{\rm T}$  и угла ориентации  $\Omega$  двухмерной однородной капли (п. 4.2) для прямоугольных расчетных сеток различной густоты при следующих параметрах: Ca = 0.2, Re = 0.1,  $m_{21} = 0.1$ ,

n = 0.4. Видно, что деформация  $D_{\rm T}$  и угол ориентации  $\Omega$  достигают предельных значений при густоте сетки 512х28.

**Табл. 2.4.** Стационарная тейлоровская деформация  $D_{\rm T}$  и угол ориентации  $\Omega$  однородной двухмерной капли при Ca = 0.2, Re = 0.1,  $m_{21} = 1$ , n = 0.4.

Размер сетки <i>N</i> <sub>y</sub> x <i>N</i> <sub>x</sub>	226x64	512x128	1024x256
$D_{\mathrm{T}}$	0.2451	0.2238	0.2223
$\Omega,^{ m o}$	29.845	26.939	26.935

#### 2.4.5. Деформация и распад трехмерной композитной капли

Для моделирования трехмерной композитной капли применялась динамическая адаптивная сетка, в которой более мелка сетка строилась в окрестности межфазной границы, а более грубая – в отдаленных областях (рис. 2.8). Поскольку динамическое поведение капли в основном определяется конкуренцией между вязкими напряжениями и капиллярными силами, действующими на межфазной поверхности, такой подход позволяет существенно ускорить процедуру вычислений без видимой потери точности.

В табл. 2.5 представлены результаты расчетов стационарного удлинения однородной капли A/a на прямоугольных базовых расчетных сетках разной густоты (без учета адаптивной сетки на межфазной границе) при Ca = 0.4, n = 0.5, m = 5, n = 0.4. Видно, что наиболее целесообразно проводить расчеты на базовой сетке с густотой 75x25x50.



**Рис. 2.8.** Динамическая адаптивная расчетная сетка повышенного разрешения в окрестности границы однородной капли при *Ca* = 0.4, *n* = 0.5, *m* = 5.

Размер сетки $N_y x N_x x N_z$	50x18x32	75x25x50	100x33x66
A/a	1.687	1.75	1.753

**Табл. 2.5.** Однородная капля при *Ca* = 0.4, *n* = 0.5, *m* = 5.

# Глава 3. Особенности течения псевдопластичной полимерной жидкости в канале с супергидрофобной стенкой

В Главе 1 отмечалось, что использование микроскопических каналов характеризуется высоким гидродинамическим сопротивлением и слабой конвекцией. Применение СГФ покрытий позволяет значительно снизить вязкие напряжения за счет пристенного скольжения, интенсивность которого характеризуется эффективной длиной скольжения. При течении ньютоновской жидкости над СГФ поверхностью, эффективная длина скольжения может принимать значения от нескольких десятков до сотен микрон в зависимости от вида рельефа и доли газовой фазы  $\varphi$  [105, 137, 141, 142]. С другой стороны, анизотропные СГФ страйптекстуры, состоящие из периодических твердых полосок и заполненных газом бороздок, демонстрируют анизотропию длины скольжения [143-145]. При наклонной ориентации текстуры эта особенность приводит к формированию вторичного поперечного течения в микроканале, которое способно значительно ускорить процесс перемешивания жидкости за счет эффекта закрутки потока [177-179]. Таким образом, СГФ страйп-текстуры представляют несомненную ценность в прикладной микрофлюидике.

Данная глава посвящена исследованию особенностей течения неньютоновской псевдопластичной полимерной жидкости в микроканалах, одна из стенок которых покрыта анизотропной СГФ страйп-текстурой. Выбор этой задачи обусловлен использованием в микрофлюидике неньютоновских жидкостей (растворы полимеров, кровь и пр.), которые относятся к псевдопластичным средам. Рассмотрение анизотропной СГФ страйп-текстуры позволяет провести сравнительный анализ полученных численных результатов для псевдопластичной жидкости с известными решениями для ньютоновских вязких сред.

В первой части главы исследуются особенности скольжения псевдопластичной полимерной жидкости при течении простого сдвига вдоль и поперек СГФ страйп-текстуры. Рассчитываются длины скольжения, а также исследуется влияние особенностей реологической кривой на транспортные свойства псевдопластичных жидкостей в микроканалах с СГФ стенкой.

Во второй части главы рассматривается вопрос об эффективности использования СГФ страйп-текстуры в микроканалах для генерации геликоидального течения ньютоновской и псевдопластичной жидкостей. Показано, что интенсивность закрутки потока целесообразно описывать в терминах модуля тангенса угла отклонения линий тока от оси канала, осредненного по объему канала. Построены зависимости данной характеристики от угла наклона тек-

стуры и средней скорости течения применительно к ньютоновской и псевдопластичной жид-костям.

Данные этой главы представлены в следующих публикациях и тезисах конференций [270, 272, 273, 279, 280, 284, 288-290].

## 3.1. Сравнение численного моделирования с известными аналитическими результатами

Для доказательства адекватности используемой численной методики, провели сравнение полученных расчетов для эффективных длин скольжения ньютоновской жидкости над супергидрофобной поверхностью с соответствующими аналитическими решениями, полученными в работе [145]. С этой целью рассматривали течение простого сдвига между параллельными пластинами, одна из которых покрыта СГФ страйп-текстурой (рис. 3.1). На твердых участках принято условие прилипания, а отношение локальной длины скольжения l на границах жидкость-газ к периоду неоднородности L принято равным l/L = 20.





Рассчитывались относительные эффективные длины скольжения вдоль,  $l_{\text{eff},\parallel}^N / L$ , и поперек,  $l_{\text{eff},\perp}^N / L$ , страйп-текстуры, как функции от относительной высоты канала h/L при разных поверхностных долях газовой фазы  $\varphi$ .

Аналитические [145] и численные решения представлены на рис. 3.2 в виде кривых и символов, соответственно. Видно, что имеет место полное совпадение полученных результатов. Продольная длина скольжения  $l_{\text{eff},\parallel}^{N}$  заметно больше, чем поперечная  $l_{\text{eff},\perp}^{N}$  при любых долях  $\varphi$  скользких участков. Кроме того, увеличение относительной высоты канал до h/L = 0.8 сопровождается ростом эффективных длин скольжения, а при h/L > 0.8 эти характеристики принимают постоянные значения. При этом  $l_{\text{eff},\parallel}^{N} = 2l_{\text{eff},\perp}^{N}$  для обоих расчетов. Отметим, что в работе [145] аналитические решения были получены для течения Пуазейля, тогда как численные расчеты выполнялись при течении простого сдвига. Это свидетельствует о том, что



**Рис 3.2.** Зависимости относительных продольной  $l_{\text{eff},\parallel}^N / L$  (сплошные линии) и поперечной  $l_{\text{eff},\perp}^N / L$  (пунктирные линии) эффективных длин скольжения от относительной высоты канала h/L при разных долях газовой фазы  $\varphi = 0.25$  (зеленые кривые), 0.5 (бардовые) и 0.75 (синие) [145]. Символы соответствуют численным расчетам.

компоненты тензора эффективной длины скольжения ньютоновской жидкости не зависят от типа течения и являются характеристиками супергидрофобной структуры.

## 3.2. Поле возмущений скорости при сдвиговом течении ньютоновской жидкости над супергидрофобной текстурой

Для получения более детальной картины воздействия супергидрофобной текстуры на структуру течения в микроскопическом канале, исследовали поле возмущений скорости при сдвиговом течении ньютоновской жидкости поперек текстуры. С этой целью рассматривалась двухмерная расчетная ячейка (рис. 2.4(а)), а поле возмущений скорости определялось в виде разности  $\mathbf{u}' = \mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{eff}}$  между локальной скоростью  $\mathbf{u}(x, z)$  в рассматриваемой расчетной ячейке и скоростью  $\mathbf{u}_{\text{eff}}(z)$  в аналогичной области, но с гладкой нижней стенкой, характеризующейся рассчитанной выше длиной скольжения  $l_{\text{eff}}^N$ 

Рис. 3.3(а) показывает, что в таком векторном поле формируются симметричные вихри, вращающиеся против (над областью скольжения) и по (над областью прилипания) часовой стрелке. Расчет выполнен для канала с относительной высотой h/L = 0.1 и долей газовой фазы  $\varphi = 0.5$ . Отметим, что аналогичная вихревая картина возмущений скорости свойственна и для сдвигового течения над волнообразной твердой стенкой, когда жидкость полностью омывает рельеф стенки (состояние Венцеля) [266]. Отсюда можно заключить, что отмеченное поведение возмущений скорости течения формируется в каналах, в которых одна из стенок содержит чередующиеся области торможения и ускорения. Распределение возмущений

67



68

**Рис. 3.3.** (а) Векторное поле возмущений скорости течения ньютоновской жидкости. Зависимость относительных возмущений горизонтальной компоненты скорости течения u'/U от (б) высоты канала: h/L = 0.5 (1), 0.75 (2), 2 (3) и (в) поверхностной доли газовой фазы на СГФ страйп-текстуре:  $\varphi = 0.8$  (1), 0.6 (2), 0.4 (3), 0.2 (4).

скорости течения весьма чувствительно к высоте микроканала и поверхностной доле  $\varphi$  скользких участков СГФ поверхности. Рис. 3.3(б) показывает, что при h/L > 1 относительные возмущения горизонтальной компоненты возмущений скорости u'/U локализуются вблизи СГФ стенки, тогда как в узком канале с h/L < 1 возмущения захватывают всю область зазора. С другой стороны, увеличение доли участков скольжения  $\varphi$  приводит к дополнительному росту возмущений скорости (рис. 3.3(в)). Отметим, что приведенные на рис. 3.3(б) и 3.3(в) кривые рассчитывали в центральных сечениях участков жидкость-твердая стенка СГФ текстуры.

## 3.3. Скольжение псевдопластичной полимерной жидкости над супергидрофобной текстурой

#### 3.3.1. Длины эффективного и кажущегося скольжения ньютоновской и псевдопластичной полимерной жидкостей

Рассматривали течение простого сдвига несжимаемой жидкости в плоском трехмерном канале, верхняя гидрофильная стенка которого движется с постоянной скоростью U вдоль оси x (рис. 3.1). Нижняя стенка покрыта анизотропной СГФ страйп-текстурой с периодом L. В качестве расчетной области выбрали ячейку, выделенную пунктиром, с периодическим граничными условиями на гранях, перпендикулярных осям x и y лабораторной системы координат. Границы раздела между жидкостью и газообразными участками рассматривали плоскими. Такое приближение оправдано в достаточно широком диапазоне скоростей течения [141, 149] (см. п. 1.4.4. Главы 1). На границе жидкость-твердая стенка принято условие



**Рис. 3.4.** Реологические кривые, соответствующие модели Каро-Ясуда при следующих параметрах  $\eta_0 = 1.08 \text{ Па} \cdot \text{с}$ ,  $\eta_{\infty} = 0.0023 \text{ Па} \cdot \text{c}$ ,  $\lambda = 5$ , f = 1, g = 0.01 (кривая 1), 0.2 (кривая 2), 0.4 (кривая 3).

**Табл. 3.1.** Параметры модели Каро-Ясуда, соответствующие водному раствору ПАА 500 ppm (рис. 3.4, кривая 2) [56].

$\eta_0, \Pi a \cdot c$	$\eta_{\infty}, \Pi a \cdot c$	λ, c	f	g
1.08	0.0023	5	1	0.2

прилипания, а на межфазной границе жидкость-газ – условие идеального скольжения. Последнее предполагает, что глубина бороздок достаточно глубокая [155].

В качестве неньютоновской среды рассматривали водный раствор полиакриламида (ПАА) с концентрацией 500 ppm. С увеличением скорости сдвига, вязкость такого раствора падает практически на три порядка (см. рис. 1.3) а его упругий отклик пренебрежимо мал [56]. Такая среда может рассматриваться, как псевдопластичная жидкость, вязкая кривая которой описывается моделью Каро-Ясуда (1.2). Применительно к раствору ПАА, значения параметров данной модели, используемые в расчетах, приведены в табл. 3.1. Кривая 2 на рис. 3.4 наиболее хорошо описывает экспериментальные данные, представленные на рис. 1.3. На рис. 3.4 приведены дополнительные кривые с разными показателями степени g = 0.01 и 0.4.

Видно, что с уменьшением показателя *g* крутизна кривой вязкости  $\eta(\dot{\gamma})$  возрастает. Наиболее существенное изменение вязкости рассматриваемого раствора (*g* = 0.2) имеет место в диапазоне скорости сдвига от 0.01 до 10<sup>4</sup> с<sup>-1</sup>. По этой причине расчеты в п.п. 3.3.1 – 3.3.3 проводились при базовой скорости сдвига  $\dot{\gamma} = U/h = 1$  с<sup>-1</sup>.

На рис. 3.5 представлены зависимости средних скоростей сдвига ньютоновской жидкости с вязкостью  $\eta_0$  (прямые 1' и 2') и рассматриваемого водного раствора ПАА (кривые 1 и 2). Видно, что в отличие от ньютоновской жидкости, профиль скорости течения данной псевдопластичной жидкости заметно искривляется вблизи СГФ поверхности. Таким обра-



**Рис. 3.5.** Средние профили скорости ньютоновской жидкости (пунктирные линии) и псевдопластичной среды Каро-Ясуда (сплошные линии) при течении поперек (1,1') и вдоль (2,2') бороздок СГФ поверхности ( $\varphi = 0.5$ , h/L = 1). Точечная линия соответствует профилю скорости при  $\varphi = 0$ .

зом, псевдопластичная жидкость демонстрирует два типа скольжения – скольжение непосредственно над СГФ поверхностью, а также кажущееся скольжение за счет резкого увеличения скорости сдвига вблизи СГФ стенки. Видно, что длины кажущегося скольжения вдоль  $l_{app,\parallel}^{P}$  и поперек  $l_{app,\perp}^{P}$  страйп-текстуры значительно больше соответствующих экстраполяционных длин скольжения непосредственно у СГФ стенки. Длины кажущегося скольжения  $l_{app,\parallel}^{P}$  и  $l_{app,\perp}^{P}$  полимерного раствора также существенно превышают соответствующие эффективные длины скольжения  $l_{eff,\parallel}^{N}$  и  $l_{eff,\perp}^{N}$  ньютоновской жидкости (см. рис. 3.5).

На рис. 3.6(а) представлены зависимости длин кажущегося  $(l_{app,\perp}^{P}, l_{app,\parallel}^{P})$  и эффективного  $(l_{eff,\perp}^{N}, l_{eff,\parallel}^{N})$  скольжения псевдопластичной и ньютоновской жидкостей от относительной высоты микроканала h/L при течении простого сдвига поперек и вдоль страйп-текстуры при  $\varphi = 0.5$ . Видно, что длины кажущегося скольжения псевдопластичной жидкости в несколько раз больше соответствующих эффективных величин ньютоновской жидкости при всех значениях высоты микроканала. Для обоих типов жидкостей эти характеристики достигают насыщения при  $h \sim L$ .

Для ньютоновской жидкости численное моделирование удовлетворяет соотношению  $l_{\text{eff},\parallel}^{N} = 2l_{\text{eff},\perp}^{N}$ , которое соответствует известному теоретическому результату при условии идеального скольжения на участках жидкость-газ (см. формулу (1.9)) [143-145]. Однако, для псевдопластичной жидкости при  $h \ge L$  имеет место другое соотношение,  $l_{\text{арр},\parallel}^{P} = 1.88l_{\text{арр},\perp}^{P}$ .

Увеличение поверхностной доли  $\varphi$  газовой фазы СГФ текстуры приводит к более выраженному росту длин кажущегося скольжения  $l_{app,\parallel}^{P}$ ,  $l_{app,\perp}^{P}$  полимерного раствора по сравнению с длинами эффективного скольжения  $l_{eff,\parallel}^{N}$ ,  $l_{eff,\perp}^{N}$  ньютоновской жидкости (рис. 3.6(б)).



**Рис. 3.6.** Зависимость эффективных длин скольжения псевдопластичной и ньютоновской жидкостей от относительной высоты при канала при  $\varphi = 0.5$  (а) и от доли  $\varphi$  участков скольжения при h/L = 1.5:  $l_{\text{eff},\perp}^N$  (1),  $l_{\text{eff},\parallel}^N$  (2)  $l_{\text{app},\perp}^P$  и (3),  $l_{\text{app},\parallel}^P$  (4) (б).

## 3.2.2. Структура псевдопластичной полимерной жидкости при течении над супергидрофобной текстурой

Для понимания природы кажущегося скольжения псевдопластичной полимерной жидкости над СГФ поверхностью рассмотрим распределение скорости сдвига в разных поперечных сечениях микроканала. На рис. 3.7 приведены профили относительной скорости сдвига  $\dot{\gamma}(x, y)/\dot{\gamma}_{unit}$  в центральных сечениях областей с граничными условиями скольжения (x = L/4) и прилипания (x = 3L/4) страйп-текстуры при  $\varphi = 0.5$  для двух значений относительной высоты микроканала h/L = 0.3 и 1. В качестве единичной скорости сдвига  $\dot{\gamma}_{unit}$  используется одно из следующих значений:  $\dot{\gamma}_{unit} = U/(h + l_{eff,\parallel}^N)$  и  $\dot{\gamma}_{unit} = U/(h + l_{eff,\perp}^N)$  для продольного и поперечного течения ньютоновской жидкости и  $\dot{\gamma}_{unit} = U/(h + l_{eff,\perp}^P)$  и  $\dot{\gamma}_{unit} = U/(h + l_{app,\parallel}^P)$ для соответствующих течений псевдопластичной жидкости. Из приведенных графиков следует, что вблизи зоны скольжения скорость сдвига падает до нуля, а в окрестности зоны прилипания, напротив, значительно возрастает. Такое поведение обусловлено скольжением на межфазной границе жидкость-газ и, напротив, резким падением скорости до нуля на участках контакта жидкость-твердая стенка вследствие граничного условия прилипания.

Сравнение с аналогичными локальными профилями скорости сдвига ньютоновской жидкости показывает, что над твердыми полосками возмущения скорости сдвига псевдопластичной жидкости значительно больше, чем у ньютоновской (ср. сплошную и точечную кривые), в то время как над зонами скольжения соответствующие зависимости практически совпадают с пунктирной линией. Важно отметить, что в относительно широком канале  $h/L \ge 1$ возмущения скорости сдвига локализуются в узкой окрестности страйп-текстуры (рис. 3.7 (а,в)). Напротив, при h/L < 1 возмущения захватывают большую часть канала как при попе-



**Рис. 3.7.** Профили скоростей сдвига псевдопластичной жидкости в центральных сечениях области скольжения (x = 0.25L, пунктирная линия) и прилипания (x = 0.75L, сплошная линия) СГФ страйп-текстуры при течении простого сдвига поперек (a, б) и вдоль (в, г) страйп-текстуры с  $\varphi = 0.5$  в каналах с разной относительной высотой h/L = 1 (a, в) и h/L = 0.3 (б, г). Точечные линии соответствуют профилям скорости сдвига ньютоновской жидкости в центральном сечении области прилипания.

речном, так и продольном течении сдвига (рис. 3.7(б,г)). Эти результаты согласуются с выводами, сделанными в п. 3.2 при исследовании течения ньютоновской жидкости в канале с СГФ поверхностью.

Рис. 3.8 демонстрирует изменения вязкости псевдопластичной жидкости вдоль координаты *x*, вызванные течением сдвига поперек (рис. 3.8(а,б)) и вдоль (рис. 3.8(в,г)) симметричной страйп-текстуры ( $\varphi = 0.5$ ) на разных расстояниях *z* от супергидрофобной стенки в микроканалах с относительной высотой h/L = 1.0 и 0.3. Как видно, в обоих случаях в непосредственной близости от межфазной границы жидкость-газ, вязкость среды резко возрастает и достигает максимума в центре области скольжения. Такая ситуация возникает при  $\dot{\gamma}/\dot{\gamma}_{unit} > 1$ , что находится в соответствии с рис. 3.7(сплошные кривые). При достаточно большой толщине канала ( $h/L \ge 1$ ), удаление от супергидрофобной поверхности приводит к быстрому снижению возмущений вязкости рис. 3.8(а,в). При *z/h* = 0.75 вязкость стабилизируется на уровне  $\eta \simeq 0.3\eta_0$  (рис. 3.8(а,в), кривая 4). В узком канале (h/L < 1), относительная глубина *z/h* проникновения возмущений вязкости псевдопластичной полимерной среды возрастает (рис. 3.8(6,г)). Это особенно заметно при течении вдоль СГФ страйп-текстуры.

72


**Рис. 3.8.** Распределение вязкости псевдопластичной жидкости вдоль оси *x* на разном удалении от СГФ текстуры (z/h = 0 (1), z/h = 0.25 (2), z/h = 0.5 (3), z/h = 0.75 (4)) при течении сдвига поперек (a, б) и вдоль (в, г) страйп-текстуры с  $\varphi = 0.5$  и относительной толщине микроканала h/L = 1 (a, в) и 0.3 (б, г). Пунктирная линия разделяет зоны скольжения (слева) и прилипания (справа).

Наблюдаемые изменения вязкости находится в полном соответствии с поведением скоости сдвига, представленном на рис. 3.7: увеличение (уменьшение) скорости сдвига приводит к падению (росту) вязкости (ср. также рис. 3.4).

Для анализа поля вязкости псевдопластичной жидкости в микроканалах с СГФ стенкой рассматривали поведение вязкостей, осредненных вдоль координаты *x* в зонах скольжения,

$$\overline{\eta}_{slip}(z) = \frac{2}{L} \int_{0}^{L/2} \eta(x, z) dx$$
, и прилипания,  $\overline{\eta}_{stick}(z) = \frac{2}{L} \int_{L/2}^{L} \eta(x, z) dx$ , соответственно. На рис. 3.9 по-

казаны вариации этих характеристик вдоль вертикальной оси *z* в процессе сдвигового течения вдоль и поперек страйп-текстуры при поверхностной доле участков скольжения  $\varphi = 0.5$  и двух значениях относительной толщины микроканала h/L = 0.3 и 1. Видно, что вблизи супергидрофобной поверхности  $\overline{\eta}_{stick}(z)$  заметно падает, а  $\overline{\eta}_{slip}(z)$ , напротив, возрастает. Это согласуется с поведением локальных значений вязкости вдоль оси *x* (см. рис. 3.8). Рис. 3.9(а) показывает, что при течении поперек страйп-текстуры в микроканале с h/L = 1 существенное изменение усредненных вязкостей  $\overline{\eta}_{stick}(z)$  и  $\overline{\eta}_{slip}(z)$  наблюдается в относительно узком слое в окрестности супергидрофобной стенки. При продольном течении ширина такого слоя не-

73



**Рис. 3.9.** Распределение локально усредненных относительных вязкостей  $\overline{\eta}_{slip}(z)/\eta_0$  (пунктирная кривая) и  $\overline{\eta}_{stick}(z)/\eta_0$  (сплошная кривая) псевдопластичной жидкости при течении простого сдвига поперек (а, б) и вдоль (в, г) СГФ страйп-текстуры с  $\varphi = 0.5$  и относительной толщине канала h/L = 1 (а, в) и 0.3 (б, г).

сколько больше (рис. 3.9(B)). Напротив, при h/L < 1 вариации вязкостей вблизи и вдали от зон скольжения и прилипания имеют один порядок (рис.  $3.9(6, \Gamma)$ ), что связано с более глубоким относительным проникновением возмущений скорости течения внутрь канала (ср. рис.  $3.7(6, \Gamma)$ ).

На рис. 3.10 показано влияние доли участков скольжения  $\varphi$  на распределение локально усредненных вязкостей над зонами скольжения и прилипания при поперечном и продольном течении полимерной жидкости. Видно, что уменьшение  $\varphi$  приводит к заметному снижению  $\overline{\eta}_{slip}(z)/\eta_0$  и  $\overline{\eta}_{stick}(z)/\eta_0$  в верхней части канала, тогда как увеличение  $\varphi$  способствует сдвигу этих кривых в сторону больших значений локальных вязкостей. Изменения вязкости с увеличением доли  $\varphi$  способствуют росту поперечной и продольной длин скольжения  $l_{app,\perp}^p$  и  $l_{app,\parallel}^p$  (ср. рис. 3.6(б)). Уменьшение доли бороздок приводит к уменьшению длин скольжения, что является причиной увеличения средней скорости сдвига и падения вязкости в соответствии с формулой (1.2) (ср. рис. 3.4). При этом над зоной прилипания пристенный скачок вязкости уменьшается (рис. 3.10, кривые 2 и 4), а над зоной скольжения он, напротив, возрастает (рис. 3.10, кривые 1 и 3). Увеличение  $\varphi$  приводит к росту возмущений вязкости в объеме микроканала (рис. 3.10, кривые 3 и 4).

74



**Рис. 3.10.** Распределение средней относительной вязкости псевдопластичной жидкости над зоной скольжения (пунктирные линия 1 и 3) и зоной прилипания (сплошные линии 2 и 4) при течении простого сдвига поперек (а) и вдоль (б) СГФ страйп-текстуры при разной поверхностной доле заполненных газом бороздок  $\varphi = 0.25$  (кривые 1 и 2) и  $\varphi = 0.75$  (кривые 3 и 4) при h/L = 1.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что слой полимерной жидкости в окрестности супергидрофобной стенки является сильно неоднородным и состоит из периодической последовательности областей повышенной и пониженной вязкости (см. рис. 3.8-3.10). Это отражается на характере эпюр скорости течения локально усредненных над твёр-

дыми полосками,  $\overline{u}_{stick}(z) = \frac{2}{L} \int_{L/2}^{L} u(x, z) dx$ , и заполненными газом бороздками,

 $\overline{u}_{slip}(z) = \frac{2}{L} \int_{0}^{L/2} u(x, z) dx$  при течении поперек СГФ страйп-текстуры с  $\varphi = 0.5$  при h/L = 1 (см. рис. 3.11(а), кривые 1 и 2, соответственно). В пристенной области над зоной прилипания наблюдается плавное уменьшение локальной скорости до нуля, а над зоной скольжения скорость имеет ненулевое значение, которое соответствует средней скорости скольжения. Суперпозиция эпюр средних скоростей в областях над зонами с граничными условиями прилипания и скольжения приводит к среднему профилю скорости течения

$$\overline{u}(z) = \frac{1}{2}(\overline{u}_{slip} + \overline{u}_{stick}) = \frac{1}{L} \int_{0}^{L} u(x, z) dx$$
 (рис. 3.11, кривая 3), который, в свою очередь, соответ-

ствует кривой 1 на рис. 3.5.

Искривление профиля средней скорости течения указывает на образование специфического пристенного слоя ( $\varepsilon$ -слоя), средняя вязкость которого  $\overline{\eta}_{\varepsilon}$  меньше средней вязкости  $\overline{\eta}_{C}$ лежащей выше псевдопластичной жидкости. При этом в отличие от известной модели кажущегося скольжения [80] (см. рис. 1.9, формула (1.5)) такой слой испытывает скольжение вдоль СГФ стенки. Выше  $\varepsilon$ -слоя профиль скорости остается линейным, а его экстраполяция до пересечения с осью *z* дает длину кажущегося скольжения. Для сравнения, на рис. 3.11(б)



**Рис. 3.11.** Профили средней скорости  $\overline{u}_{stick}$  (кривая 1) и  $\overline{u}_{stick}$  (кривая 2) псевдопластичной (а) и ньютоновской (б) жидкостей при течение поперек бороздок при  $\varphi = 0.5$  и h/L = 1.

приведены соответствующие профили средних скоростей  $\bar{u}_{stick}(z)$  (кривая 1),  $\bar{u}_{stick}(z)$  (кривая 2) и  $\bar{u}(z)$  (кривая 3) для ньютоновской жидкости. Видно, что в отличие от псевдопластичной полимерной среды, средний профиль скорости ньютоновской жидкости линеен вплоть до пересечения с нижней стенкой микроканала, что соответствует эффективному скольжению.

### 3.3.3. Механизм кажущегося скольжения псевдопластичной полимерной жидкости

На рис. 3.12(а) показано поле относительной вязкости  $\eta(x,z)/\eta_0$  рассматриваемого раствора ПАА при течении с базовой скоростью сдвига  $\dot{\gamma} = 1 \text{ c}^{-1}$  поперек СГФ страйп-текстуры с  $\varphi = 0.5$  в микроканале с относительной толщиной h/L = 1. Темные области соответствуют повышенной вязкости, а более светлые – пониженной. Такая картина согласуется с данными, приведенными на рис. 3.8(а) и 3.9(а) для локальных и средних распределений вязкости. Над зонами скольжения и прилипания СГФ поверхности хорошо виден сильно неоднородный слой с зонами повышенной и пониженной вязкости. При этом для заданной толщины *h*, возмущения вязкости в верхней части микроканала существенно меньше, чем у нижней СГФ стенки. Можно предположить, что такое распределение вязкостей является основной причиной кажущегося скольжения полимерной жидкости над СГФ стенкой, которое отражает профиль средней скорости, представленный на рис. 3.5.

Для доказательства рассмотрим простейшую модель, качественно учитывающую особенности изменения вязкости в окрестности супергидрофобной текстуры. С этой целью в расчетной ячейке с периодическими граничными условиями выделим три области: две из которых примыкают к зонам скольжения (область А) и прилипания (область Б) страйптекстуры, а область С расположена над ними (см. рис. 3.12(б)). Вязкости этих областей А, Б



**Рис. 3.12.** Расчетное поле вязкости водного раствора ПАА при течении простого сдвига поперек страйп-текстуры с  $\varphi = 0.5$  при h/L = 1 (а), поле вязкости усредненное по областям А, В и С (б), усредненная двухслойная система.

и С принимаются постоянными и равными соответствующим средним значениям:

$$\left\langle \bar{\eta}_{A} \right\rangle = \left( \frac{1}{\varepsilon} \int_{0}^{\varepsilon} \bar{\eta}_{A}^{-1}(z) dz \right)^{-1}, \ \left\langle \bar{\eta}_{B} \right\rangle = \left( \frac{1}{\varepsilon} \int_{0}^{\varepsilon} \bar{\eta}_{B}^{-1}(z) dz \right)^{-1} \ \mathbf{H} \ \left\langle \bar{\eta}_{C} \right\rangle = \left( \frac{1}{H - \varepsilon} \int_{\varepsilon}^{H} \bar{\eta}_{C}^{-1}(z) dz \right)^{-1}.$$
Здесь черта обо-

значает усреднение вязкостей  $\eta_k$  вдоль оси *x* указанных областей, а угловые скобки соответствуют усреднению вдоль оси *z*. Толщина областей А и В принимается равной толщине *ε*слоя. При этом, согласно рис. 3.7(а), имеют место следующие неравенства  $\langle \bar{\eta}_A \rangle > \langle \bar{\eta}_B \rangle$ .

Огрубленное поле вязкостей (рис. 3.12(б)) позволяет оценить средние скорости сдвига в областях А и Б, как  $\dot{\gamma}_A = \frac{u_{\varepsilon}}{\varepsilon + l}$  и  $\dot{\gamma}_B = \frac{u_{\varepsilon}}{\varepsilon}$ , где l – локальная длина скольжения в зоне А. Соответствующие вязкие напряжения равны  $\sigma_A = \langle \bar{\eta}_A \rangle \dot{\gamma}_A$  и  $\sigma_B = \langle \bar{\eta}_B \rangle \dot{\gamma}_B$ . Средние по  $\varepsilon$ -слою скорость сдвига  $\dot{\gamma}_{\varepsilon}$  и вязкое напряжение  $\sigma_{\varepsilon}$  задаются следующими соотношениями:

$$\dot{\gamma}_{\varepsilon} = \varphi \dot{\gamma}_{A} + (1 - \varphi) \dot{\gamma}_{B} = \left[\varepsilon + l(1 - \varphi)\right] (\varepsilon + l)^{-1} \dot{\gamma}_{B}$$
(3.1)

$$\sigma_{\varepsilon} = \varphi \sigma_{A} + (1 - \varphi) \sigma_{B} = \left[ \varphi \langle \overline{\eta}_{A} \rangle \varepsilon + (1 - \varphi) \langle \overline{\eta}_{B} \rangle (\varepsilon + l) \right] (\varepsilon + l)^{-1} \dot{\gamma}_{B}.$$
(3.2)

Эти характеристики определяют гидродинамические характеристики гомогенизированного пристенного слоя толщины  $\varepsilon$ , который показан на рис. 3.12(с). Исключая из соотношений (3.1) и (3.2) локальную скорость сдвига  $\dot{\gamma}_{B}$ , получим взаимосвязь между средними напряжением и скоростью сдвига как  $\sigma_{\varepsilon} = \eta_{\varepsilon} \dot{\gamma}_{\varepsilon}$ , откуда находим эффективную вязкость  $\varepsilon$ -слоя:

$$\eta_{\varepsilon} = \frac{\varphi \langle \bar{\eta}_{A} \rangle \varepsilon + (1 - \varphi) \langle \bar{\eta}_{B} \rangle (\varepsilon + l)}{\varepsilon + l(1 - \varphi)}.$$
(3.3)

Из данного выражения следует, что в рассматриваемом нами случае идеального локального скольжения  $l \to \infty$ , над газообразными участками СГФ текстуры выполняются следующие соотношения:  $\eta_{\varepsilon} = \langle \bar{\eta}_B \rangle < \langle \bar{\eta}_C \rangle$ . Это значит, что эффективная вязкость  $\varepsilon$ -слоя действительно имеет наименьшую вязкость, которая в данном случае равна средней вязкости области В, лежащей над зоной прилипания. Это является необходимым условием для кажущегося скольжения (ср. рис. 1.9 и формула (1.4)). Однако, в отличие от классического случая,  $\varepsilon$ -слой скользит относительно супергидрофобной поверхности, что, разумеется, должно оказывать влияние на интенсивность кажущегося скольжения. Эффективную длину скольжения  $l_{\varepsilon} \varepsilon$ -слоя можно оценить путем сопоставления определения средней скорости сдвига  $\dot{\gamma}_{\varepsilon} = \frac{u_{\varepsilon}}{\varepsilon + l_{\varepsilon}}$  в

*є*-слое с выражением (3.1), что приводит к следующему соотношению:

$$l_{\varepsilon} = \frac{\varphi l}{\varepsilon + (1 - \varphi)l}.$$
(3.4)

Отсюда следует, что при идеальном скольжении жидкости над заполненными газом бороздками страйп-текстуры  $(l \rightarrow \infty)$ , эффективная длина скольжения равна  $l_{\varepsilon} = \frac{\varphi}{1-\varphi} \varepsilon$ . Видно, что с увеличением доли участков скольжения  $\varphi$  ее величина возрастает. Для симметричной страйп-текстуры с  $\varphi = 0.5$  она равна толщине  $\varepsilon$ -слоя,  $l_{\varepsilon} = \varepsilon$ .

Для оценки длины кажущегося скольжения  $l_{app}$  найдем профиль скорости течения в Сслое. Он определяется как  $u_c(z) = U \frac{z + l_{app}}{H + l_{app}}$ . Отсюда легко найти скорость жидкости на верхней границе  $\varepsilon$ -слоя:  $u_{\varepsilon} = U \frac{\varepsilon + l_{app}}{H + l_{app}}$ . Принимая во внимание непрерывность сдвиговых

напряжений на границе раздела слоев С и є,  $\eta_{\varepsilon}\dot{\gamma}_{\varepsilon} = \langle \overline{\eta}_{C} \rangle \dot{\gamma}_{C}$ , а также определение скорости сдвига в  $\varepsilon$ -слое, находим искомую длину кажущегося скольжения:

$$l_{\rm app} = \varepsilon \left(\frac{\eta_C}{\eta_\varepsilon} - 1\right) + \frac{\eta_C}{\eta_\varepsilon} l_\varepsilon, \qquad (3.5)$$

где величины  $\eta_{\varepsilon}$  и  $l_{\varepsilon}$  задаются формулами (3.3) и (3.4). Таким образом, длина кажущегося скольжения псевдопластичной полимерной жидкости определяется двумя слагаемыми. В предельном случае отсутствия зон скольжения, l = 0 или  $\varphi = 0$ , формула (3.5) совпадает с известным выражением (1.4) для длины кажущегося скольжения ньютоновской жидкости. В противном случае следует учитывать вклад эффективного скольжение  $\varepsilon$ -слоя. При идеальном



**Рис. 3.13.** Сравнение зависимостей кажущейся поперечной длины скольжения  $l_{\text{аpp},\perp}^{P}$  псевдопластичной полимерной жидкости от относительной толщины микроканала, рассчитанной методом численного моделирования (сплошные кривые) и по формулам (3.3)-(3.5) (пунктирные кривые) при разных долях бороздок:  $\varphi = 0.25$  (1),  $\varphi = 0.5$  (2),  $\varphi = 0.75$  (3).

локальном скольжении  $l \to \infty$ , имеем  $l_{app} = \varepsilon \left[ \frac{\eta_C}{\eta_{\varepsilon}} (1 - \varphi)^{-1} - 1 \right]$ . В предельном случае  $\varphi \to 1$ 

кажущееся скольжение псевдопластичной жидкости также становится идеальным,  $l_{\text{add}} \rightarrow \infty$ .

На рис. 3.13 приведено сравнение поперечных длин кажущегося скольжения  $l_{app}^{P}$ страйп-текстуры, полученных методами численного моделирования и рассчитанных по формулам (3.3)-(3.5) для трех значений поверхностных долей  $\varphi$  газовой фазы. Видно, что при  $\varphi = 0.25$  и  $\varphi = 0.5$  оценочные и численные результаты практически совпадают, в то время как при  $\varphi = 0.75$  они согласуются качественно, но заметно различаются по величине. Это обусловлено тем, что упрощенная модель *є*-слоя лучше соответствует распределению вязкостей при доле  $\varphi \le 0.5$  (рис. 3.8(a) и 3.9(a)), когда тонкий слой возмущений локализуется вблизи супергидрофобной стенки. При  $\varphi = 0.75$  возмущения вязкости проникают в микроканал на достаточно большое расстояние от СГФ стенки, где становятся соизмеримыми с возмущениями вязкости в ее окрестности (рис. 3.10(а), кривые 3 и 4), что и вносит существенную погрешность в приведенные выше оценочные расчеты. То же относится и к узким каналам с толщиной h < L. Как видно из рис. 3.8(б) и 3.9(б), возмущения вязкости в этом случае более не локализуется вблизи страйп-текстуры, что также делает предложенную выше расчетную модель не пригодной для количественных оценок. Тем не менее, и в этом случае качественное представление о механизме кажущегося скольжения остается справедливым. Отсюда можно заключить, что вариации вязкости в окрестности супергидрофобной стенки вносят основной вклад в формирование профиля скорости псевдопластичного полимерного раствора. Такой же механизм скольжения справедлив и для течения вдоль страйп-текстуры. Отличие состоит лишь в том, что возмущения вязкости в окрестности супергидрофобной стенки в этом случае более значительны, чем при поперечном течении, в то время как вдали от стенки они быстро затухают и вязкость принимает постоянное значение (рис. 3.8(в) и 3.9(в)).

В заключение раздела, остановимся на некоторых особенностях течения ньютоновской и псевдопластичных жидкостей, наблюдаемых при течении под углом  $\Theta$  к оси СГФ страйптекстуры. В Главе 1 отмечалось, что в соответствии с тензорным характером эффективной длины скольжения  $\mathbf{l}_{eff}^{N}$ , ее значение определяется соотношением  $l_{eff,\Theta}^{N} = l_{eff,\perp}^{N} \cos^{2} \Theta + l_{eff,\parallel}^{N} \sin^{2} \Theta$  [146]. Применительно к ньютоновской жидкости результаты наших численных расчетов полностью согласуются с этим соотношением. Однако, для псевдопластичной полимерной жидкости было обнаружено, что соответствующее значение длины кажущегося скольжения  $l_{app,\Theta}^{P}$  не согласуется с преобразованием  $l_{app,\Theta}^{P} = l_{app,\perp}^{P} \cos^{2} \Theta + l_{app,\parallel}^{P} \sin^{2} \Theta$ . Таким образом, вопрос о применимости тензорного подхода к расчету длины кажущегося скольжения  $l_{app,\Theta}^{P}$  псевдопластичной жидкости при течении под углом к оси страйп-текстуры требует дополнительного исследования.

#### 3.3.4. Зависимость длины кажущегося скольжения псевдопластичной жидкости от скорости сдвига

Описанный выше механизм кажущегося скольжения проявляется тогда, когда базовая скорость сдвига лежит в области заметного изменения вязкости псевдопластичной жидкости (ср. рис. 3.4). В этом случае над областями супергидрофобной стенки с чередующимися граничными условиями скольжения и прилипания формируется сильно неоднородный пристенный слой, который и является причиной кажущегося скольжения. В предыдущих расчетах рассматривалось фиксированное значение базовой скорости сдвига  $\dot{\gamma} = 1 \text{ c}^{-1}$ . Было показано, что максимальная длина кажущегося скольжения при такой скорости сдвига достигала своего максимального значения при толщине канала h > L. В этом случае при течении поперек СГФ страйп-текстуры отношение длины кажущегося скольжения раствора ПАА к соответствующей длине эффективного скольжения ньютоновской жидкости составляет  $l_{{_{\rm app},\perp}}^{P}/l_{{_{\rm eff,\perp}}}^{N} \cong 6.38$ . Отсюда возникает вопрос о возможности более высоких значений длины кажущегося скольжения псевдопластичной жидкости при изменении базовой скорости сдвига. На рис. 3.14 представлены зависимости поперечной длины кажущегося скольжения  $l_{app}^{P}$ от скорости сдвига при различных значениях показателя степени g в модели Каро-Ясуда (см. формулу (1.2)). Расчеты проводились для микроканала с относительной толщиной h/L = 1 и долей бороздок  $\varphi = 0.5$ . Видно, что зависимость  $l_{app,\perp}^{P}(\dot{\gamma})$  является немонотонной функцией.



**Рис. 3.14.** Зависимости относительной кажущейся длины скольжения  $l_{app,\perp}^P/L$  псевдопластичных жидкостей от базовой скорости сдвига в микроканале с относительной толщиной h/L = 1 и доле бороздок  $\varphi = 0.5$  на нижней СГФ стенке при g = 0.01 (1), 0.2 (2) и 0.4 (3).

При этом максимум  $l_{app,\perp}^{\max P}$  поперечной длины кажущегося скольжения и скорость сдвига  $\dot{\gamma}_{\max}$ , при которой он наблюдается, зависят от степени g. В частности, снижение параметра g приводит к (i) росту максимальной скорости сдвига  $l_{app,\perp}^{\max,P}$  и (ii) сдвигу максимума в сторону меньших значений скоростей сдвига. В табл. 3.2 представлены отношения  $l_{app,\perp}^{\max,P}/l_{eff,\perp}^N$ , соответствующие  $\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_{\max}$ , а также положения точек перегиба  $\dot{\gamma}_{inflect}$  вязкости (рис. 3.4) при различных значения показателя g.

8	0.01	0.2	0.4
$l_{\mathrm{app},\perp}^{\mathrm{max},P} / l_{\mathrm{eff},\perp}^N$	28.78	7.60	3.15
${\dot \gamma}_{ m max}$ , ${ m c}^{-1}$	2.10	3.16	8.00
$\dot{\gamma}_{\rm inflect},{ m c}^{-1}$	4.43	6.95	12.99

Табл. 3.2. Зависимость характеристик скольжения от показателя g.

Причина обнаруженной немонотонной зависимости длины кажущегося скольжения от скорости сдвига обусловлена особенностями распределения вязкости псевдопластичной жидкости в микроканале с СГФ стенкой. В соответствии с оценочной формулой (3.5), длина кажущегося скольжения зависит от отношения средней вязкости  $\eta_{\rm C}$  в объеме микроканала к вязкости  $\varepsilon$ -слоя  $\eta_{\varepsilon}$  (рис. 3.12(в)). Это подтверждает рис. 3.15, который показывает, что увеличение скорости сдвига приводит к более быстрому уменьшению вязкости в  $\varepsilon$ -слоя  $\eta_{\varepsilon}$  по сравнению с вязкостью в объеме канала  $\eta_{\rm C}$ . С другой стороны, уменьшение параметра *g* приводит к еще более резкому падению  $\eta_{\varepsilon}$  с увеличением скорости сдвига, тогда как зависимость



**Рис. 3.15.** Зависимость отношений средних вязкостей  $\eta_C / \eta_0$  (сплошные кривые) и  $\eta_{\varepsilon} / \eta_0$  (пунктирные кривые) от скорости сдвига  $\dot{\gamma}$  в микроканале с относительной толщиной h/L = 1 и СГФ стенкой с  $\varphi = 0.5$  при разных значениях показателя g модели Каро-Ясуда: g = 0.1 ( $\circ$ ,  $\bullet$ ), 0.2 ( $\Delta$ ,  $\blacktriangle$ ). Вставка: зависимость отношения вязкостей  $\eta_C / \eta_{\varepsilon}$  от скорости сдвига.

 $\eta_{C}(\dot{\gamma})$  практически не меняется. В результате, отношение вязкостей  $\eta_{C} / \eta_{\varepsilon}$  немонотонно зависит от скорости сдвига, что демонстрируется на вставке к рис. 3.15.

При высоких и низких скоростях сдвига псевдопластичные жидкости характеризуются постоянными вязкостями  $\eta_0$  и  $\eta_\infty$  (см. табл. 3.1). В этом случае отношения вязкостей  $\eta_C/\eta_\varepsilon$ , как и длина кажущегося скольжения  $l_{app,\perp}^P$  принимают практически постоянные значения, которые не зависят от базовой скорости сдвига (см. рис. 3.14, 3.15). Данный результат подтверждает ранее полученный вывод о независимости эффективной длины скольжения ньютоновской жидкости от вязкости [143-145]. С другой стороны, максимум отношения  $\eta_C / \eta_\varepsilon$  заметно увеличивается с уменьшением показателя g. В соответствии с соотношением (3.5) это должно приводить к росту длины кажущегося скольжения, что и демонстрирует рис. 3.14. Скорость сдвига  $\dot{\gamma}_{max}$ , соответствующая максимуму отношения  $\eta_C / \eta_\varepsilon$  при разных значениях g совпадает со значениями скорости сдвига, определяющими максимальные значения длины кажущегося скольжения, независимо рассчитанной методами численного моделирования. Полученные результаты подтверждают вывод о том, что длина кажущегося скольжения псевдопластичной полимерной жидкости определяется особенностями возмущений вязкости вблизи супергидрофобной поверхности.

Важно отметить, что скорости сдвига  $\dot{\gamma}_{max}$ , соответствующие максимуму длины кажущегося скольжения коррелируют со значениями скорости сдвига  $\dot{\gamma}_{inflect}$  в точке перегиба кривой вязкости (см. рис. 3.4). Уменьшение показателя *g* сопровождается уменьшением обоих скоростей сдвига  $\dot{\gamma}_{max}$  и  $\dot{\gamma}_{inflect}$  (табл. 3.2) и ростом наклона вязкой кривой. Таким образом, можно заключить, что минимальное гидродинамическое сопротивление в микроскопических каналах с супергидрофобной стенкой может быть достигнуто при использовании псевдопластичных жидкостей, которые характеризуются большими значениями производной  $d\eta(\dot{\gamma})/d\dot{\gamma}$ .

## 3.4. Геликоидальное течение в микроканале с наклонной ориентацией супергидрофобной текстуры

Рассматривали течение Пуазейля ньютоновской и псевдопластичной жидкостей в прямоугольном микроканале при наклонной ориентации супергидрофобной страйп-текстуры на его нижней стенке (см. рис. 2.6). Геометрические характеристики канала: длина –  $L_0 = 5$ мм, высота – h = 60 мкм, ширина – w=100 мкм, период неоднородности СГФ текстуры – L = 60мкм, доля участков жидкость-газ  $\varphi = 0.5$ , угол наклона  $\Theta$  страйп-текстуры к оси канала варьировали от 5 до 85°. В качестве псевдопластической жидкости рассматривали водный раствор ПАА, зависимость вязкости которого описывается соотношением Каро-Ясуда (1.2) с характеристиками, представленными в табл. 3.1.



Рис. 3.16. Линии тока ньютоновской жидкости в микроканале (а) с гладкой стенкой и (б) с наклонной СГФ страйп-текстурой.  $L_0 = 5$ мм, h = 60 мкм, w = 100 мкм, L = 60 мкм,  $\varphi = 0.5$ ,  $\Theta = 45^{\circ}$ , U = 0.1 мм/с.

На рис. 3.16 представлены рассчитанные линии тока при течении ньютоновской жидкости в микроканале (а) с гладкой стенкой и (б) с СГФ страйп-текстурой, ориентированной под углом  $\Theta = 45^{\circ}$  к оси канала (темными полосками отмечены участки контакта жидкостьгаз). Средняя скорость течения – U = 0.1 мм/с, вязкость ньютоновской жидкости –  $\eta = 10^{-3}$ Па·с. Видно, что во втором случае имеет место геликоидальная закрутка потока. Вблизи СГФ страйп-текстуры линии тока отклоняются в сторону наклона бороздок, тогда как в верхней части канала они отклоняются в противоположную сторону.



**Рис. 3.17.** (а) Линии тока ньютоновской жидкости на разных расстояниях от СГФ стенки: (*i*) z/h = 0.01, (*ii*) z/h = 0.15, (*iii*) z/h = 0.7. (б) Изменение давления вдоль поперечной координаты *y*. (в) Отклонение линии тока над зонами скольжения и прилипания. ( $\Theta = 45^{\circ}$ ,  $L_0=0.5$ мм, U=0.1 мм/с,  $\eta = 10^{-3}$  Па·с, L=60 мкм, h=60 мкм, w=100 мкм).

Для объяснения физических причин отклонения линий тока от оси канала, рассмотрим поведение относительного давления  $p/(\langle \nabla_x p \rangle x_0 \rangle)$  вдоль оси y ( $\langle \nabla_x p \rangle -$  средний градиент давления в канале вдоль оси x) в поперченном сечении микроканала с координатой  $x_0$  (отмечено красным пунктиром на рис. 3.17(а)) при трех значениях вертикальной координаты: 1) z/h = 0.01, 2) z/h = 0.15 и 3) z/h = 0.7 (рис. 3.17(а), вставки *i*, *ii* и *iii*). Сечение выбрано таким образом, чтобы оно в равной мере пересекало как область над зоной скольжения (темные полосы), так и над зоной с граничным условием прилипания (светлые полосы). Рис. 3.17(а) показывает, что вблизи наклонной СГФ страйп-текстуры давление вдоль оси y возрастает над участками прилипания и убывает над участками скольжения. Такое поведение приводит к тому, под действием локальных градиентов давления  $\nabla_y p_{slip}$  и  $\nabla_y p_{slick}$  над зонами бороздок линии тока откланяются на угол  $\beta_{slip}$  влево от оси канала, а при течении над твердыми полосками – на угол  $\beta_{stick}$  в сторону правой стенки микроканала (см. рис. 3.17(а,в)). В связи с тем, что рассматриваемая страйп-текстура является периодической, достаточно рассмотреть поведение линии тока над двумя последовательными участками скольжения и прилипания. В

84



Рис. 3.18. Линии тока ньютоновской жидкости в микроканале с наклонной СГФ текстурой. Для наглядности канал сжат в 5 раз вдоль оси  $x.(\Theta = 45^\circ, L_0 = 2 \text{ см}, U = 0.1 \text{ мм/с}, \eta = 10^{-3} \text{ Па·с}, L = 60 \text{ мкм}, h = 60 \text{ мкм}, w = 100 \text{ мкм})$ 

силу того, что  $|\nabla_y p_{slip}| \approx |\nabla_y p_{stick}|$  (см. рис. 3.17(б)), углы наклона линий тока над соответствующими участками примерно равны, т.е.  $\beta_{slip} \approx \beta_{stick}$  (рис. 3.17(в)). В то же время над зонами скольжения линии тока откланяются на большее расстояние от оси канала (отрезок *CB*), чем над зоной прилипания (отрезок *FG*). Это обусловлено тем, что вследствие наклонной ориентации страйп-текстуры, частицы жидкости над границами жидкость-газ преодолевают больший путь, т.е. *AC* > *CF*. Такие периодические отклонения над зонами скольжения и прилипания приводят к формированию микроспирали (рис. 3.18). В то же время результирующая (средняя) линия тока отклоняется от прямолинейного направления на угол  $\beta$  к оси канала в направлении к левой по течению стенке (рис. 3.17(в)).

В длинном канале с боковыми стенками отклонение средних линий тока от направления продольного градиента давления порождает макроскопическое геликоидальное течение. На рис. 3.18(а) представлены три линии тока, расположенные на разных расстояниях от центра канала (рис. 3.18(б)). Видно, что все они вращаются вокруг общей оси расположенной чуть ниже оси симметрии канала. Очевидно, что такое геликоидальное течение способно усиливать смешивание жидкостей в микроканале. Интенсивность такого перемешивания будет завесить от угла отклонения средних линий тока от прямолинейного течения и периода макроспиралей. Чем больше угол отклонения средних линий тока, тем меньше период спиралей и, следовательно, перемешивание жидкости будет более интенсивным. Поскольку, угол отклонения линий тока (рис. 3.17(а)), а также период и амплитуда спиралей (рис. 3.18) изменяются по мере удаления от СГФ страйп-текстуры, интенсивность геликоидального те-

чения целесообразно характеризовать интегральной величиной  $T = \frac{1}{V} \int_{V} \left| \frac{u_y}{u_x} \right| dV$ , которая явля-

ется средней мерой отклонения линии тока от центральной оси и, соответственно, интенсивности геликоидального течения в объеме V микроканала.



**Рис. 3.19.** (а) Зависимости параметра интенсивности геликоидального течения T от угла наклона  $\Theta$  страйп-текстуры для ньютоновской жидкости и водного раствора полиакриламида при различных скоростях течения. (б) Усредненные вдоль оси x профили скорости и (в) вязкости псевдопластичной полимерной жидкости при разных скоростях течения.

Рассмотрим зависимость параметра T от угла наклона текстуры  $\Theta$  для ньютоновской жидкости и псевдопластичного раствора ПАА при разных значениях средней скорости течения U в рассматриваемом микроканале. Рис. 3.19(а) показывает, что эти зависимости носят немонотонный характер, а наиболее интенсивное геликоидальное течение имеет место для ньютоновской жидкости (черная кривая). При этом отметим, что для ньютоновской жидкости структура линий тока и, соответственно, значения интегрального параметра Т определяются только углом наклона текстуры  $\Theta$  и не зависит от вязкости жидкости и скорости течения. Течение псевдопластичной жидкости характеризуется меньшими значениями параметра Т и, следовательно, образующееся геликоидальное течение менее интенсивно по сравнению с ньютоновской жидкостью. При этом для псевдопластичной жидкости кривые  $T(\Theta)$  зависят от средней скорости течения U в микроканале. При больших и малых скоростях течения (красная и зеленая кривые) зависимости Т( $\Theta$ ) для полимерного раствора приближаются к кривой, соответствующей ньютоновской жидкости (черная кривая). В то же время при промежуточных значениях скоростей течения имеет место значительное уменьшение параметра T, а значит и интенсивности геликоидального течения псевдопластичной жидкости. Такое поведение объясняется следующим образом. Увеличение средней скорости U течения жидкости в микроканале приводит к росту скорости сдвига  $\dot{\gamma}$  вблизи стенок канала. В свою очередь, это индуцирует изменение вязкости псевдопластичной жидкости в соответствии с рео-

86

логической кривой, показанной на рис. 3.4. При больших и малых скоростях сдвига вязкость достигает предельных значений  $\eta_0$ , и  $\eta_\infty$ , при которых полимерная жидкость демонстрирует ньютоновское поведение. Это подтверждают усредненные вдоль горизонтальной оси *x* профили скорости (рис. 3.19(б)) и вязкости (рис. 3.19(в)) псевдопластичной полимерной жидкости при разных скоростях течения в микроканале. Как видно, при больших и при малых скоростях течения профили скорости течения полимерного раствора приближаются к соответствующим профилям ньютоновской жидкости, а их вязкость стремится к постоянным значениям  $\eta_0$ , и  $\eta_\infty$ . В то же время, при промежуточных значениях средней скорости *U* возникают пробкообразные профили скорости, которые обусловлены возникновением больших градиентов вязкости псевдопластичной жидкости (см. рис. 3.19(в)). На основе полученных данных, можно сделать вывод о том, что смешение псевдопластичных сред в диапазоне скоростей сдвига, при которых жидкость демонстрирует псевдопластические свойства, происходит менее интенсивно по сравнению с ньютоновскоми жидкостями.

Ранее, в работе [178] было показано, что для ньютоновской жидкости максимальная поперечная скорость течения вблизи СГФ имеет место при угле наклона страйп-текстуры  $\Theta_{\text{max}} = 45^{\circ}$ . В то же время наши расчеты показывают, что применительно к интегральному параметру T для ньютоновской жидкости его максимальное значение достигается при  $\Theta_{\text{max}} \approx 40^{\circ}$ , а для псевдопластичной полимерной среды –  $\Theta_{\text{max}} \approx 25^{\circ}$  (см. рис. 3.19(а)). Для объяснения данного эффекта рассчитаем значения параметра T в тонком слое у верхней стенки микроканала,  $T_{up} = \frac{1}{V_{up}} \int_{V_{up}} \left| \frac{u_y}{u_x} \right| dV$ , а также в слое вблизи СГФ поверхности,

$$T_{\rm shw} = \frac{1}{V_{\rm shw}} \int_{V_{\rm shw}} \left| \frac{u_y}{u_x} \right| dV$$
 при разных углах  $\Theta$  наклона страйп-текстуры ( $V_{\rm up}$  и  $V_{\rm shw}$  – объемы верх-

него и нижнего слоев) (см. рис. 3.20(в)). Для ньютоновской жидкости полученные результаты представлены на рис. 3.19(а). Видно, что в этом случае максимальное значение  $T_{\rm shw}$  достигается при  $\Theta_{\rm max}^{\rm shw} = 45^{\circ}$ , что согласуется с известными результатами аналитических расчетов [178]. С другой стороны, параметр  $T_{\rm up}$  достигает своего максимума при  $\Theta_{\rm max}^{\rm up} = 20^{\circ}$ . Это объясняет причину сдвига максимума интегрального параметра *T* в сторону меньших значений угла наклона  $\Theta$  текстуры. Для псевдопластичной жидкости зависимости параметров *T*,  $T_{\rm shw}$  и  $T_{\rm up}$  от угла  $\Theta$  представлены на рис. 3.20(б). Рассчитанные кривые качественно согласуются с рис. 3.20(а) для ньютоновской жидкости. Однако, амплитуда и положение максимальных значений этих параметров сдвигается в сторону меньших значений. В частности,



**Рис. 3.20.** Зависимости интегральных параметров *T*,  $T_{up}$  и  $T_{shw}$  от угла наклона СГФ страйптекстуры  $\Theta$  для ньютоновской (а) и псевдопластичной (б) жидкостей. Стрелками отмечены углы наклона текстуры  $\Theta_{max}$ , соответствующие максимумам *T*,  $T_{up}$  и  $T_{shw}$ . (в) Области расчета параметров  $T_{up}$  и  $T_{shw}$  у верхней и нижней стенок, соответственно. (г) Зависимость значений угла наклона  $\Theta_{max}^{shw}$  страйп текстуры от средней скорости для ньютоновской (пунктирная линия) и псевдопластичной (сплошная линия) жидкостей.

для псевдопластичных жидкостей  $\Theta_{\text{max}} = 25^{\circ}$ ,  $\Theta_{\text{max}}^{\text{shw}} = 35^{\circ}$  и  $\Theta_{\text{max}}^{\text{up}} = 15^{\circ}$  соответственно для *T*, *T*<sub>shw</sub> и *T*<sub>up</sub>. при *U* = 0.01 мм/с.

Результаты расчетов  $T_{shw}$  при различных углах наклона текстуры  $\Theta$  обобщены в виде зависимостей оптимального угла наклона  $\Theta_{max}^{shw}$  от средней скорости течения U псевдопластичной (сплошная линия) и ньютоновской (пунктирная линия) жидкостей (рис. 3.20(г)). Видно, что при скоростях течения, соответствующих неньютоновскому поведению водного раствора ПАА, значение  $\Theta_{max}^{shw}$  всегда ниже 45°, тогда как оптимальный угол  $\Theta_{max}^{shw}$  для ньютоновской жидкости равен 45° при любых скоростях течения. Таким образом, оптимальный угла наклона СГФ страйп-текстуры, при котором имеет место максимальное отклонение линий тока от оси канала, принимает разные значения для ньютоновской и псевдопластической жидкостей.

### Выводы по Главе 3

- Возмущения скорости течения простого сдвига поперек супергидрофобной страйптекстуры образуют разнонаправленные вихри, которые локализованы над участками контактов жидкости с заполненными газом бороздками и твердыми полосками. В широком микроканале возмущения скорости локализуются вблизи супергидрофобной текстуры, а в узком – распространяются на всю область канала. Увеличение поверхностной доли участков скольжения на супергидрофобной поверхности способствует росту возмущений скорости.
- Течение псевдопластичной полимерной жидкости над супергидрофобной текстурой характеризуется смешанным механизмом скольжения. Он включает как эффективное, так кажущееся скольжение. Продольная и поперечная длины кажущегося скольжения значительно больше, чем соответствующие эффективные длины скольжения ньютоновской жидкости.
- Кажущееся скольжение псевдопластичной полимерной жидкости обусловлено формированием неоднородного слоя вблизи супергидрофобной поверхности, эффективная вязкость которого меньше средней вязкости в объеме микроканала.
- 4. Длина кажущегося скольжения псевдопластичной полимерной жидкости является немонотонной функцией от скорости сдвига. Величина скорости сдвига, соответствующая максимуму длины скольжения, коррелирует с положением точки перегиба реологической кривой зависимости вязкости от скорости сдвига. Увеличение крутизны наклона кривой вязкости приводит к существенному росту длины кажущегося скольжения.
- 5. Наклонная ориентация супергидрофобной страйп-текстуры относительно оси канала стимулирует формирование геликоидального течения как ньютоновской, так и псевдопластичной жидкостей. Амплитуда и период геликоидальных линий тока зависят от расстояния до супергидрофобной стенки микроканала.
- 6. Линии тока псевдопластичной среды характеризуется меньшим углом отклонения от оси микроканала с анизотропной супергидрофобной стенкой и большим периодом закрутки по сравнению с ньютоновскими жидкостями. Это приводит к низкой эффективности перемешивания псевдопластичных сред.

### Глава 4. Особенности течения дисперсных ньютоновских и псевдопластичных полимерных жидкостей в коаксиальных капиллярах

Задача о закономерностях течений дисперсных сред в микроканалах, включая формирование микрокапель заданного размера, относится к одной из важных проблем, решение которой представляет значительный практический интерес. Один из наиболее перспективных способов генерации монодисперсных микрокапель заключается в использовании особенностей течения двух несовместимых жидкостей в коаксиальных капиллярах. Развитию данного метода посвящено большое число публикаций (см., например, [202-204]). Тем не менее, остается ряд принципиально важных вопросов, которые требуют внимания исследователей.

С практической точки зрения, наибольший интерес представляют вопросы, связанные с отработкой режимов течения термодинамически несовместимых жидкостей в коаксиальных капиллярах для получения капель заданного размера. В первой главе отмечалось, что создание монодисперсных микрокапель возможно только при капельном режиме течения. Такой режим, однако, не является уникальным, и небольшие изменения средней скорости течения или вязкости жидкостей в капиллярах могут приводить к струйным или иным режимам течения. Таким образом, одной из центральных является задача об определении физических и гидродинамических условий реализации того или иного морфологического состояния среды. С другой стороны, активное использование неньютоновских полимерных жидкостей в работе микрожидкостных устройств [156-158] требует понимания влияния их реологических свойств на особенности формирования капель при течении в коаксиальных капиллярах.

В данной главе рассматриваются некоторые из отмеченных вопросов. В первой части, на основе большого массива данных, полученных нами при численном моделировании течения несовместимых жидкостей в коаксиальных капиллярах, строятся диаграммы динамических состояний двухкомпонентной среды в координатах относительной вязкости дисперсной фазы и капиллярного числа внешней жидкости при разных скоростях течения дисперсной среды. Во второй части главы исследуется роль псевдопластичной полимерной дисперсионной среды на особенности формирования и размер капель. В заключение затрагивается вопрос о влиянии транспортных характеристик капилляров. Представлены результаты численного моделирования формирования капель при условии скольжения дисперсионной среды на внутренней поверхности внешнего капилляра.

Результаты исследований, представленные в данной главе, изложены в публикациях и тезисах конференций [275, 282].

## 4.1. Сравнение численных расчетов с экспериментальными результатами

Прежде чем перейти к решению поставленных задач, представим результаты сравнения полученных нами численных результатов с известными экспериментальными данными для ньютоновских жидкостей [217]. Геометрические параметры используемых в эксперименте капилляров приведены на рис. 4.1 и в табл. 4.1. Индексы "с" и "d" соответствуют дисперсионной обтекающей жидкости (continuous) и дисперсной фазе (dispersed), истекающей из внутреннего капилляра, соответственно.



**Рис. 4.1.** Модель коаксиальных капилляров. *Q*<sub>c</sub> и *Q*<sub>d</sub> – потоки дисперсионной и дисперсной жидкостей во внешнем и внутреннем капиллярах.

табл. ч.т. тазмеры капилляров								
$d_{ m c}$ , мм	$d_{ m d}^{ m in}$ , мкм	$d_{ m d}^{ m out}$ , мкм	<i>L</i> <sub>c</sub> , мм	<i>L</i> <sub>d</sub> , мм				
1.6	260	514	7.8	2.6				

Табл. 4.1. Размеры капилляров

На рис. 4.2(а) приведены расчетные (верхняя строка) и экспериментальные [217] (нижняя строка) изображения эволюции формы капли, истекающей из внутреннего капилляра. В качестве жидких компонентов использовались ньютоновские среды с вязкостями и расходами равными  $\eta_d = 7.2 \ 10^{-4} \ \Pi a \cdot c$ ,  $Q_d = 5 \ \text{мкл/мин}$  и  $\eta_c = 0.35 \ \Pi a \cdot c$ ,  $Q_c = 150 \ \text{мкл/мин}$ . Коэффициент межфазного натяжения  $\gamma = 3.3 \cdot 10^{-3} \ \text{H/m}$ . Видно, что рассчитанные формы продольного сечения капли в разные моменты согласуется с наблюдаемыми в эксперименте. Расходы жидкостей в капиля-

рах связаны со средними скоростями течения  $U_{\rm d}$  и  $U_{\rm c}$ , как  $Q_{\rm d} = 4U_{\rm d} / \left( \pi \left( d_{\rm d}^{\rm in} \right)^2 \right)$  и

 $Q_{\rm c} = 4U_{\rm c} / \left( \pi \left[ \left( d_{\rm c} \right)^2 - \left( d_{\rm d}^{\rm out} \right)^2 \right] \right)$ . Сравнение расчетных и экспериментальных зависимостей размера капли от отношения расходов  $Q_{\rm c}/Q_{\rm d}$  во внешнем и внутреннем капиллярах представлено на рис. 4.2(б) для тех же параметров дисперсной фазы и двух значениях вязкости обте-



**Рис. 4.2.** (а) Динамика формирования капли в коаксиальных капиллярах ( $\eta_d$ =7.2 10<sup>-4</sup> Па·с,  $Q_d$ =5 мкл/мин и  $\eta_c$ =0.35 Па·с,  $Q_c$ =150 мкл/мин) (сверху – расчет, снизу – эксперимент [217]). (б) Зависимости диаметра *D* образующихся капель от отношения расходов  $Q_c/Q_d$  ньютоновских жидкостей при разных вязкостях сплошной среды (сплошные кривые – наш расчет, пунктир – эксперимент [217]):  $\eta_c$ =0.8 Па·с (• – расчет,  $\bigcirc$  – эксперимент) и  $\eta_c$ =0.35 Па·с (• – расчет,  $\bigcirc$  – эксперимент).

кающей среды  $\eta_c = 0.35$  и 0.8 Па·с. Видно, что численные результаты (сплошные кривые) хорошо согласуются с экспериментальными данными (пунктир) [217]. В частности, для ньютоновских жидкостей рост отношения расходов  $Q_c/Q_d$  и вязкости сплошной среды  $\eta_c$  приводят к уменьшению размера капель. Согласие наших численных расчетов с экспериментом подтверждает достоверность и адекватность применяемой вычислительной методики.

## 4.2. Диаграммы морфологических состояний двухфазных ньютоновских жидкостей в коаксиальных капиллярах

В Главе 1 отмечалось, что в ряде работ по исследованию гидродинамического поведения дисперсных жидкостей в коаксиальных капиллярах диаграммы динамических состояний строились в координатах капиллярных чисел сплошной  $Ca_c$  и дисперсной  $Ca_d$  сред [213, 216]. Напомним, что  $Ca_c = \eta_c U_c/\gamma$  и  $Ca_d = \eta_d U_d/\gamma$ . Использование капиллярных чисел  $Ca_c$ ( $Ca_d$ ), подразумевает, что с точки зрения режимов течения, изменение вязкости  $\eta_c$  ( $\eta_d$ ) эквивалентно изменению средней скорости течения  $U_c$  ( $U_d$ ). Для проверки справедливости этого предположения применительно к коаксиальным капиллярам, мы провели серию численных экспериментов, цель которых состояла в том, чтобы сравнить влияние попарного изменения параметров  $U_c$  и  $\eta_c$  или  $U_d$  и  $\eta_d$  на результирующие режимы течения ньютоновских жидкостей. За основу взят расчет с параметрами  $U_c = U_d = 0.1$  мм/с,  $\eta_c = \eta_d = 1$  Па·с,  $\gamma = 3.3 \cdot 10^{-3}$  Н/м, при которых имеет место капельный режим течения (рис. 4.3(а)). Капиллярные числа в этом случае равны  $Ca_c = Ca_d = 0.03$ . В ходе исследования варьировали каждый из параметров  $U_c$ ,  $\eta_c$  ( $U_d$ ,  $\eta_d$ ) таким образом, чтобы получались одни и те же значения капиллярных чисел  $Ca_c$ ( $Ca_d$ ).

На рис. 4.3(б) представлены результаты расчетов при фиксированных значениях капиллярных чисел  $Ca_c$ , но разных скоростях  $U_c$  и вязкостях  $\eta_c$  сплошной среды. Как видно, увеличение  $Ca_c$  приводит к переходу от капельного к струйному режиму при одних и тех же значения  $Ca_c$  независимо от того, какой параметр изменяется – вязкость  $\eta_c$ . или средняя скорость  $U_c$ . Небольшие различия заключаются лишь в морфологии границы раздела. В частности, при малых  $Ca_c$  размер капель при уменьшении скорости несколько больше, чем при соответствующем уменьшении вязкости. Кроме того, при переходе к струйному режиму наблюдаются различия в форме струи, а именно, при увеличении скорости формируется более тонкая струя, чем в случае увеличения вязкости.

Результаты, полученные для фиксированных значений капиллярного числа  $Ca_d$  дисперсной жидкости, при вариации вязкости  $\eta_d$  и средней скорости  $U_d$  приведены на рис. 4.3(в). Видно, что при одних и тех же значениях капиллярного числа  $Ca_d$ , соответствующих попарно разным значениям  $\eta_d$  и  $U_d$ , наблюдаются различные морфологии границы раздела дисперсной фазы. При малых скоростях течения  $U_d$  имеет место образование капель микронного размера на протяжении всего времени численного эксперимента. Впервые такой режим был экспериментально обнаружен в работе [217]. Он крайне нежелателен для производства монодисперсных эмульсией. Увеличение капиллярного числа  $Ca_d$  за счет изменения вязкости  $\eta_d$  приводит к формированию струйного режима с сужающейся струей, тогда как увеличение скорости  $U_d$ при фиксированном  $\eta_d$  приводит к специфическому капельному режиму, который сопровождается разрывом шейки на некотором удалении от внутреннего капилляра (см. рис. 4.3(в),  $Ca_d = 0.3 \times 0.6$ ).

Таким образом, проведенные нами численные эксперименты показали, что поочередное изменение вязкости и скорости  $\eta_c$  и  $U_c$  сплошной среды при фиксированных значениях  $Ca_c$  практически не меняет морфологию дисперсной фазы, тогда как вариации вязкости и скорости  $\eta_d$  и  $U_d$  дисперсной жидкости при фиксированном  $Ca_d$  приводят к заметным изменениям динамических состояний. Таким образом, капиллярное число  $Ca_c$  внешней жидкости оказывается более универсальной характеристикой течения и ее можно использовать при построении диаграммы морфологических состояний двухфазной жидкости в коаксиальных капиллярах. В то же время, использование капиллярного числа  $Ca_d$  дисперсной жидкости в качестве



**Рис. 4.3.** Результаты численного эксперимента по изучению попарного изменения скоростей и вязкостей на морфологические состояния дисперсной фазы: (а) – базовый расчет, (б) - влияние попарного изменения  $\eta_c$  и  $U_c$  при фиксированных значениях  $Ca_c$ ; (в) - влияния попарного изменения  $\eta_d$  и  $U_d$  при фиксированных значениях  $Ca_d$ .

координаты на диаграмме не вполне обоснованно, поскольку при одном и том же его значении могут наблюдаться разные режимы течения и морфологии дисперсной фазы при попарно разных значениях вязкости  $\eta_d$  и  $U_d$ .

Отметим также, что в ряде других работ [62, 191] диаграммы режимов течения строились в координат  $Ca_c$ - $We_d$ , где  $We_d = \rho d_d^{out} U_d / \gamma$  – число Вебера дисперсной жидкости. Использование таких переменных предполагает слабое влияние вязкости дисперсной жидкости на процессы, протекающие в микроканалах, поскольку число Вебера не зависит вязкости. Приведенные на рис. 4.3 результаты численных экспериментов показывают, что вязкость дисперсной жидкости для рассматриваемой системы  $\eta_d$  оказывает существенное влияние на переходы между различными режимами течения. По этой причине в данной работе морфологические динамические состояния предлагается классифицировать в координатах  $Ca_c-\eta_d/\eta_c$ . Такой новый подход позволяет исключить неоднозначность представления динамических диаграмм состояний двухфазной ньютоновской среды. В соответствии с этим, было проведено и систематизировано более 300 численных экспериментов, описывающих течение двухкомпонентной ньютоновской жидкости в коаксиальных капиллярах при разных вязкостях компонентов среды и средних скоростях. На этой основе построили три диаграммы режимов течения, отображенных на рис. 4.4 в координатах относительной вязкости  $\eta_d/\eta_c$  и капиллярного числа  $Ca_c$ , при разных скоростях течения дисперсной фазы  $U_d$ . На рис. 4.4 такие диаграммы представлены сверху вниз по мере возрастания скорости  $U_d$ . Справа от диаграмм приведены типичные формы межфазной границы, соответствующие тому или иному режиму течения на каждой из диаграмм.

Проанализируем каждую из приведенных диаграмм. При наименьшей из рассмотренных скоростей дисперсной жидкости  $U_d = 0.1$  мм/с (верхняя диаграмма на рис. 4.4) классический капельный режим течения наблюдается в диапазонах  $0.001 < Ca_c < 0.1$  и  $\eta_d / \eta_c \le 3$ . При  $Ca_c \le 0.001$  имеет место так называемый сжимающий капельный режим, который сопровождается формированием капель, эффективный диаметр которых равен или больше диаметра внешнего капилляра. Такой режим течения также позволяет производить капли одинаково размера. Однако, на практике использование сжимающего капельного режима может привести к определенным трудностям, связанным с возможным контактом дисперсной жидкости со стенками внешнего капилляра.

Увеличение Ca<sub>c</sub> сопровождается появлением капель субмикронных размеров в ходе формирования основных капель (неоднородный капельный режим). Такая морфология течения образуется при увеличении расхода сплошной среды. Она была классифицирована в работе [217], как переходный режим между капельным и струйным режимами течения. Наблюдался также переходный режим течения, при котором периодически формируются последовательности капель, размеры которых варьируются от нескольких микрон до нескольких десятков микрон в соответствии с геометрической прогрессией. Данный режим впервые был описан в работе [267] при исследовании течения жидких смесей в микроустройстве с фокусирующим капилляром. Дальнейшее увеличение капиллярного числа Cac приводит к формированию сужающейся струи. При  $Ca_c > 1$  с острого кончика дисперсной фазы независимо от ее вязкости начинают срываться более мелкие микрокапли (тип-стримминг). Такой режим течения может быть полезен при получении капель субмикронных размеров [220]. При относительной вязкости компонентов среды  $\eta_d / \eta_c > 3$  описанные типы морфологических состояний переходят в струйный режим. При Ca<sub>c</sub> ≤ 0.03 сжимающий и классический капельные режимы течения переходят в струйный режим с расширяющейся струей, а при Ca<sub>c</sub> > 0.03 вместо капельного и переходного режимов течения возникает струйный режим с сужающейся струей.



**Рис. 4.4.** Диаграммы морфологических состояний дисперсионной жидкости в процессе истечения из внутреннего капилляра при разных скоростях  $U_d$ . Справа показаны типичные формы дисперсного компонента, соответствующие разным символам на представленных диаграммах.

При средней скорости течения  $U_d = 1$  мм/с диапазон значений  $Ca_c$ , при которых наблюдается классический капельный режим, смещается в сторону больших значений капиллярного числа (см. средняя диаграмма на рис. 4.4). Так, если при  $U_d = 0.1$  мм/с капельный режим течения имел место при  $0.001 < Ca_c < 0.1$ , то при скорости  $U_d = 1$  мм/с он наблюдается в диапазоне  $0.03 < Ca_c < 0.3$ . Отметим также, что для данного значения скорости  $U_d$  диапазон относительной вязкости  $\eta_d/\eta_c$ , в котором наблюдается классический капельный режим течения, зависит от значений  $Ca_c$  капиллярного числа сплошной среды: чем больше  $Ca_c$ , тем при меньших отношениях вязкостей наблюдается переход капельный режим, который с увеличением  $\eta_d/\eta_c$  переходит в сжимающий струйный режим течения. Последний характеризуется формированием непрерывной струи, диаметр которой соизмерим с диаметром внешнего капилляра. Отметим, что при  $U_d = 1$  мм/с эффективный диаметр формируемых капель в сжимающем капельном режиме значительно больше диаметра внешнего капилляра. Вследствие этого капли вытягиваются вдоль канала.

При максимальной рассмотренной скорости течения дисперсной жидкости,  $U_d = 10$  мм/с, (см. нижняя диаграмма на рис. 4.4), классический капельный режим не был зарегистрирован в изученном диапазоне значений параметров  $Ca_c$  и  $\eta_d/\eta_c$ . Тем не менее, был найден специфический режим, при котором отрыв капель имеет место на некотором расстоянии от основания внутреннего капилляра. При этом жидкость, находящаяся между шейкой и срезом капилляра, переходит в следующую каплю, в связи с чем, время формирования капель снижается. Об этом свидетельствует близкое расположение капель друг к другу (см. иллюстрацию справа от нижней диаграммы на рис. 4.4). Данный режим течения наблюдается при  $3 \le Ca_c < 1$ . Струйный режим начинает формироваться при минимальной вязкости дисперсной жидкости  $\eta_d / \eta_c \ge 0.01$ . Отметим, что размер капель при сжимающем капельном режиме достигает еще больших размеров по сравнению с каплями при меньших скоростях течения.

## 4.3. Формирование капель в коаксиальных капиллярах при обтекании псевдопластичной полимерной жидкостью

Численное моделирование особенностей формирования капель ньютоновской жидкости при их обтекании псевдопластичной полимерной средой проводилось при тех же размерах капилляров, которые приведены в табл. 4.1. Вязкость дисперсной среды равна  $\eta_d = 7.2 \ 10^{-4}$  Па·с, также как и при сравнении с экспериментальными данными (см. рис. 4.1). В качестве псевдопластичной сплошной среды рассматривался водный раствор полиакриламида с концентрацией полимера 500 ppm. Реологическая кривая такой жидкости описывается моделью Каро-Ясуда (1.2) с параметрами  $\eta_0 = 1.08$  Па·с,  $\eta_{\infty} = 0.0023$  Па·с,  $\lambda = 5$ , f = 1, g = 0.2 (рис. 3.4, кривая 2).

На рис. 4.5(а) приведена рассчитанная зависимость относительного диаметра  $D/d_d^{\text{out}}$  капель, образованных при обтекании псевдопластичной жидкостью, от отношения расходов  $Q_c/Q_d$ . Для сравнения, на графике представлена аналогичная зависимость, полученная при обтекании ньютоновской жидкостью, вязкость которой равна нулевой вязкости раствора ПАА,  $\eta_c = \eta_0 = 1.08 \text{ Па} \cdot \text{с}$ . Кроме того, на рисунке представлены микрокапли, образующиеся при отрыве за счет обтекания ньютоновской (рис. 4.5(б)) и псевдопластичной (рис. 4.5(в)) жидкостями при  $Q_c/Q_d = 30$ . Видно, что во всем диапазоне отношения расходов  $Q_c/Q_d$  диа-



**Рис. 4.5.** (а) Зависимость диаметра капель от отношения расходов сплошной и дисперсной жидкостей:  $\Box$ - водный раствор ПАА,  $\Delta$  – ньютоновская жидкость. (б) Форма ньютоновских капель в момент их отрыва при обтекании ньютоновской жидкостью и (в) псевдопластичным раствором ПАА при  $Q_c/Q_d = 30$ .

метр капель в полимерной среде существенно больше, чем при обтекании ньютоновской жидкостью. При этом в первом случае размер капель практически не зависит от отношения расходов жидкостей в капиллярах. Как видно из рис. 4.5(в), отрыв капель в полимерной среде происходит без формирования саттелитных микрокапель (ср. рис. 4.5(б)).

Для объяснения эффекта увеличения размера капли при обтекании псевдопластичной полимерной средой рассмотрим поле вязкости в процессе формирования капли (рис. 4.6). Видно, что вокруг капли образуется область с пониженной вязкостью (синий цвет), что приводит к существенному снижению вязких напряжений. С другой стороны, перед каплей формируется область повышенной вязкости (красный цвет), которая очевидно способствует ее боковому расширению. Оба указанных фактора препятствуют раннему отрыву капли и благоприятствуют ее росту перед отрывом.



**Рис. 4.6.** Поле вязкости в процессе формирования ньютоновской капли в коаксиальных капиллярах при обтекании водным раствором полиакриламида.

## 4.4. Влияние скольжения на размер капель в коаксиальных капиллярах

В предыдущей главе рассматривались эффекты скольжения в микроканале с супергидрофобной стенкой. В данном параграфе рассмотрим вопрос о влиянии скольжения сплошной среды на поверхности внешнего капилляра на размер формируемых капель. На рис. 4.7 представлена зависимость относительного размера такой капли  $D/d_d^{out}$  от безразмерной длины скольжения  $l/d_d^{out}$  на стенке внешнего капилляра при двух значениях отношений расходов  $Q_c/Q_d = 30$  и 75. Вязкости дисперсной и сплошной ньютоновских сред равны 7.2  $10^{-4}$  Па·с и 0.35 Па·с, соответственно. Как видно, при  $l/d_d^{out} < 0.01$  скольжения практически не оказывает влияния на размер капель. Однако, когда длина скольжения становится соизмеримой с диаметром внешнего капилляра, размер капель начинает возростать. Данный эффект обусловлен снижением действующих на каплю сдвиговых напряжений за счет усиления скольжения обтекающей среды. Таким образом, скольжение сплошной фазы по внутренней поверхности внешнего капилляра приводит к эффекту, похожему на тот, который обсуждался в предыдущем разделе на примере псевдопстичной жидкости.



**Рис. 4.7.** Зависимости относительного размера капель  $D/d_d^{out}$  от безразмерной длины скольжения  $l/d_d^{out}$  на поверхности внешнего капилляра при  $Q_c/Q_d = 30$  и 75.

### Выводы по Главе 4

- Построены диаграммы динамических морфологических состояний двухкомпонентной ньютоновской жидкости в коаксиальных капиллярах в координатах Ca<sub>c</sub> - η<sub>d</sub>/η<sub>c</sub> при разных скоростях течения U<sub>d</sub> дисперсной фазы. Полученные диаграммы позволяют однозначно определить взаимосвязь различных динамических состояний (капельного режима, струйного режима т.д.) с условиями течения и вязкостными характеристиками компонентов среды.
- Капли, формирующихся при обтекании полимерной псевдопластичной средой в коаксиальных капиллярах, существенно больше капель, сформированных в ньютоновской жидкости при тех же гидродинамических условиях течения. В случае псевдопластичной сплошной среды размер капель практически не зависит от отношения расходов жидкостей.
- Скольжение сплошной среды на поверхности внешнего капилляра приводит к увеличению размера капель по сравнению с каплями, формирующимися при граничных условиях прилипания.

### Глава 5. Деформационное поведение композитной капли в узком канале при течении простого сдвига

Применение одноядерных композитных микрокапель в качестве микрореакторов и средств доставки лекарственных препаратов требует исследования их деформационного поведения и условий распада в процессе течения в микроканалах, размеры поперечного сечения которых соизмеримы с внешним диаметром капель. Такое соотношение размеров называют условием конфайнмента. Последнее влечет за собой значительное влияние со стороны стенок канала. Гидродинамическое поведение композитной капли в неограниченном канале достаточно хорошо изучено (см. Главу 1), чего нельзя сказать о ее поведении в условиях конфайнмента. В связи с этим, в настоящей главе рассмотрены две задачи:

1) Исследование стационарного деформационного и ориентационного поведения двухмерной композитной капли при течении простого сдвига для разных относительных размеров ядра, капиллярных чисел и отношений внешнего диаметра капли к ширине канала (параметр конфайнмента).

2) Исследование влияния конфайнмента на закономерности деформации и распада трехмерной композитной капли с высоковязкой оболочкой.

Результатам настоящей главы изложены в следующих публикациях и тезисах конференций [271, 274, 270, 277, 278, 281, 283, 285-287].

# 5.1. Сравнение численных расчетов с известными экспериментальными и теоретическими результатами

В настоящей главе используются два разных подхода к численному решению поставленных задач. В первой части главы гидродинамическое поведение двухмерной (2D) композитной капли моделируется с использованием метода конечных разностей (см. п. 2.3.1) и функции уровня (см. п. 2.2.1). Во второй части численное моделирование трехмерной (3D) капли осуществляется при помощи методов конечных объемов (см. п. 2.3.2). и объемов жидкости (см. п. 2.2.2). Для доказательства адекватности и достоверности расчетов было проведено сравнение с некоторыми известными экспериментальными и расчетными результатами.

На рис. 5.1 приведены экспериментальные [231] (символы) и расчетные (сплошные кривые) зависимости стационарной тейлоровской деформации  $D_{\rm T} = (A+B)/(A-B)$  однородной капли радиуса *a* (см. рис. 1.23(а)) от параметра конфайнмента n = 2a/h при течении простого сдвига в канале высоты *h* для разных значений капиллярного числа Ca = 0.1, 0.2 и 0.3. Расчеты проводились для 2D капли. При этом в обоих случаях отношение вязкости капли и окружающей среды принималось равным единице,  $m = \eta_2/\eta_1 = 1$ . Отметим, что во всех рассмот-



**Рис. 5.1.** Зависимости стационарной деформации однородной капли от параметра конфайнмента *n* для однородной капли при m = 1, Re = 0.05 и разных капиллярных числах: Ca = 0.1, 0.2, 0.3. Сплошные кривые соответствуют нашим расчетам, символы – экспериментальным данным [231].

ренных случаях капиллярное число определялось, как  $Ca = \eta_1 a\dot{\gamma} / \gamma$ , где a – внешний радиус, a  $\gamma$  – коэффициент межфазного натяжения на границе раздела капли и окружающей среды,  $\dot{\gamma}$ – скорость сдвига. Видно, что экспериментальные и численные результаты качественно согласуются друг с другом: с увеличением параметра конфайнмента n и капиллярного числа Caдеформация капли возрастает. При небольших значениях Ca достигается практически полное совпадение наших расчетов и экспериментальных данных. С другой стороны, с ростом капиллярного числа имеет место некоторое расхождение между расчётом и экспериментом при n < 0.5, что связано с двухмерной постановкой задачи.

На рис. 5.2 представлено сравнение расчетных форм двухмерной (наши расчеты) и трехмерной (результаты работы [235]) композитных капель разного состава при течении сдвига с заданным капиллярным числом. Соответствующие результаты получены для неограниченного пространства ( $n \ll 1$ ) при  $m_{21} = m_{31} = 1$ , Re = 0.05, Ca = 0.4 и отношении коэффициентов межфазных натяжений  $\chi = 1$ . Видно, что при рассмотренных отношениях k радиусов ядра и оболочки значениях k расчетные формы 2D и 3D капель качественно согласуются друг с другом.

Для проверки численной методики расчета, применяемой для трехмерной капли, выполнено сравнение зависимости относительного удлинения однородной капли *A/a* (см. рис. 1.23 (а)) от времени с экспериментальными [268] и численными [269] результатами (рис. 5.3). Видно, что имеет место хорошее соответствие наших расчетов (кривая 1) с полученными ранее данными (кривая 2 – расчет, кривая 3 – эксперимент).

Результаты сравнения позволяют сделать вывод об адекватности применяемой численной методики расчета 2D и 3D капель.



**Рис. 5.2.** Стационарные формы межфазных границ раздела 2*D* (наши расчеты) и 3D (результаты работы [235]) композитных капель при разных значениях *k* и *Ca* = 0.4,  $m_{21} = m_{31} = 1$ ,  $\chi = 1$  в широком канале.



**Рис. 5.3.** Зависимости относительного удлинения капли от времени при Ca = 0.4, n = 0.68, m = 1: наш расчет (1), расчет VOF–CSF–PLIC алгоритм [269] (2), эксперимент [268] (3).

## 5.2. Стационарная деформация двухмерной композитной капли в узком канале при течении простого сдвига

Исследовали деформационное поведение 2D композитной капли при течении простого сдвига, которое задавалось плоско-параллельным движением стенок канала в противоположные стороны с одинаковой скоростью U (рис. 5.4). Соответствующая базовая скорость сдвига равна  $\dot{\gamma} = 2U / h$ , где h – расстояние между стенками. В этой части исследования разрушение капли не рассматривается, а капиллярные числа подбирались таким образом, чтобы капля достигала стационарного деформированного состояния. В свободном состоянии ради-

103



Рис. 5.4. Расчетная область, содержащая композитную каплю.

ус ядра и внешней оболочки композитной капли соответствуют *b* и *a*. Каплю помещали в центр расчетной ячейки, что позволило избежать ее поступательного движения. Боковые грани расчетной ячейки отстояли достаточно далеко от центра капли, чтобы можно было пренебречь возмущениями течения, вызванных заданными на них периодическими граничными условиями. Зазор между стенками заполнен однородной ньютоновской жидкостью 1 с вязкостью  $\eta_1$ , а вязкости оболочки 2 и ядра 3 обозначены  $\eta_2$  и  $\eta_3$ , соответственно. Плотности компонентов среды приняты равными друг другу  $\rho_1 = \rho_2 = \rho_3$ . Коэффициент межфазного натяжения на границе раздела непрерывной среды и оболочки капли равен  $\gamma_{12}$ , а между ядром и оболочкой –  $\gamma_{23}$ . Результаты моделирования выражались в виде безразмерных характеристик:  $Ca = \eta_1 \dot{\gamma} a / \gamma_{12}$ , n = 2a/h (параметр конфайнмента), k = b/a (состав капли),  $m_i = \eta_i / \eta_1$  (отношение вязкостей *i*-того компонента и окружающей среды),  $\chi = \gamma_{23} / \gamma_{12}$  (отношение межфазных натяжений).

#### 5.2.1. Влияние конфайнмента

Также как и в случае с однородной каплей, условия конфайнмента приводит к существенному влиянию стенок канала на деформационное поведение композитной капли. Это показано на рис. 5.5, на котором представлены результаты расчетов стационарной тейлоровской деформации  $D_{\rm T}$  (рис. 5.5(а)) и угла наклона  $\Omega$  бо́льшей оси композитной капли (рис. 5.5(б)) в зависимости от параметра *n* при разных отношениях *k* радиусов ядра и оболочки. Расчеты выполнены для среды с одинаковой вязкостью входящих в нее компонентов и равных коэффициентов межфазного натяжения,  $m_{12} = m_{23} = \chi = 1$ . Число Рейнольдса и капиллярное число задавали равными Re = 0.05 и Ca = 0.2, соответственно. Видно, что с увеличением параметра конфайнмента *n* деформация композитной капли возрастает при любых значениях *k* и качественно согласуется с поведением однородной капли. Рост деформации обусловлен

104



**Рис. 5.5.** (а) Зависимости стационарных тейлоровской деформации  $D_{\rm T}$  и (б) угла ориентации  $\Omega$  однородной и композитных капель от параметра конфайнмента *n* для разных отношений радиусов ядра и оболочки: k = 0 (1, однородная капля), 0.4 (2), 0.6 (3) и 0.8 (4) при Ca = 0.2, Re = 0.05,  $m_{21} = m_{31} = 1$ ,  $\chi = 1$ .

увеличением сдвиговых напряжений, действующих со стороны стенок на внешний слой капли [269].

Что касается зависимости стационарного угла наклона  $\Omega$  композитной капли от *n*, то при заданном капиллярном числе, как и в случае однородной капли, она является немонотонной: при малых *n* угол ориентации возрастает по сравнению с аналогичной каплей в бесконечной среде, а при достаточно больших *n* – падает (см. рис. 5.5(б)). При этом с ростом *k* угол наклона композитных капель уменьшается при всех значениях *n*, а его максимальное значение сдвигается в сторону бо́льших значений параметра конфайнмента *n*.



**Рис. 5.6.** Векторное поле скоростей течения в процессе деформирования композитной капли при течении простого сдвига ( $m_{12} = m_{23} = \chi = 1$ , k = 0.6, n = 0.8 и Ca = 0.4).

Для объяснения причины такого немонотонного поведения рассмотрим поле скорости в окрестности деформированной капли. С увеличением n деформация капли возрастает (см. рис. 5.5(а)). При этом в областях наиболее удаленных от центра капли кривизна межфазной поверхности резко увеличивается, из-за чего слева и справа от капли формируются области пониженного давления (рис. 5.9). Это стимулирует образование локальных потоков слева, направленных сверху вниз, а справа – снизу вверх (рис. 5.6). Такие потоки способствуют увеличению угла  $\Omega$  ориентации капли. Дальнейшее сужение канала приводит к одновременному увеличению растяжения капли и уменьшению угла  $\Omega$ . Последнее связано с тем, что в узком канале сильно вытянутая капля может ориентироваться предпочтительно вдоль канала. Таким образом, при небольших значениях *n* ключевую роль играют локальные боковые потоки, обусловленные увеличением кривизны кончиков капли, под действием которых угол ее наклона возрастает. Напротив, при значениях *n*, близких к единице, угол наклона капли уменьшается за счет геометрических ограничений.

#### 5.2.2. Влияние состава капли. Подпирающий эффект

На рис. 5.7 приведены зависимости стационарных тейлоровской деформации  $D_{\rm T}$  и угла наклона композитной капли  $\Omega$  от отношения радиусов ядра и оболочки k при разных значениях параметра конфайнмента *n*. Как и в предыдущем разделе, расчеты выполнены при одинаковых вязкостях и межфазных натяжениях между компонентами среды при Ca = 0.2 и Re = 0.05. Видно, что при всех значениях *n* деформационные кривые проходят через максимум. Наличие максимума деформации обусловлено т.н. подпирающим эффектом со стороны ядра, который проявляется, когда внешняя граница композитной капли достаточно близко подходит к ее внутренней границе. В этом случае ядро начинает препятствовать деформации оболочки капли. Данный эффект демонстрирует рис. 5.8, на котором приведены рассчитанные стационарные формы композитных капель разного состава k при фиксированном значении параметра конфайнмента n = 0.4. Видно, что при k > 0.5 ядро препятствует росту деформации капли (рис. 5.7(а)). При этом до начала действия подпирающего эффекта, ядро, напротив, способствует увеличению деформации капли. Природу данного явления можно понять, если сравнить поля давлений в однородной и композитной капле с небольшим ядром (рис. 5.9). Видно, что вблизи границы раздела между ядром и оболочкой (выделены на рис. 5.9(б)) в средней части оболочки композитной капли формируются зоны пониженного давления по сравнению с аналогичной однородной каплей (рис. 5.9(а)). Последнее способствует движению боковых границ капли к ядру, что, в конечном счете, приводит к увеличению ее полной деформации. С ростом k, угол ориентации капли уменьшается для всех рассмотренных значений *n* (рис. 5.7(б)).



**Рис. 5.7.** Зависимости (а) стационарных деформации и (б) углов ориентации композитной капли от отношения радиусов *k* при различных параметрах конфайнмента n = 0.2 (1), 0.4 (2), 0.6 (3), и 0.8 (4) (*Ca* = 0.2, *Re* = 0.05,  $m_{21} = m_{31} = 1$ ,  $\chi = 1$ ).





Рис. 5.8. Стационарные формы межфазных гра- Рис. 5.9. Распределение давлений в (а) ниц композитной капли для разных значений k однородной и (б) композитной капле при при n = 0.4 (*Ca* = 0.2, *Re* = 0.05, *m*<sub>21</sub> = *m*<sub>31</sub> = 1, *k* = 0.2 и n = 0.6 (*Ca* = 0.2, *Re* = 0.05,  $\chi = 1$ ).

 $m_{21}=m_{31}=1,\,\chi=1).$ 



**Рис. 5.10.** Зависимости стационарной деформации от отношения радиусов k при n = 0.2, 0.4,0.6, 0.8 для Ca=0.1 (а) и 0.4 (б); Зависимости стационарной деформации от k при различных *Са* для n = 0.6 (в) ( $m_{21} = m_{31} = 1$ ,  $\chi = 1$ ).

#### 5.2.3. Влияние капиллярного числа

Капиллярное число *Ca*, как наиболее существенная характеристика течения, оказывает значительное влияние на деформационное поведение капли. Для исследования этого эффекта был выполнен ряд расчетов при различных значениях *Ca*, *k* и *n*. Выяснилось, что при варьировании капиллярного числа качественный характер зависимостей деформации от *k* при разных значениях параметра конфайнмента *n* не меняется (см. рис. 5.7(а) и рис. 5.10(а, б)): полученные зависимости  $D_{\rm T}(k)$  являются немонотонными при любых *n*, что обусловлено подпирающим эффектом ядра. На рис. 5.10 представлены зависимости стационарной тейлоровской деформации от *k* при *Ca* = 0.1 (рис. 5.10(а)) и 0.4 (рис. 5.10(б)). Видно, что чем выше капиллярное число, тем бо́льшие деформации достигаются в ходе течения. Отметим, что при увеличении капиллярного числа значение  $k_{\rm max}$ , соответствующее максимуму тейлоровской деформации капли, при котором начинает оказывать влияние подпирающий эффект, уменьшается (рис. 5.10(в)). Такое смещение максимума деформации объясняется тем, что при достаточно больших значениях *Ca* капля сильно деформируется, что приводит к тому, что подпирающий эффект начинает проявляться при малых размерах ядра.

#### 5.2.4. Влияние материальных характеристик среды

В предыдущих частях рассматривалась композитная капля с равными вязкостями компонентов и коэффициентами межфазных натяжений. Проанализируем роль отношений вязкости и межфазных натяжений. Известно, что при сдвиговом течении в неограниченном пространстве относительная вязкость ядра слабо сказывается на деформационном поведении композитной капли [235]. Поэтому в этой части мы ограничились вариациями относительной вязкости оболочки  $m_{21}$  при равных вязкостях ядра и окружающей среды. На рис. 5.11(а) представлены зависимости стационарной тейлоровской деформации  $D_{\rm T}$  от *n* при разных отношениях вязкости  $m_{21}$ , рассчитанные при Ca = 0.2, Re = 0.05, k = 0.6 и  $\chi = 1$ . Видно, что увеличение параметра конфайнмента *n* приводит к росту деформации композитной капли при всех значениях относительной вязкости оболочки  $m_{21}$ . Рост вязкости оболочки способствует уменьшению тейлоровской деформация  $D_{\rm T}$  за счет увеличения вязких напряжений внутри капли.

Результаты исследования влияния относительной вязкости оболочки  $m_{21}$  на угол ориентации  $\Omega$  композитной капли приведены на рис. 5.11(б). Видно, что при вязкости внешнего слоя меньшей или равной вязкости матрицы ( $m_{21} \le 1$ ) зависимости угла ориентации от *n* проходят через максимум, как это наблюдалось при  $m_{21} = 1$  (ср. рис. 5.5(б)). Однако, если вязкость оболочки превышает вязкость окружающей среды ( $m_{21} > 1$ ), то характер зависимости от параметра конфайнмента *n* качественно меняется: угол ориентации композитной капли


109

**Рис. 5.11.** Зависимости стационарной деформации (а) и угла ориентации (б) композитной капли от параметра конфайнмента *n* при разных значениях относительной вязкости оболочки  $m_{21} = 0.1$  (1), 1 (2), 3 (3), 5 (4) для Ca = 0.2, Re = 0.05, k = 0.6, и  $\chi = 1$ .

монотонно возрастает во всем диапазоне *n*. Это можно объяснить относительным снижением вязких напряжений сплошной среды, что приводит к уменьшению воздействия на каплю со стороны стенок канала.

На рис. 5.12 представлены зависимости стационарной тейлоровской деформации  $D_{\rm T}$  и угла ориентации  $\Omega$  от отношения межфазных натяжений  $\chi = \gamma_{23}/\gamma_{12}$  на внутренней и внешней границах композитной капли. Расчеты выполнены для двух значений отношений вязкости  $m_{21} = 1$  (кривая I) и  $m_{21} = 0.1$  (кривая II) при фиксированных геометрических параметрах n = 0.6, k = 0.6 и Ca = 0.2 и Re = 0.05. Видно, что с увеличением параметра  $\chi$  стационарная деформация растет (рис. 5.12(а)), а угол наклона большей оси капли падает (рис. 5.12(б)). При этом каждому из значений  $\chi$  соответствует своя стационарная форма капли, которые приведены на рис. 5.12(в) для  $m_{21} = 1$ . При  $\chi \ge 4$  внешняя граница слоя практически соприкасается с ядром капли. Подпирание со стороны ядра приводит к трансформации остальной части слоя в симметрично расположенные выступы (т.н. «уши»). Такой форме композитной капли отвечают участки зависимостей  $D_{\rm T}(\chi)$  и  $\Omega(\chi)$ , которые отмечены пунктиром на рис. 5.12. Рис. 5.12(а,6) показывают, что при менее вязкой оболочке ( $m_{21} = 0.1$ , кривая II) эффект подпирания проявляется при меньшем отношении межфазных натяжений  $\chi \sim 2$ , что объясняется большей деформацией капли при малой вязкости оболочки (см. рис. 5.11(а).

Отметим, что используемый в данном разделе части метод функции уровня для построения текущего положения межфазных границ не позволяет моделировать процессы разрыва границы внешнего слоя, в результате которого ядро капли соприкасается с дисперсионной средой. По этой причине приведенные на рис. 5.12(в) формы 5 и 6 композитной капли, нельзя принимать за окончательное решение задачи, поскольку в случае разрыва тонкого слоя оболочки наблюдаемые выступы могут трансформироваться в иную форму, которая будет зависеть от условий смачивания жидкостей ядра и матрицы.



**Рис. 5.12.** Зависимости стационарных деформации и (а) угла наклона (б) композитной капли от отношения межфазных натяжений  $\chi$  для двух отношений вязкости  $m_{21} = 1$ (I) и 0.1 (II); (в) стационарные формы композитных капель, соответствующие пронумерованным точкам для  $m_{21} = 1$ .

# 5.3. Деформация и разрушение трехмерной композитной капли с высоковязкой оболочкой в узком канале при течении простого сдвига

В данном разделе методами численного моделирования исследовали деформационное поведение и условия распада 3D композитной капли в узком канале. Здесь мы ограничились рассмотрением высоковязкой оболочки  $m_{21} = \eta_2/\eta_1 = 5$  при фиксированном отношении внутреннего и внешнего радиусов капли k = b/a. Такое же отношение вязкостей принималось и для 3D однородной капли  $m = m_{21}$ . Параметр конфайнмента *n* варьировали в диапазоне от 0.3 до 0.8, а капиллярное число Ca – от 0.4 до 0.8. Межфазные натяжения  $\gamma_{12}$ ,  $\gamma_{23}$  и  $\gamma_{13}$  между жидкими компонентами среды выбраны таким образом, чтобы их значения соответствовали условию термодинамического равновесия композитной капли, показанной на рис. 5.4. Для этого коэффициенты растекания  $S_i = \gamma_{jk} - (\gamma_{ij} - \gamma_{ik})$  должны удовлетворять следующим неравенствам:  $S_1 < 0$ ,  $S_2 > 0$  и  $S_3 < 0$ , которые выполняются при условии  $\gamma_{13} > \gamma_{23}$  [233] (см. п. 1.7.2 Главы 1).

На рис. 5.13(а) представлены расчетные кривые изменения относительного удлинения однородной и композитной капель во времени при течении простого сдвига в достаточно широком канале (n = 0.4) при двух значениях капиллярных чисел Ca = 0.4 и 0.6. В качестве



**Рис. 5.13.** (а) Эволюция относительного удлинения однородной (сплошные линии) и композитной (пунктирные линии) капель при течении сдвига в канале с n = 0.4 при Ca = 0.4 (*i*, *ii*) и 0.6 (*iii*, *iv*), соответственно. (б) Рассчитанные формы однородной и композитной капель, соответствующие стационарным удлинениям.

единицы времени выбрана обратная скорость сдвига  $\dot{\gamma}^{-1}$ . На рис. 5.13(б) приведены соответствующие стационарные формы однородной (*i*, *iii*) и композитной (*ii*, *iv*) капель. Видно, что в указанных условиях однородная и композитная капля не разрушаются и достигают стационарных деформаций. При этом наличие маловязкого ядра приводит к многократным осцилляциям в процессе удлинения композитной капли. Растяжение однородных капель, в свою очередь, проходит через выраженный максимум и быстро выходит на стационарное значение. Отметим, что такие осцилляции деформации наблюдались экспериментально в работе [231] для сильно стесненной однородной капли (при n = 1). Сравнение показывает, что при Ca = 0.4 удлинение композитной капли меньше, чем у однородной. Это обусловлено подпирающим эффектом со стороны ядра (ср. рис. 5.8). Увеличение капиллярного числа Ca до 0.6 приводит к заметной деформации и продольной ориентации маловязкого ядра. Последнее компенсирует эффект подпирания и выравнивает деформации однородной и композитной капли.

На рис. 5.14(а) представлены зависимости удлинения однородной и композитной капель от времени для тех же значений капиллярных чисел Ca = 0.4 и 0.6, но в более узком канале, n = 0.6. Видно, что при Ca = 0.4 удлинения однородной и композитной капель также достигают своих стационарных значений. При этом в процессе деформирования композитная капля, как в более широком канале и при n = 0.4, испытывает осцилляции, а ее стационарное удлинение принимает меньшие значения по сравнению с однородной каплей за счет эффекта подпирания со стороны ядра (рис. 5.14(а), кривая *ii*). При Ca = 0.6 однородная капля распадается, тогда как композитная капля сохраняет целостность, достигая стационарного удлинения (рис. 5.14(а), кривые *iii* и *iv*). Соответствующие морфологии капель представлены



**Рис. 5.14.** (а) Эволюция относительного удлинения однородной (сплошные линии) и композитной (пунктирные линии) капель при течении сдвига в канале с n = 0.6 при Ca = 0.4 (*i*, *ii*) и 0.6 (*iii*, *iv*), соответственно. (б) Рассчитанные формы однородной и композитной капель, соответствующие их стационарным и предельному удлинениям.

на рис. 5.14(б) (*i*, *ii*, *iv* – стационарная деформация, *iii*-предельная деформация перед распадом). Распад высоковязкой однородной капли при n = 0.6 и Ca = 0.6 согласуется с ранее полученным результатом [232], что подчеркивает достоверность полученных нами решений. Разрушение однородной капли сопровождается резким увеличением скорости деформирования (рис. 5.14(a), кривая *iii*), что связано с появлением и развитием участков сужений (шеек).

Дальнейшее сужение канала до n = 0.8 приводит к распаду однородной капли при меньшем значении капиллярного числа Ca = 0.4 (рис. 5.15(б), *i*), тогда как в этом случае композитная капля не разрушается и достигает стационарного состояния (рис. 5.15(б), *ii*). В то же время при Ca = 0.6 разрушаются обе капли (рис. 5.15(б), *iii* and *iv*). Любопытно отметить, что распад композитной капли заданного состава происходит путем отделения крайних частей оболочки, тогда как маловязкое ядро локализуется в оставшейся средней части капли, распадаясь в ней на три неравные части. При этом скорость деформирования композитной превышает соответствующую скорость однородной капли (рис. 5.15(а), кривые *iii* and *iv*).



**Рис. 5.15.** (а) Эволюция относительного удлинения однородной (сплошные линии) и композитной (пунктирные линии) капель при течении сдвига в канале с n = 0.8 при Ca = 0.4 (*i*, *ii*) и 0.6 (*iii*, *iv*), соответственно. (б) Рассчитанные формы однородной и композитной капель, соответствующие их стационарному и предельным удлинениям.

Рис. 5.16 обобщает полученные результаты в виде зависимостей удлинения однородной и композитной капель от параметра конфайнмента n при разных значениях капиллярных чисел. Предельные деформации перед разрывом капель обозначены звездочкой. Видно, что при малых значениях n деформация однородной и композитной капель мала и практически не зависит от капиллярного числа (ср. рис. 5.13). Однако, увеличение n (сужение канала) приводит к резкому росту относительного удлинения обоих капель, которое заканчивается их распадом (ср. рис. 5.14, 5.15). Сравнение полученных результатов для однородной и композитной капель показывает, что при прочих равных условиях, разрушение композитной капли. Таким образом, можно сделать вывод о том что, наличие маловязкого ядра приводит к стабилизации композитной капли.



**Рис. 5.16.** Зависимости стационарных и предельных деформаций однородной (сплошные линии) и композитной капель (пунктирные линии) от параметра конфайнмента n при разных капиллярных числах Ca = 0.4 (1), 0.6 (2) и 0.8 (3).

#### Выводы по Главе 5

- Увеличение параметра конфайнмента приводит к росту стационарной деформации композитной капли при произвольных значениях капиллярного числа, составе капли, относительных вязкостей и коэффициентов межфазных натяжений.
- 2. При увеличении отношения радиусов ядра и оболочки имеет место немонотонное изменение деформации композитной капли, что обусловлено подпирающим эффектом со стороны ядра. При этом увеличение капиллярного числа сопровождается сдвигом максимальной деформации в сторону меньших значений отношения радиусов ядра и оболочки.
- 3. Рост относительной вязкости оболочки способствует снижению полной деформации капли при любых значениях параметра конфайнмента. Напротив, при увеличении относи-

тельного межфазного натяжения между ядром и оболочкой наблюдается рост стационарной деформации.

- 4. Сужение микроканала приводит к немонотонному изменению стационарного угла наклона композитной капли. Увеличение отношения радиусов ядра и оболочки способствует уменьшению угла ориентации капли, а его максимальное значение смещается в сторону бо́льших значений параметра конфайнмента. Увеличение относительного межфазного натяжения между ядром и оболочкой влечет за собой снижение угла наклона композитной капли.
- 5. При увеличении параметра конфайнмента наблюдается снижение критического капиллярного числа распада композитной капли с высоковязкой оболочкой. При этом распад высоковязкой композитной капли происходит при бо́льших значениях капиллярного числа, чем у высоковязкой однородной капли.

#### Заключение

В диссертационной работе методами численного моделирования исследованы актуальные вопросы микрогидродинамики ньютоновских и псевдопластичных полимерных сред в микроскопических каналах с супергидрофобным покрытием, в системе соосных капилляров и деформационного поведения композитных капель в узких каналах.

Основные выводы диссертации состоят в следующем:

- Сдвиговое течение псевдопластичной полимерной жидкости в микроканале с анизотропным супергидрофобным покрытием характеризуется наличием кажущегося скольжения, которое возникает вследствие возмущений локальной вязкости вблизи неоднородной стенки. Продольная и поперечная длины кажущегося скольжения псевдопластичной среды значительно превышают соответствующие характеристики ньютоновской жидкости.
- 2. Длина кажущегося скольжения псевдопластичной полимерной среды является немонотонной функцией скорости сдвига. Рост скорости изменения вязкости псевдопластичной жидкости приводит к значительному увеличению длины кажущегося скольжения.
- 3. Наклонная ориентация супергидрофобной страйп-текстуры относительно оси микроканала стимулирует образование геликоидального течения ньютоновских и псевдопластичных полимерных жидкостей. Период спиральных линий тока псевдопластичных жидкостей больше, чем у ньютоновских, что приводит к существенному снижению эффективности перемешивания полимерных сред.
- 4. Построенные диаграммы морфологических состояний двухкомпонентной ньютоновской среды при течении в коаксиальных капиллярах устанавливают однозначную взаимосвязь капельных и струйных режимов течения с относительной вязкостью компонентов среды, капиллярным числом обтекающей жидкости и скоростью дисперсной фазы. Размер капель, образующихся при обтекании псевдопластичной полимерной средой, существенно больше капель, сформированных в ньютоновской жидкости.
- 5. Стационарная деформация композитной капли при сдвиговом течении в микроканале немонотонно зависит от отношения радиусов ядра и оболочки. Наличие жидкого ядра приводит к усилению стабилизации композитной капли с высоковязкой оболочкой. Ее распад в узком канале протекает при больших значениях критического капиллярного числа и параметра конфайнмента, чем у высоковязкой однородной капли.

Полученные в диссертации результаты имеют значительный потенциал для многочисленных практических приложений, включая снижение гидродинамического сопротивления микроканалов, смешивание полимерных жидкостей с различными реологическими характеристиками, производство монодисперсных однородных и композитных микрокапель с заданными размерами и деформационными характеристиками. В то же время, используемые в диссертации методы численного моделирования могут быть применены для решения задач об особенностях течения и перемешивания вязкоупругих полимерных сред с широким спектром времен релаксации в микроканалах с неоднородными граничными условиями скольжения и прилипания. В рамках данной тематики следует выделить перспективные исследования закономерностей формирования в тройных коаксиальных капиллярах композитных капель и Янус-частиц на основе полимерных жидкостей с различными реологическими свойствами. Среди указанных задач важное место занимают вопросы о влиянии поверхностноактивных веществ на динамику формирования и деформационного поведения однородных капель и композитных капель на основе неньютоновских полимерных жидкостей.

## Список обозначений

а – радиус невозмущенной капли;

A – максимальное расстояние от центра до внешней границы деформированной капли (большая полуось);

*В* – минимальное расстояние от центра капли до внешней границы деформированной капли (малая полуось);

*b* – радиус невозмущенного ядра композитной капли;

Са – капиллярное число;

Са<sub>d</sub>, *Са*<sub>c</sub> – капиллярные числа дисперсной и дисперсионной жидкостей в соосных капиллярах;

*D* – диаметр капель, формируемых в коаксиальных капиллярах;

*D*<sub>T</sub> – тейлоровская деформация капли;

 $\mathbf{D} = {\mathbf{D}_{ii}} -$ тензор скоростей деформации;

*d* – диаметр капилляра;

*d*<sub>*c*</sub> – диаметр внешнего капилляра;

 $d_{\rm d}^{\rm out}$  и  $d_{\rm d}^{\rm in}$  – диаметры внутреннего капилляра с учетом и без учета толщины стенок, соотвественно;

е – глубина бороздок супергидрофобной страйп-текстуры;

**F** – вектор объемной силы;

*f*-показатель степени в модели Каро-Ясуда;

g – показатель в модели Каро-Ясуда;

*h* – высота канала;

*h*<sub>g</sub> – высота газовой подушки;

*L* – период супергидрофобной страйп-текстуры;

*L*<sub>0</sub> – длина канала;

*L*<sub>с</sub> и *L*<sub>d</sub> – длины внешнего и внутреннего коаксиальных капилляров;

*l* – локальная длина скольжения;

**l**<sub>eff</sub> – тензор эффективной длины скольжения;

*l*<sub>арр</sub> –длина кажущегося скольжения;

 $l_{\text{арр.}\parallel}^{P}$ ,  $l_{\text{арр.}\perp}^{P}$  – длины кажущегося скольжения при течении псевдопластичной жидкости вдоль и поперек супергидрофобной страйп-текстуры;

 $l_{\rm eff,\parallel}^N$ ,  $l_{\rm eff,\perp}^N$  – длины эффективного скольжения при течении ньютоновской жидкости вдоль и поперек супергидрофобной страйп-текстуры;

- $\mathbf{M}_{\Theta}$  матрица поворота на угол  $\Theta$ ;
- *m*<sub>*ij*</sub> отношение вязкостей *i*-ой и j-ой фаз;
- *n* параметр конфайнмента;
- **n**<sub>s</sub> нормаль к поверхности;
- $\mathbf{n}_{f}$  нормаль к границе контрольного объема (метод конечных объемов)
- *p* давление в жидкости;
- *Q* объемный расход жидкости;

 $Q_{\rm d}, Q_{\rm c}$  – объемные расходы жидкостей во внутреннем и во внешнем капиллярах; Re – число Рейнольдса;

*Re*<sub>d</sub> – число Рейнольдса дисперсной жидкости в коаксиальных капиллярах;

- *r* шероховатость поверхности;
- k = b/a отношение радиусов ядра и оболочки композитной капли (состав капли);
- S площадь;
- *t* время;
- t<sub>s</sub> касательный вектор к границе раздела;

*U* – средняя скорость течения жидкости в канале;

U<sub>c</sub> – средняя скорость течения обтекающей жидкости в коаксиальных капиллярах;

U<sub>d</sub> – средняя скорость течения дисперсной жидкости жидкости в коаксиальных капиллярах;

 $\mathbf{u} = \{u_i\}$  – вектор скорости жидкости;

 $\mathbf{u}|_{s} = \{u_{i}|_{s}\}$  – вектор скорость жидкости у твердой поверхности;

**u**' – возмущения скорости;

*ū* – осредненная горизонтальная составляющая скорости над СГФ стенкой;

 $\overline{u}_{\rm slip}$  – осредненная горизонтальная составляющая скорости над участками жидкостьгаз;

 $\overline{u}_{\text{stick}}$  – осредненная горизонтальная составляющая скорости над участками жидкостьтвердая стенка;

V-объем;

- *W* ширина канала;
- We число Вебера;

We<sub>d</sub> – число Вебера дисперсной жидкости в коаксиальных капиллярах;

 $\alpha$  – индикаторная функция (метод VOF);

 $\beta_{\text{slip}}$ ,  $\beta_{\text{stick}}$  – углы отклонения линии тока от оси канала на участками жидкость-газ и жидкость твердая стенка, соответственно;

eta – средний угол отклонения линии тока от оси канала над супергидрофобной страйп-

текстурой;

*у* – межфазное натяжение;

 $\gamma_{sg}$ ,  $\gamma_{sf}$ , — межфазное натяжение на границах твердая стенка-газ, твердая стенкажидкость;

*у* <sub>*ij*</sub> – межфазное натяжение между *i*-ой и *j*-ой фазами;

 $\dot{\gamma}$  скорость сдвига;

 $\dot{\gamma}_{stick}$  – скорость сдвига при граничных условиях «прилипания»;

 $\dot{\gamma}_{slip}$  – скорость сдвига при граничных условиях скольжения;

 $\dot{\gamma}_{\varepsilon}$  – скорость сдвига в  $\varepsilon$ -слое;

 $\dot{\gamma}_c$  – скорость сдвига в газовом слое;

 $\dot{\gamma}_{\text{unit}}$  – единичная скорость сдвига;

 $\dot{\gamma}_{\text{inflect}}$  – единичная скорость сдвига;

*є* – толщина пристенного *є*-слоя малой вязкости;

 $\eta$  – динамическая вязкость;

 $\eta_0$  – динамическая вязкость при нулевой скорости сдвига в модели Каро-Ясуда;

 $\eta_{\infty}$  – динамическая вязкость при бесконечной скорости сдвига в модели Каро-Ясуда;

η<sub>d</sub> – динамическая вязкость дисперсной жидкости во внутреннем капилляре;

*η*<sub>d</sub> – динамическая вязкость обтекающей жидкости во внешнем капилляре;

 $\eta_i$  – динамическая вязкость *i*-ой фазы;

 $\eta_{\varepsilon}$  – динамическая вязкость пристенного  $\varepsilon$ -слоя жидкости;

 $\eta_{g}$  – динамическая вязкость газовой подушки;

 $\overline{\eta}_{slip}$  – осредненная динамическая вязкость над участками жидкость - газ;

 $\overline{\eta}_{ ext{stick}}$  – осредненная динамическая вязкость над участками жидкость - твердая стенка;

*и* – номер компоненты многофазной среды;

 $\Phi$  – степень смешивания жидкостей;

- $\phi$   $\phi$ ункция уровня (Level set method);
- φ поверхностная доля границ раздела жидкость-газ супергидрофобной поверхности;
   φ<sub>s</sub> доля участков жидкость твердая стенка супергидрофобного покрытия;
- $\Theta$  угол наклона СГ $\Phi$  страйп-текстуры к оси канала;
- $\theta$  краевой угол;
  - *θ*<sub>Y</sub> краевой угол Юнга гладкой поверхности;
  - $\theta_{\rm W}$  краевой угол на текстурированной поверхности в модели Венцеля;
  - $\theta_{\rm CB}$  краевой угол на текстурированной поверхности в модели Касси-Бакстера;
  - $\theta_{\rm cr}-$ критический краевой угол;
- λ-коэффициент в модели Каро-Ясуда;
- ζ коэффициент трения жидкости на твердой поверхности в граничных условиях Навье;
- $\rho$  плотность;
  - $\rho_i$  плотность *i*-ой фазы;
- $\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_{ij}\}$  тензор напряжений;
  - σ-сдвиговое напряжение;
- Ω угол ориентации капли относительно направления течения;

### Список литературы

- Whitesides G. M. The origins and the future of microfluidics // Nature. 2006. Vol. 442.
   P. 368–373.
- Squires T. M., Quake S. R. Microfluidics: Fluid physics at the nanoliter scale // Rev. Mod. Phys. — 2005. — Vol. 77. — P. 977–1026.
- Sackmann E. K., Fulton A. L., Beebe D. J. The present and future role of microfluidics in biomedical research // Nature. — 2014. — Vol. 507. — P. 181–189.
- Micro Total Analysis Systems. 1. Introduction, Theory, and Technology / D. R. Reyes, D. Iossifidis, P. A. Auroux, A. Manz // Anal. Chem. 2002. Vol. 74. P. 2623–2636.
- Livak-Dahl E., Sinn I., Burns M. Microfluidic Chemical Analysis Systems // Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng. — 2011. — Vol. 2, no. 1. — P. 325–353.
- Micro Total Analysis Systems: Fundamental Advances and Applications / D. E. W. Patabadige, S. Jia, J. Sibbitts et al. // Analytical Chemistry. — 2016. — Vol. 88, no. 1. — P. 320–338.
- The present and future role of microfluidics in biomedical research / A. Tay, A. Pavesi, Yazdi
   S. R. et al. // Biotechnol. Adv. 2002. Vol. 34(4). P. 404–421.
- Portable microfluidic and smartphone-based devices for monitoring of cardiovascular diseases at the point of care / J. Hu, X. Cui, Y. Gong et al. // Biotechnol. Adv. — 2016. — Vol. 34, no. 3. — P. 305–320.
- Liquid biopsy on chip: a paradigm shift towards the understanding of cancer metastasis / A. Tadimety, A. Syed, Y. Nie et al. // Integr. Biol. — 2017. — Vol. 9. — P. 22–49.
- Microfluidic systems for stem cell-based neural tissue engineering / M. Karimi, S. Bahrami,
  H. Mirshekari et al. // Lab Chip. 2016. Vol. 16. P. 2551–2571.
- Skin Diseases Modeling using Combined Tissue Engineering and Microfluidic Technologies /M. H. Mohammadi, B. Heidary Araghi, V. Beydaghi et al. // Adv. Healthcare Mater. — 2016. — Vol. 5, no. 19.
- Paoli R., Samitier J. Mimicking the Kidney: A Key Role in Organ-on-Chip Development // Micromachines — 2016. — Vol. 7, no. 126.
- Microfluidics as a cutting-edge technique for drug delivery applications / F. Fontana, M. P.A.
   Ferreira, A. Correia et al. // J. Drug Delivery Sci. Technol. 2016. Vol. 34. P. 76 87.
- Microfluidics for advanced drug delivery systems / R. Riahi, A. Tamayol, S. A. M. Shaegh et al. // Curr. Opin. Chem. Eng. 2015. Vol. 7. P. 101–112.
- Microfluidic techniques for high throughput single cell analysis / A. Reece, B. Xia, Z. Jiang et al. // Curr. Opin. Biotechnol. 2016. Vol. 40. P. 90 96.

- Microfluidic Cell Deformability Assay for Rapid and Efficient Kinase Screening with the CRISPR-Cas9 System / X. Han, Z. Liu, L. Zhao et al. // Angew. Chem. Int. Ed. — 2016. — Vol. 55, no. 30. — P. 8561–8565.
- Single molecule studies of quantum dot conjugates in a submicrometer fluidic channel / S. M. Stavis, J. B. Edel, K. T. Samiee, H. G. Craighead // Lab Chip 2005. Vol. 5. P. 337–343.
- Microfluidic Device for Single-Molecule Experiments with Enhanced Photostability / E. A. Lemke, Y. Gambin, V. Vandelinder et al. // J. Am. Chem. Soc. 2009. Vol. 131, no. 38. Pp. 13610–13612.
- Flow of DNA in micro/nanofluidics: From fundamentals to applications / L. Rems, D. Kawale, L. J. Lee, P. E. Boukany // Biomicrofluidics — 2016. — Vol. 10, no. 4. — P. 043403.
- Lavrik N.V., Taylor L.T., Sepaniak M.J. Nanotechnology and chip level systems for pressure driven liquid chromatography and emerging analytical separation techniques: A review // Anal. Chim. Acta. 2011. Vol. 694, no. 1. P. 6 20.
- Microfluidic Chip for Peptide Analysis with an Integrated HPLC Column, Sample Enrichment Column, and Nanoelectrospray Tip / H. Yin, K. Killeen, R. Brennen et al. // Anal. Chem. — 2005. —Vol. 77, no. 2. — P. 527–533.
- 22. Kenyon S. M., Meighan M. M., Hayes M. A. Recent developments in electrophoretic separations on microfluidic devices // Electrophoresis 2011. Vol. 32, no. 5. P. 482–493.
- Breadmore M. C. Capillary and microchip electrophoresis: Challenging the common conceptions // J. Chromatogr. A 2012. Vol. 1221. P. 42 55.
- 24. Kitagawa F., Otsuka K. Recent progress in microchip electrophoresis-mass spectrometry // J. Pharm. Biomed. Anal. 2011. Vol. 55, no. 4. P. 668 678.
- Miscible Organic Solvents Soak Bonding Method Use in a PMMA Multilayer Microfluidic Device / H. Zhang, X. Liu, T. Li, X. Han // Micromachines. — 2014. — Vol. 5, no. 4. — P. 1416–1428.
- Point-of-care, portable microfluidic blood analyzer system / T. Maleki, T. Fricke, J. T. Quesenberry et al. // Proc.SPIE. — 2012. — Vol. 8251. . — P. 851.
- Microfluidic lab-on-a-chip platforms: requirements, characteristics and applications / D. Mark, S. Haeberle, G. Roth et al. // Chem. Soc. Rev. 2010. Vol. 39. Pp. 1153–1182.
- Freemantle M. Downsizing chemistry // Chem. Eng. News. 1999. Vol. 77, no. 8. P. 27–36.
- 29. Application of microfluidics technology in chemical engineering for enhanced safety / B. Sun,
  J. Jiang, N. Shi, W. Xu // Process Saf. Prog. 2016. Vol. 35, no. 4. P. 365–373.

- Savage P.R. Lab-on-a-chip: the Revolution in Portable Instrumentation N. Y.: John Wiley & Sons 1999. 230 p.
- Stone H.A., Stroock A.D., Ajdari A. Engineering flows in small devices // Annu. Rev. Fluid Mech. — 2004. — Vol. 36, no. 1. — P. 381–411.
- 32. Micro Total Analysis Systems: Fundamental Advances and Applications in the Laboratory, Clinic, and Field / M. L. Kovarik, D. M. Ornoff, A. T. Melvin et al. // Anal. Chem. 2013. Vol. 85, no. 2. P. 451–472.
- Bruus H. Theoretical Microfluidics. Oxford Master Series in Physics. OUP Oxford. 2008. 304 p.
- Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том VI. Гидродинамика М.: Наука — 1988. — 773 с.
- 35. Reynolds O. An Experimental Investigation of the Circumstances which Determine Whether the Motion of Water Shall be Direct Or Sinuous, and of the Law of Resistance in Parallel Channels. Philos. Trans. R. Soc. London. — 1883. — Vol. 174. — P. 935-982.
- Washburn E. W. The Dynamics of Capillary Flow // Phys. Rev. 1921. Vol. 17. P. 273–283.
- Kirby B.J. Micro- and Nanoscale Fluid Mechanics: Transport in Microfluidic Devices. Cambridge University Press. — 2010. — 536 p.
- Gunther A., Jensen K. F. Multiphase microfluidics: from flow characteristics to chemical and materials synthesis // Lab Chip. — 2006. — Vol. 6. — P. 1487–1503.
- 39. Anna S. L. Droplets and Bubbles in Microfluidic Devices // Annu. Rev. Fluid Mech. 2016.
   Vol. 48, no. 1. P. 285–309.
- 40. Baroud C. N., Willaime H. Multiphase flows in microfluidics // C. R. Phys. 2004. —Vol. 5, no. 5. P. 547 555.
- Drop Deformation in Microconfined Shear Flow / V. Sibillo, G. Pasquariello, M. Simeone et al. // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 97. P. 054502.
- Vananroye A., Van Puyvelde P., Moldenaers P. Effect of Confinement on Droplet Breakup in Sheared Emulsions // Langmuir. — 2006. — Vol. 22, no. 9. — P. 3972–3974.
- 43. Morrison F.A. Understanding Rheology. Oxford University Press 2001. 511 p.
- Larson R.G. Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions. Butterworths Publisher. Stoneham. — 1988. — 364 p.
- Malkin A.Y., Isayev A.I. Rheology: Concepts, Methods, and Applications. Elsevier Science, 2017. 500 p.
- 46. Barnes H. A. The Yield Stress A Review or παντα ρε Everything Flows? // J. Non-Newtonian Fluid Mech. 1999. Vol. 81, no. 1. P. 133 178.

- Bird R.B., Armstrong R.C., Hassager O. Dynamics of Polymeric Liquids. Volume 1. Fluid Mechanics — Wiley&Suns — 1987 — 670 p.
- 48. Macosko C.W. Rheology: principles, measurements, and applications. Wiley-VCH 1994. 578 p.
- 49. Vervoort M.S. Behaviour of hydrogels swollen in polymer solutions under mechanical stress.
  / Ph.D Thesis. Ecole des Mines de Paris. Sophia-Antipolis. 2006. 212 p.
- Inertial effects of adsorbed glycerol monostearate crystals on the shear rheology of water/canola oil interfaces / H. Carrillo-Navas, C. Pérez-Alonso, B. Fouconnier et al. // J. Food Eng. — 2014. — Vol. 125. — Pp. 112 – 118.
- 51. Виноградов Г.В., Малкин А.Я. Реология полимеров. М.: Химия 1977 439 с.
- 52. Ю.Д. Семчиков. Высокомолекулярные соединения. М: Академия 2010. 386 с.
- 53. On the Rheological properties of polydisperse polymers / A.Y. Malkin, N.K. Blinova, G.V.
  Vinogradov et al. // Eur. Polym. J. 1974 Vol. 10. P. 445-451.
- Bersted B. H. An empirical model relating the molecular weight distribution of high-density polyethylene to the shear dependence of the steady shear melt viscosity // J. Appl. Polym. Sci. 1975. Vol. 19, no. 8. P. 2167–2177.
- Yasuda K., Armstrong R. C., Cohen R. E. Shear flow properties of concentrated solutions of linear and star branched polystyrenes // Rheol. Acta. — 1981. — Vol. 20, no. 2. — P. 163– 178.
- 56. Balan C. M., Balan C. // U.P.B. Sci. Bull. Ser. D. 2010. Vol. 72. P. 121–128.
- 57. Abraham F., Behr M., Heinkenschloss M. Shape optimization in steady blood flow: A numerical study of non-Newtonian effects // Comput Methods Biomech Biomed Engin. 2005. Vol. 8, no. 2. P. 127–137.
- 58. Afzal A., Kim K.-Y. Flow and mixing analysis of non-Newtonian fluids in straight and serpentine microchannels // Chem. Eng. Sci. 2014. Vol. 116. P. 263 274.
- Koo J., Kleinstreuer C. Liquid flow in microchannels: experimental observations and computational analyses of microfluidics effects // J. Micromech. Microeng. 2003. Vol. 13, no. 5. P. 568.
- H. Hamedi M. H. Rahimian. Numerical Simulation of Non-Newtonian Pseudo-Plastic Fluid in a Micro Channel Using the Lattice Boltzmann Method // World Journal of Mechanics. — 2011. — Vol. 1. — P. 231–242.
- Inelastic non-Newtonian flow over heterogeneously slippery surfaces / A. S. Haase, J. A. Wood, L. M. J. Sprakel, R. G. H. Lammertink // Phys. Rev. E. 2017. Vol. 95. P. 023105.

- Ren Y., Liu Z., Shum H. C. Breakup dynamics and dripping-to-jetting transition in a Newtonian/shear- thinning multiphase microsystem // Lab Chip. — 2015. — Vol. 15. — P. 121– 134.
- Barnes H. A. A review of the slip (wall depletion) of polymer solutions, emulsions and particle suspensions in viscometers: its cause, character, and cure // J. Non-Newtonian Fluid Mech. 1995. Vol. 56, no. 3. P. 221 251.
- 64. Boundary slip in Newtonian liquids: a review of experimental studies / C. Neto, D. R. Evans,
  E. Bonaccurso et al. // Rep. Prog. Phys. 2005. Vol. 68, no. 12. P. 2859.
- Lauga E., Brenner M., Stone H. Handbook of Experimental Fluid Mechanics / Ed. by C. Tropea, A. L. Yarin, J. F. Foss. — N.Y.: Springer — 2007. — P. 1219–1240.
- Bocquet L., Barrat J.-L. Flow boundary conditions from nano- to micro-scales // Soft Mater.
  2007. Vol. 3. P. 685–693.
- 67. Sochi T. Slip at Fluid-Solid Interface // Polym. Rev. 2011. Vol. 51, no. 4. P. 309–340.
- 68. Lee T., Charrault E., Neto C. Interfacial slip on rough, patterned and soft surfaces: A review of experiments and simulations // Adv. Colloid Interface Sci.. 2014. Vol. 210. P. 21 38.
- 69. Hatzikiriakos S. G. Slip mechanisms in complex fluid flows // Soft Mater. 2015. Vol. 11. P. 7851–7856.
- 70. Underwater Superhydrophobicity: Stability, Design and Regulation, and Applications / Y.
   Xue, P. Lv, H. Lin, H. Duan // Appl. Mech. Rev. 2016. Vol. 68, no. 3. P. 030803.
- 71. Navier C. L. M. H. Mémoire sur les lois du mouvement des fluids // Mem. Acad. Sci. Inst. Fr. 1823. Vol. 6. P. 389–416.
- 72. Stokes G. G. On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums // Trans. Cambridge Philos. Soc. — 1851. — Vol. 9. — P. 8.
- 73. Interfacial Water at Hydrophobic and Hydrophilic Surfaces: Slip, Viscosity, and Diffusion / C. Sendner, D. Horinek, L. Bocquet, R. R. Netz // Langmuir. 2009. Vol. 25, no. 18. P. 10768–10781.
- Choi C.-H., Westin K. J. A., Breuer K. S. Apparent slip flows in hydrophilic and hydrophobic microchannels // Phys. Fluids. — 2003. — Vol. 15, no. 10. — P. 2897–2902.
- Bhushan B., Wang Y., Maali A. Boundary Slip Study on Hydrophilic, Hydrophobic, and Superhydrophobic Surfaces with Dynamic Atomic Force Microscopy // Langmuir. 2009. Vol. 25, no. 14. P. 8117–8121.
- Vinogradoava O.I. Coagulation of Hydrophobic and Hydrophilic Solids under Dynamic Conditions // J. Colloid Interface Sci. — 1995 — Vol. 169 — P.306-312.

- 77. Joseph P., Tabeling P. Direct measurement of the apparent slip length // Phys. Rev. E. —
  2005. Vol. 71. P. 035303.
- Zisman W. A. Relation of the Equilibrium Contact Angle to Liquid and Solid Constitution // Contact Angle, Wettability Adhes. — 1964. — P. 1–51.
- Barrat B, Bocquet L. Influence of wetting properties on hydrodynamic boundary conditions at a fluid/solid interface // Faraday Discuss — 1999 — V. 112 — P.119127
- Vinogradova O. I. Drainage of a Thin Liquid Film Confined between Hydrophobic Surfaces // Langmuir. — 1995. — Vol. 11, no. 6. — P. 2213–2220.
- Granick S., Zhu Y., Lee H. Slippery questions about complex fluids flowing past solids // Nat. Mater. —2003. — Vol. 2, no. 4. — P. 221–227.
- Water Slippage versus Contact Angle: A Quasiuniversal Relationship / D. M. Huang, C. Sendner, D. Horinek et al. // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 101. P. 226101.
- Andrienko D., Dünweg B., Vinogradova O. I. Boundary slip as a result of a prewetting transition // J. Chem. Phys. 2003. Vol. 119, no. 24. P. 13106–13112.
- Tretheway D. C., Meinhart C. D. Apparent fluid slip at hydrophobic microchannel walls // Phys. Fluids. — 2002. — Vol. 14, no. 3. — P. L9–L12.
- de Gennes P. G. On Fluid/Wall Slippage // Langmuir. 2002. Vol. 18, no. 9. P. 3413– 3414.
- Nano Bubbles on a Hydrophobic Surface in Water Observed by Tapping-Mode Atomic Force Microscopy / N. Ishida, T. Inoue, M. Miyahara, K. Higashitani // Langmuir. — 2000. — Vol. 16, no. 16. — Pp. 6377–6380.
- 87. Nanobubbles on solid surface imaged by atomic force microscopy / S.-T. Lou, Z.-Q. Ouyang, Y. Zhang et al. // . J. Vac. Sci. Technol., B: Nanotechnol. Microelectron.: Mater., Process., Meas., Phenom. 2000. Vol. 18, no. 5. P. 2573–2575.
- Very Small Bubble Formation at the SolidWater Interface / J. Yang, J. Duan, D. Fornasiero, J. Ralston // J. Phys. Chem. B. 2003. Vol. 107, no. 25. P. 6139–6147.
- 89. Partial Air Wetting on Solvophobic Surfaces in Polar Liquids / U.-C. Boehnke, T. Remmler, H. Motschmann et al. // J. Colloid Interface Sci. 1999. Vol. 211, no. 2. P. 243 251.
- 90. Thompson P. A., Troian S. M. A general boundary condition for liquid flow at solid surfaces // Nature. —1997. Vol. 389, no. 6649. P. 360–362.
- Niavarani A., Priezjev N. V. Modeling the combined effect of surface roughness and shear rate on slip flow of simple fluids // Phys. Rev. E. — 2010. — Vol. 81. — P. 011606.
- Zhu Y., Granick S. Rate-Dependent Slip of Newtonian Liquid at Smooth Surfaces // Phys. Rev. Lett. —2001. — Vol. 87. — P. 096105.

- 93. Lauga E., Brenner M. P. Dynamic mechanisms for apparent slip on hydrophobic surfaces // Phys. Rev. E. 2004. Vol. 70. P. 026311.
- Hill D. A., Hasegawa T., Denn M. M. On the apparent relation between adhesive failure and melt fracture //J. Rheol. — Vol. 34, no. 6. — P. 891–918.
- Anastasiadis S. H., Hatzikiriakos S. G. The work of adhesion of polymer/wall interfaces and its association with the onset of wall slip // J. Rheol. — 1998. — Vol. 42, no. 4. — P. 795– 812.
- 96. Larrazabal H.J., Hrymak A.N., Vlachopoulos J. On the relationship between the work of adhesion and the critical shear stress for the onset of flow instabilities // Rheol. Acta. 2006.
   Jun. Vol. 45, no. 5. P. 705–715.
- 97. Ramamurthy A. V. Wall Slip in Viscous Fluids and Influence of Materials of Construction // J. Rheol. — 1986. — Vol. 30, no. 2. — P. 337–357.
- Person T. J., Denn M. M. The effect of die materials and pressure-dependent slip on the extrusion of linear low-density polyethylene // J. Rheol. — 1997. — Vol. 41, no. 2. — P. 249–265.
- 99. Slippage of an entangled polymer melt on a grafted surface / A. Adjari, F. Brochard-Wyart,
  P.-G. de Gennes et al. // Phys. A. 1994. Vol. 204, no. 1. P. 17–39.
- 100. Joseph D. D. Steep wave fronts on extrudates of polymer melts and solutions: lubrication layers and boundary lubrication // J. Non-Newtonian Fluid Mech. 1997. Vol. 70, no. 3. P. 187–203.
- 101. Young T. An Essay on the Cohesion of Fluids // Philos. Trans. R. Soc. London. 1805. Vol. 95. P. 65–87.
- 102. Super-Water-Repellent Fractal Surfaces / T. Onda, S. Shibuichi, N. Satoh, K. Tsujii // Langmuir. — 1996. — Vol. 12, no. 9. — P. 2125–2127.
- 103. Wenzel R. N. Resistance of solid surfaces to wetting by water // Ind. Eng. Chem. 1936. —
  Vol. 28, no. 8. P. 988–994.
- 104. Cassie A. B. D., Baxter S. Wettability of porous surfaces // Trans. Faraday Soc. 1944. Vol. 40. Pp. 546–551.
- 105. Lee C., Choi C.-H., Kim C.-J. Structured Surfaces for a Giant Liquid Slip // Phys. Rev. Lett.
   2008. Vol. 101. P. 064501.
- 106. Samaha M. A., Tafreshi H. V., M. Gad el Hak. Modeling drag reduction and meniscus stability of superhydrophobic surfaces comprised of random roughness // Phys. Fluids. — 2011. — Vol. 23, no. 1. — P. 012001.
- 107. Regimes of wetting transitions on superhydrophobic textures conditioned by energy of receding contact lines / A. L. Dubov, A. Mourran, M. M<sup>°</sup>oller, O. I. Vinogradova // Appl. Phys. Lett. — 2015. — Vol. 106, no. 24. — P. 241601.

- 108. Quéré D. Wetting and Roughness // Annu. Rev. Mater. Res. 2008. Vol. 38, no. 1. —P. 71–99.
- 109. Whyman G., Bormashenko E. How to Make the Cassie Wetting State Stable? // Langmuir. —
  2011. —Vol. 27, no. 13. P. 8171–8176.
- 110. Bico J., Tordeux C., Quéré D. Rough wetting // Europhys. Lett. 2001. Vol. 55, no. 2. P. 214.
- Barthlott W., Neinhuis C. Purity of the sacred lotus, or escape from contamination in biological surfaces // Planta. 1997. Vol. 202, no. 1. P. 1–8.
- 112. Quantitative assessment to the structural basis of water repellency in natural and technical surfaces / P. Wagner, R. Fürstner, W. Barthlott, C. Neinhuis // J. Exp. Bot. 2003. Vol. 54, no. 384. P. 1295–1303.
- 113. Why do pigeon feathers repel water? Hydrophobicity of pennae, Cassie–Baxter wetting hypothesis and Cassie–Wenzel capillarity-induced wetting transition / E. Bormashenko, Y. Bormashenko, T. Stein et al. // J. Colloid Interface Sci. 2007. Vol. 311, no. 1. P. 212 216.
- 114. Hu D. L., Chan B., Bush J. W. The hydrodynamics of water strider locomotion // Nature. —
  2003. Vol. 424, no. 6949. P. 663–666.
- 115. Flynn M. R., Bush J. W. M. Underwater breathing: the mechanics of plastron respiration // J.
  Fluid Mech. 2008. Vol. 608. P. 275–296.
- 116. Koch K., Bhushan B., Barthlott W. Multifunctional surface structures of plants: An inspiration for biomimetics // Prog. Mater. Sci.. — 2009. — Vol. 54, no. 2. — P. 137 – 178.
- 117. Feng X. J., Jiang L. Design and Creation of Superwetting/Antiwetting Surfaces // Adv. Mater.
  2006. Vol. 18, no. 23. P. 3063–3078.
- 118. Gao X., Jiang L. Biophysics: Water-repellent legs of water striders // Nature. 2004. Vol. 432, no. 36.
- Bouncing transitions on microtextured materials / M. Reyssat, A. Pépin, F. Marty et al. // Europhys. Lett. 2006. Vol. 74, no. 2. P. 306.
- 120. Laminar flow in a microchannel with hydrophobic surface patterned microribs oriented parallel to the flow direction / D. Maynes, K. Jeffs, B. Woolford, B. W. Webb // Phys. Fluids. — 2007. — Vol. 19, no. 9. — P. 093603.
- Jenner E. Multiscale structured surfaces and their effect on drag and fluid flow /Ph.D. thesis University of Pittsburgh. — 2015. — 155 p.
- 122. Rothstein J. P. Slip on Superhydrophobic Surfaces // Annu. Rev. Fluid Mech. 2010. Vol. 42, no. 1. P. 89–109.

- 123. Superhydrophobic TiO<sub>2</sub>–Polymer Nanocomposite Surface with UV-Induced Reversible Wettability and Self- Cleaning Properties / Q. F. Xu, Y. Liu, F.-J. Lin et al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. — 2013. — Vol. 5, no. 18. — P. 8915–8924.
- 124. Lotus bioinspired superhydrophobic, self-cleaning surfaces from hierarchically assembled templates / A. Y. Y. Ho, E. Luong Van, C. T. Lim et al. // J. Polym. Sci., Part B: Polym. Phys.. — 2014. — Vol. 52, no. 8. — P. 603–609.
- 125. The Dry-Style Antifogging Properties of Mosquito Compound Eyes and Artificial Analogues Prepared by Soft Lithography / X. Gao, X. Yan, X. Yao et al. // Adv. Mater. — 2007. — Vol. 19, no. 17. — P. 2213–2217.
- 126. Li H., Zhao Y., Yuan X. Facile preparation of superhydrophobic coating by spraying a fluorinated acrylic random copolymer micelle solution // Soft Mater. — 2013. — Vol. 9. — P. 1005–1009.
- 127. Anti-frost coatings containing carbon nanotube composite with reliable thermal cyclic property / Y. Sohn, D. Kim, S. Lee et al. // J. Mater. Chem. A. — 2014. — Vol. 2. — P. 11465– 11471.
- 128. de Leon A. C. C., Pernites R. B., Advincula R. C. Superhydrophobic Colloidally Textured Polythiophene Film as Superior Anticorrosion Coating // ACS Appl. Mater. Interfaces. — 2012. — Vol. 4, no. 6. — P. 3169–3176.
- Wang N., Xiong D. Superhydrophobic membranes on metal substrate and their corrosion protection in different corrosive media // Appl. Surf. Sci. — 2014. — Vol. 305. — P. 603 – 608.
- Superhydrophobic nitric oxide-releasing xerogels / W. L. Storm, J. Youn, K. P. Reighard et al. // Acta Biomater. 2014. Vol. 10, no. 8. P. 3442–3448.
- Ivanova N. A., Philipchenko A. B. Superhydrophobic chitosan-based coatings for textile processing // Appl. Surf. Sci. 2012. Vol. 263. P. 783–787.
- Vinogradova O. I., Dubov A. L. Superhydrophobic Textures for Microfluidics // Mendeleev Commun. — 2012. — Vol. 22, no. 5. — P. 229 – 236.
- 133. Multifunctional Carbon Nanofibers with Conductive, Magnetic and Superhydrophobic Properties / Y. Zhu, J. C. Zhang, J. Zhai et al. // ChemPhysChem. 2006. Vol. 7, no. 2. P. 336–341.
- 134. Metastable droplets on shallow-grooved hydrophobic surfaces / O. Bliznyuk, V. Veligura, E. S. Kooij et al. // Phys. Rev. E. 2011. Vol. 83. P. 041607.
- 135. Contact angle hysteresis on superhydrophobic stripes / A. L. Dubov, A. Mourran, M. Möller,
  O. I. Vinogradova // J. Chem. Phys. 2014. Vol. 141, no. 7. P. 074710.
- Darmanin T., Guittard F. Superhydrophobic and superoleophobic properties in nature // Mater. Today. 2015. Vol. 18, no. 5. P. 273 285.

- 137. Lee C., Kim C.-J. Maximizing the Giant Liquid Slip on Superhydrophobic Microstructures by Nanostructuring Their Sidewalls // Langmuir. — 2009. — Vol. 25, no. 21. — P. 12812– 12818.
- 138. Change in drag, apparent slip and optimum air layer thickness for laminar flow over an idealized superhydrophobic surface / A. Busse, N. D. Sandham, G. McHale, M. I. Newton // J. Fluid Mech. — 2013. — Vol. 727. — P. 488–508.
- Kamrin K., Bazant M. Z., Stone H. A. Effective slip boundary conditions for arbitrary periodic surfaces: the surface mobility tensor // J. Fluid Mech. — 2010. — Vol. 658. — P. 409–437.
- 140. Feuillebois F., Bazant M. Z., Vinogradova O. I. Effective Slip over Superhydrophobic Surfaces in Thin Channels // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 102. P. 026001.
- 141. Ou J., Perot B., Rothstein J. P. Laminar drag reduction in microchannels using ultrahydrophobic surfaces // Phys. Fluids. — 2004. — Vol. 16, no. 12. — P. 4635–4643.
- 142. Ou J., Rothstein J. P. Direct velocity measurements of the flow past drag-reducing ultrahydrophobic surfaces // Phys. Fluids. — 2005. — Vol. 17, no. 10. — P. 103606.
- 143. Philip J. R. Integral properties of flows satisfying mixed no-slip and no-shear conditions // Z. Angew. Math. Phys. 1972. Vol. 23, no. 6. P. 960–968.
- 144. Lauga E., Stone H. A. Effective slip in pressure-driven Stokes flow // J. Fluid Mech. 2003.
   Vol. 489. P. 55–77.
- 145. Belyaev A. V., Vinogradova O. I. Effective slip in pressure-driven flow past superhydrophobic stripes // J. Fluid Mech. — 2010. — Vol. 652. — P. 489–499.
- 146. Bazant M. Z., Vinogradova O. I. Tensorial hydrodynamic slip // J. Fluid Mech. 2008. Vol. 613. P. 125–134.
- 147. Vinogradova O. I., V.Belyaev A. Wetting, roughness and flow boundary conditions // J. Phys. Condens. Matter 2011. Vol. 23, no. 18. P. 184104.
- 148. Nizkaya T. V., Asmolov E. S., Vinogradova O. I. Gas cushion model and hydrodynamic boundary conditions for superhydrophobic textures // Phys. Rev. E. — 2014. — Vol. 90. — P. 043017.
- Sbragaglia M., Prosperetti A. A note on the effective slip properties for microchannel flows with ultrahydrophobic surfaces // Phys. Fluids. — 2007. — Vol. 19, no. 4. — P. 043603.
- 150. Davis A. M. J., Lauga E. Geometric transition in friction for flow over a bubble mattress // Phys. Fluids. — 2009. — Vol. 21, no. 1. — P. 011701.
- Teo C. J., Khoo B. C. Flow past superhydrophobic surfaces containing longitudinal grooves: effects of interface curvature // Microfluid. Nanofluid. — 2010. — Vol. 9, no. 2. — Pp. 499– 511.

- 152. Control of slippage with tunable bubble mattresses / E. Karatay, A. S. Haase, C. W. Visser et al. // Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 2013. Vol. 110, no. 21. P. 8422—8426.
- 153. Why bumpy is better: the role of the dissipation distribution in slip flow over a bubble mattress / A.S. Haase, J.A. Wood, R.G.H. Lammertink et al. // Phys. Rev. Fluids 2016 Vol. 1 P. 054101 (2016).
- 154. Laminar flow in a microchannel with superhydrophobic walls exhibiting transverse ribs / J. Davies, D. Maynes, B. W. Webb, B. Woolford // Phys. Fluids. 2006. Vol. 18, no. 8. P. 087110.
- 155. Schönecker C., Baier T., Hardt S. Influence of the enclosed fluid on the flow over a microstructured surface in the Cassie state // J. Fluid Mech. — 2014. — Vol. 740. — P. 168–195.
- 156. Microfluidics and complex fluids / P. Nghe, E. Terriac, M. Schneider et al. // Lab Chip. 2011. Vol. 11. P. 788–794.
- 157. Galindo-Rosales F. J., Alves M. A., Oliveira M. S. N. Microdevices for extensional rheometry of low viscosity elastic liquids: a review // Microfluid. Nanofluid. 2013. Vol. 14, no. 1. P. 1–19.
- 158. D'Avino G., Greco F., Maffettone P. L. Particle Migration due to Viscoelasticity of the Suspending Liquid and Its Relevance in Microfluidic Devices // Annu. Rev. Fluid Mech. 2017.
   Vol. 49, no. 1. P. 341–360.
- 159. The influence of the non-Newtonian properties of blood on the flow in large arteries: unsteady flow in a 90 curved tube / F.J.H. Gijsen, E. Allanic, F.N. van de Vosse, J.D. Janssen // J. Biomech. 1999. Vol. 32, no. 7. P. 705 713.
- Thurston George B., Henderson Nancy M. Effects of flow geometry on blood viscoelasticity // Biorheology. — 2006. — Vol. 43, no. 6. — P. 729–746.
- 161. Microfluidic solutions enabling continuous processing and monitoring of biological samples:
  A review / M. Karle, S. K. Vashist, R. Zengerle, F. von Stetten // Anal. Chim. Acta. 2016.
   Vol. 929. P. 1 22.
- 162. Nagaki A., Takahashi Y., Yoshida J. Extremely Fast Gas/Liquid Reactions in Flow Microreactors: Carboxylation of Short-Lived Organolithiums // Chem. Eur. J. — 2014. — Vol. 20, no. 26. — P. 7931–7934.
- 163. Kinetics research on fast exothermic reaction between cyclohexanecarboxylic acid and oleum in microreactor / K. Wang, Y.C. Lu, Y. Xia et al. // Chem. Eng. J. — 2011. — Vol. 169, no. 1. — P. 290 – 298.
- 164. The capillary-microreactor: a new reactor concept for the intensification of heat and mass transfer in liquid–liquid reactions / G. Dummann, U. Quittmann, L. Gröschel et al. // Catal. Today. — 2003. — Vol. 79-80. — P. 433 – 439.

- 165. Micromixing Within Microfluidic Devices / L. Capretto, W. Cheng, M. Hill, X. Zhang // Top. Curr. Chem. — 2011. — P. 27–68.
- 166. Active micromixer for microfluidic systems using lead-zirconate-titanate(PZT)-generated ultrasonic vibration / Z. Yang, H. Goto, M. Matsumoto, R. Maeda // Electrophoresis. 2000.
   Vol. 21, no. 1. P. 116–119.
- 167. Tsai J. Active microfluidic mixer and gas bubble filter driven by thermal bubble micropump // Sens. Actuators, A. — 2002. — Vol. 97-98, no. 1-2. — P. 665–671.
- 168. A Minute Magneto Hydro Dynamic (MHD) Mixer / H. H. Bau, J. Zhong, M. Yi // Sens. Actuators B. — 2001. — Vol. 79. — P. 205–213.
- 169. A Picoliter-Volume Mixer for Microfluidic Analytical Systems / B. He, B. J. Burke, X. Zhang et al. // Anal. Chem. — 2001. — Vol. 73, no. 9. — P. 1942–1947.
- 170. A novel passive micromixer: lamination in a planar channel system / T. Tofteberg, M. Skolimowski, E. Andreassen, O. Geschke // Microfluid. Nanofluid. 2010. Vol. 8. P. 209–215.
- 171. Wiggins S., Ottino J. M. Foundations of chaotic mixing // Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A. 2004. Vol. 362, no. 1818. P. 937–970.
- 172. Mengeaud V., Josserand J., Girault H. H. Mixing Processes in a Zigzag Microchannel: Finite Element Simulations and Optical Study // Anal. Chem. — 2002. — Vol. 74, no. 16. — P. 4279–4286.
- 173. Evaluation of a Three-Dimensional Micromixer in a Surface-Based Biosensor / R. A. Vijayendran, K. M. Motsegood, D. J. Beebe, D. E. Leckband // Langmuir. — 2003. — Vol. 19, no. 5. — P. 1824–1828.
- 174. Chaotic Mixer for Microchannels / A. D. Stroock, S. K. W. Dertinger, A. Ajdari et al. // Science. 2002. Vol. 295, no. 5555. P. 647–651.
- 175. Mixing enhancement by simple periodic geometric features in microchannels / Y. Fang, Y. Ye, R. Shen et al. // Chem. Eng. J. 2012. Vol. 187. P. 306 310.
- 176. Tian W.C., Finehout E. Microfluidics for Biological Applications Springer 2009 416
   p.
- 177. Ou J., Moss G. R., Rothstein J. P. Enhanced mixing in laminar flows using ultrahydrophobic surfaces // Phys. Rev. E. — 2007. — Vol. 76. — P. 016304.
- 178. Anisotropic flow in striped superhydrophobic channels / J. Zhou, A. V. Belyaev, F. Schmid,
  O. I. Vinogradova // J. Chem. Phys. 2012. Vol. 136, no. 19. P. 194706.
- 179. Flows and mixing in channels with misaligned superhydrophobic walls / T. V. Nizkaya, E. S. Asmolov, J. Zhou et al. // Phys. Rev. E. 2015. Vol. 91. P. 033020.

- 180. Numerical study of electroosmotic micromixing of non-Newtonian fluids / M. Hadigol, R. Nosrati, A. Nourbakhsh, M. Raisee // J. Non-Newtonian Fluid Mech. 2011. Vol. 166, no. 17. P. 965 971.
- 181. Cho C.-C., Chen C.-L., Chen C.-K. Mixing of non-Newtonian fluids in wavy serpentine microchannel using electrokinetically driven flow // Electrophoresis. — 2012. — Vol. 33, no. 5. — P. 743–750.
- 182. Pereira G.G. Effect of variable slip boundary conditions on flows of pressure driven non-Newtonian fluids // J. Non-Newtonian Fluid Mech. — 2009. — Vol. 157, no. 3. — P. 197 – 206.
- 183. Dhondi S., Pereira G. G., Hendy S. C. Molecular dynamics simulations of polymeric fluids in narrow channels: Methods to enhance mixing // Phys. Rev. E. — 2009. — Vol. 80. — P. 036309.
- 184. Chemistry in Microstructured Reactors / K. Jähnisch, V. Hessel, H. Löwe, M. Baerns // Angew. Chem., Int. Ed. 2004. Vol. 43, no. 4. P. 406–446.
- 185. Song H., Chen D. L., Ismagilov R. F. Reactions in Droplets in Microfluidic Channels // Angew. Chem., Int. Ed. 2006. Vol. 45, no. 44. P. 7336–7356.
- 186. Degim I. T., Celebi N. Controlled Delivery of Peptides and Proteins // Curr. Pharm. Des. 2007. — Vol. 13, no. 1. — P. 99–117.
- 187. Cell paintballing using optically targeted coacervate microdroplets / J. P. K. Armstrong, S. N. Olof, M. D. Jakimowicz et al. // Chem. Sci. 2015. Vol. 6. P. 6106–6111.
- 188. Lu Y., Yin Y., Xia Y. Three-Dimensional Photonic Crystals with Non-spherical Colloids as Building Blocks // Adv. Mater. — 2001. — Vol. 13, no. 6. — P. 415–420.
- 189. Husny J., Cooper-White J. J. The effect of elasticity on drop creation in T-shaped microchannels // J. Non-Newtonian Fluid Mech. — 2006. — Vol. 137, no. 1. — P. 121 – 136.
- 190. Preparation of highly monodisperse droplet in a T-junction microfluidic device / J. H. Xu, S. W. Li, J. Tan et al. // AIChE J. 2006. Vol. 52, no. 9. P. 3005–3010.
- 191. Dripping to Jetting Transitions in Coflowing Liquid Streams / A. S. Utada, A. Fernandez-Nieves, H. A. Stone, D. A. Weitz // Phys. Rev. Lett. — 2007. — Vol. 99. — P. 094502.
- 192. Weber M. W., Shandas R. Computational fluid dynamics analysis of microbubble formation in microfluidic flow-focusing devices // Microfluid. Nanofluid. 2007. Vol. 3, no. 2. P. 195–206.
- 193. Controlled production of hierarchically organized large emulsions and particles using assemblies on line of co-axial flow devices / P. Panizza, W. Engl, C. Hany, R. Backov // Colloids Surf. A 2008. Vol. 312, no. 1. P. 24–31.

- 194. Engl W., Backov R., Panizza P. Controlled production of emulsions and particles by milliand microfluidic techniques // Curr. Opin. Colloid Interface Sci. — 2008. — Vol. 13, no. 4. — P. 206–216.
- 195. Controllable preparation of particles with microfluidics / G. Luo, L. Du, Y. Wang et al. // Particuology. — 2011. — Vol. 9, no. 6. — P. 545 – 558.
- 196. Ulmeanu M. Preparation and characterization of water in oil emulsion via drop break-off // Colloids Surf. A. — 2008. — Vol. 316, no. 1. — P. 119 – 124.
- 197. Dynamic Pattern Formation in a Vesicle-Generating Microfluidic Device / T. Thorsen, R. W. Roberts, F. H. Arnold, S. R. Quake // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 86. P. 4163–4166.
- 198. Droplet formation in a microfluidic T-junction involving highly viscous fluid systems / L. Bai,
  Y. Fu, S. Zhao, Y. Cheng // Chem. Eng. Sci. 2016. Vol. 145. P. 141 148.
- 199. Anna S. L., Bontoux N., Stone H. A. Formation of dispersions using "flow focusing" in microchannels // Appl. Phys. Lett.. — 2003. — Vol. 82, no. 3. — P. 364–366.
- 200. Experimental and computational analysis of droplet formation in a high-performance flow-focusing geometry / W.-L. Ong, J. Hua, B. Zhang et al. // Sens. Actuators, A. 2007. Vol. 138, no. 1. P. 203 212.
- 201. Microdroplet formation in rounded flow-focusing junctions / S. Gulati, K. Vijayakumar, W.
  W. Good et al. // Microfluid. Nanofluid.. 2016. Vol. 20, no. 1. P. 2.
- 202. Umbanhowar P. B., Prasad V., Weitz D. A. Monodisperse Emulsion Generation via Drop Break Off in a Coflowing Stream // Langmuir. 2000. Vol. 16, no. 2. P. 347–351.
- 203. Cramer C., Fischer P., Windhab E. J. Drop formation in a co-flowing ambient fluid // Chem. Eng. Sci. — 2004. — Vol. 59, no. 15. — P. 3045 – 3058.
- 204. Wu L., Chen Y. Visualization study of emulsion droplet formation in a coflowing microchannel // Chem. Eng. Process. — 2014. — Vol. 85. — P. 77 – 85.
- 205. Dreyfus R., Tabeling P., Willaime H. Ordered and Disordered Patterns in Two-Phase Flows in Microchannels // Phys. Rev. Lett. — 2003. — Vol. 90. — P. 144505.
- 206. Shear force induced monodisperse droplet formation in a microfluidic device by controlling wetting properties / J. H. Xu, G. S. Luo, S. W. Li, G. G. Chen // Lab Chip. 2006. Vol. 6. P. 131–136.
- 207. Comparison of monodisperse droplet generation in flow-focusing devices with hydrophilic and hydrophobic surfaces / C. C. Roberts, R. R. Rao, M. Loewenberg et al. // Lab Chip. — 2012. — Vol. 12. — P. 1540–1547.
- 208. Simulations of droplet formation in a T-junction micro-channel using the phase field method /
  L. L. Wang, G. J. Li, H. Tian, Y. H. Ye // Int. J. Comput. Methods. 2014. Vol. 11, no.
  4. P. 1350096.

- 209. Moon S.-K., Cheong I. W., Choi S.-W. Effect of flow rates of the continuous phase on droplet size in dripping and jetting regimes in a simple fluidic device for coaxial flow // Colloids Surf., A: Physicochemical and Engineering Aspects. — 2014. — Vol. 454. — P. 84–88.
- 210. Controllable Monodisperse Multiple Emulsions / L.-Y. Chu, A. S. Utada, R. K. Shah et al. // Angew. Chem. Int. Ed. — 2007. — Vol. 46, no. 47. — P. 8970–8974.
- 211. Synthesis of Monodisperse Bicolored Janus Particles with Electrical Anisotropy Using a Microfluidic Co-Flow System / T. Nisisako, T. Torii, T. Takahashi, Y. Takizawa // Adv. Mater. 2006. —Vol. 18, no. 9. P. 1152–1156.
- 212. Zhu P., Wang L. Passive and active droplet generation with microfluidics: a review // Lab Chip. — 2017. — Vol. 17. — P. 34–75.
- 213. Lan W., Li S., Luo G. Numerical and experimental investigation of dripping and jetting flow in a coaxial micro-channel // Chem. Eng. Sci. — 2015. — Vol. 134. — P. 76 – 85.
- 214. Papageorgiou D. T. On the breakup of viscous liquid threads // Phys. Fluids. 1995. Vol. 7, no. 7. P. 1529–1544.
- 215. Dripping and jetting in microfluidic multiphase flows applied to particle and fibre synthesis / J. K. Nunes, S. S. H. Tsai, J. Wan, H. A. Stone // J. Phys. D: Appl. Phys. 2013. Vol. 46, no. 11. P. 114002.
- 216. Numerical and experimental study of oil-in-water (O/W) droplet formation in a co-flowing capillary device / C. Deng, H. Wang, W. Huang, S. Cheng // Colloids Surf., A. 2017. Vol. 533. P. 1–8.
- 217. A Predictive Approach of the Influence of the Operating Parameters on the Size of Polymer Particles Synthesized in a Simplified Microfluidic System / C. Serra, N. Berton, M. Bouquey et al. // Langmuir. — 2007. — Vol. 23, no. 14. — P. 7745–7750.
- 218. Gordillo J. M., Sevilla A., Campo-Cortés F. Global stability of stretched jets: conditions for the generation of monodisperse micro-emulsions using coflows // J. Fluid Mech. 2014. Vol. 738. P. 335–357.
- 219. Suryo R., Basaran O. A. Tip streaming from a liquid drop forming from a tube in a co-flowing outer fluid // Phys. Fluids. 2006. Vol. 18, no. 8. P. 082102.
- 220. Castro-Hernández E., Campo-Cortés F., Gordillo J. M. Slender-body theory for the generation of micrometre-sized emulsions through tip streaming // J. Fluid Mech. 2012. Vol. 698. P. 423–445.
- 221. Study on "interface shrinkage driven" breakup of droplets in co-flowing microfluidic devices / W. Lan, S. Jing, X. Guo, S. Li // Chem. Eng. Sci. — 2017. — Vol. 158. — P. 58 – 63.

- 222. Rumscheidt F.D, Mason S.G. Particle motions in sheared suspensions XII. Deformation and burst of fluid drops in shear and hyperbolic flow // J. Colloid Sci. 1961. Vol. 16, no. 3. P. 238 261.
- 223. Grace H. P. Dispersion phenomena in high viscosity immiscible fluid systems and application of static mixers as dispersion devices in such systems // Chem. Eng. Commun. 1982. Vol. 14, no. 3-6. P. 225–277.
- 224. Taylor G.I. The formation of emulsions in definable fields of flow // Proc. R. Soc. London Ser. A. — 1934. — Vol. 146, no. 858. — P. 501–523.
- 225. Hinch E. J., Acrivos A. Steady long slender droplets in two-dimensional straining motion // J. Fluid Mech. 1979. Vol. 91, no. 3. P. 401–414.
- 226. Li J., Renardy Y. Y., Renardy M. Numerical simulation of breakup of a viscous drop in simple shear flow through a volume-of-fluid method // Phys. Fluids. 2000. Vol. 12, no. 2. P. 269–282.
- 227. Kennedy M.R., Pozrikidis C., Skalak R. Motion and deformation of liquid drops, and the rhe-ology of dilute emulsions in simple shear flow // Comput. Fluids. 1994. Vol. 23, no. 2. P. 251–278.
- 228. Guido S., Villone M. Three-dimensional shape of a drop under simple shear flow // J. Rheol.
   1998. Vol. 42, no. 2. P. 395–415.
- 229. Shapira M., Haber S. Low Reynolds number motion of a droplet in shear flow including wall effects // Int. J. Multiphase Flow. 1990. Vol. 16, no. 2. P. 305–321.
- 230. Janssen P. J. A., Anderson P. D., Loewenberg M. A slender-body theory for low-viscosity drops in shear flow between parallel walls // Phys. Fluids. — 2010. — Vol. 22, no. 4. — P. 042002.
- Drop Deformation in Microconfined Shear Flow / V. Sibillo, G. Pasquariello, M. Simeone et al. // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 97. P. 054502.
- 232. Generalized behavior of the breakup of viscous drops in confinements / P. J. A. Janssen, A. Vananroye, P. Van Puyvelde et al. // J. Rheol. 2010. Vol. 54, no. 5. P. 1047–1060.
- 233. Torza S., Mason S.G. Three-phase interactions in shear and electrical fields // J. Colloid Interface Sci. — 1970. — Vol. 33, no. 1. — P. 67 – 83.
- 234. Кравченко И. В., Патлажан С. А. Гидродинамическое структурирование вязкой композитной капли при сдвиговом течении // ДАН. Физ. Хим. — 2009. — Vol. 427, no. 5. — Р. 646 – 649.
- 235. Chen Y., Liu X., Shi M. Hydrodynamics of double emulsion droplet in shear flow // Appl. Phys. Lett. 2013. Vol. 102, no. 5. P. 051609.

- 236. Hua H., Shin J., Kim J. Dynamics of a compound droplet in shear flow // Int. J. Heat Fluid Flow. — 2014. — Vol. 50. — P. 63 – 71.
- 237. Chen Y., Liu X., Zhao Y. Deformation dynamics of double emulsion droplet under shear // Appl. Phys. Lett. 2015. Vol. 106, no. 14. P. 141601.
- 238. Enhancing and suppressing effects of an inner droplet on deformation of a double emulsion droplet under shear / Y. Chen, X. Liu, C. Zhang, Y. Zhao // Lab Chip. 2015. Vol. 15. P. 1255–1261.
- 239. Ferrás L.L., Nóbrega J.M., Pinho F.T. Analytical solutions for Newtonian and inelastic non-Newtonian flows with wall slip // J. Non-Newtonian Fluid Mech. 2012. Vol. 175-176.
   P. 76 88.
- 240. Stone H. A., Leal L. G. The effects of surfactants on drop deformation and breakup // J. Fluid Mech. — 1990. — Vol. 220. — P. 161–186.
- 241. Кравченко И. В. Особенности структурирования слоистых и дисперсных систем несовместимых полимеров при сдвиговом течении. Численное моделирование. — Кандидатская диссертация на степень кандидата физико-математических наук. Москва. — 2010.
- 242. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques
  / H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, C. Fureby // Comput. Phys. 1998. Vol. 12, no. 6. —
  P. 620 631.
- 243. Moukalled F., Mangani L., Darwish M. The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab. Fluid Mechanics and Its Applications. — Springer International Publishing — 2015 — 791 p.
- 244. Кочин Н.Е., Кибель И.А., Розе Н.В. Теоретическая гидромеханика. Часть 2. М.:ФИЗМАТЛИТ 1963. 728 с.
- 245. Brackbill J. U., Kothe D. B., Zemach C. A continuum method for modeling surface tension // J. Comput. Phys. — 1992. — Vol. 100. — P. 335–354.
- 246. Unverdi S. O., Tryggvason G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multifluid flows // J. Comput. Phys. — 1992. — Vol. 100, no. 1. — P. 25–37.
- 247. Banerjee P.K., Banerjee P.K., Butterfield R. Boundary element methods in engineering science. McGraw Hill Book Co. (UK) 1981. 452 p.
- 248. An improved level set method for incompressible two-phase flows / M. Sussman, E. Fatemi,
  P. Smereka, S. Osher // Comput. Fluids. 1998. Vol. 27, no. 5. P. 663 680.
- 249. A Level Set Formulation of Eulerian Interface Capturing Methods for Incompressible Fluid Flows /Y.C. Chang, T.Y. Hou, B. Merriman, S. Osher // J. Comput. Phys. — 1996. — Vol. 124, no. 2. — P. 449 – 464.

- 250. Hirt C.W, Nichols B.D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries //
  J. Comput. Phys. 1981. Vol. 39, no. 1. P. 201 225.
- 251. Bui V.A. Dinh T.N. Sehgal B.R. Numerical simulation of interface phenomena using CIP and the level set front-capturing method // J. Comp. Fluid. Dynamics. 1999. Vol. 8, no. 1. P. 103 112.
- 252. Yabe T., Aoki T. A universal solver for hyperbolic equations by cubic-polynomial interpolation I. One-dimensional solver // Comput. Phys. Commun. — 1991. — Vol. 66, no. 2. — P. 219–232.
- 253. Yabe T., Xiao F., Utsumi T. The Constrained Interpolation Profile Method for Multiphase Analysis // J. Comput. Phys. — 2001. — Vol. 169, no. 2. — P. 556 – 593.
- 254. Sussman M., Smereka P., Osher S. A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two- Phase Flow // J. Comput. Phys. 1994. Vol. 114, no. 1. P. 146 159.
- 255. Jasak H. Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method With Applications to Fluid Flows — Ph.D. thesis, University of Zagreb. — 1996. — 394 p.
- Versteeg H.K., Malalasekera W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method. — Pearson Education — 2007. — 503 p.
- 257. Ferziger J.H., Peric M. Computational Methods for Fluid Dynamics. Springer Science & Business Media — 2012. — 364 p.
- 258. Белоцерковский О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред. М.:ФИЗМАТЛИТ 1984. 518с
- 259. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. Рипол Классик 1980. 616 с.
- 260. Issa R.I. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting // J. Comput. Phys. 1986. Vol. 62, no. 1. P. 40 65.
- 261. Harlow F. H., Welch J. E. Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface // Phys. Fluids. — 1965. — Vol. 8, no. 12. — P. 2182–2189.
- 262. Peaceman D. W., H. H. Rachford Jr. The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations // J. Soc. Ind. Appl. Math. 1955. Vol. 3, no. 1. P. 28–41.
- 263. Ильин В.П., Кузнецов Ю.И. Трехдиагональные матрицы и их приложения. М.:ФИЗМАТЛИТ 1985. 206 с.
- 264. Trottenberg U., Oosterlee C.W., Schüller A. Multigrid. Academic Press. Cornwall. 2001. 631 p.
- 265. Р.П. Федоренко. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений // Журн. вычисл. математики и мат. физики. — 1961. — Vol. 1, no. 5. — Р. 922–927.

- 266. Кравченко И.В., Патлажан С.А. Влияние пристенного скольжения на сдвиговое течение полимера в канале с волнообразной стенкой // Высокомол. Соед. Серия А. — 2009. — Vol. 51, no. 8. — Р. 1481–1487.
- 267. Droplet Breakup in Expansion-contraction Microchannels / P. Zhu, T. Kong, L. Lei et al. // Sci Rep. — 2016. — Vol. 6. — P. 21527.
- 268. Sibillo V., Pasquariello G., Simeone M., Guido S. Wall effects on drop deformation under simple shear flow // Soc. of Rheol. Meeting, MR:12. – 2005
- 269. Renardy Y. The effects of confinement and inertia on the production of droplets // Rheol. Acta. —2007. — Vol. 46, no. 4. — P. 521–529.
- 270. Вагнер С.А. Патлажан С.А. Особенности сдвигового течения в микроканалах с супергидрофобной стенкой // ДАН, Физическая Химия — 2014. — Vol. 459, no. 6. — Р. 707– 710.
- 271. Patlazhan S. A., Vagner S. A., Kravchenko I. V. Steady-state deformation behavior of confined composite droplets under shear flow // Phys. Rev. E. — 2015. — Vol. 91. — P. 063002 (1-9).
- 272. Vagner S. A., Patlazhan S. A. Hydrodynamics of Newtonian and power-law fluids in microchannel with superhydrophobic wall // J. Phys. Conf. Ser. — 2016. — Vol. 774 — P. 012027 (1-9).
- 273. Patlazhan S. A., Vagner S. Apparent slip of shear thinning fluid in a microchannel with a superhydrophobic wall // Phys. Rev. E. 2017. Vol. 96. P. 013104 (1-12).
- 274. Vagner S. A., Patlazhan S. A., Kravchenko I. V. Hydrodynamics of composite droplet with high-viscosity shell subjected to shear flow in the narrow channel // J. Phys. Conf. Ser. — 2018. — Vol. 946 — P. 012116 (1-7).
- 275. Vagner S. A., Patlazhan S. A., Serra C.A. Formation of microdroplets in Newtonian and shear thinning fluids flowing in coaxial capillaries. Numerical modeling // J. Phys. Conf. Ser. 2018. Vol. 946 P. 012117 (1-6).
- 276. Вагнер С.А., Кравченко И. В., Патлажан С. А. Гидродинамика композитной капли в условиях конфайнмента // сборник «Проблемы нелинейной динамики и физики конденсированных сред» / под ред. Л.И. Маневича, М.А. Мазо, В.В. Смирнова. – Москва.– 2013. – С. 307-313.
- 277. Вагнер С.А., Кравченко И.В., Патлажан С.А. Гидродинамика композитной капли с высоковязкой оболочкой при течении простого сдвига в узком канале // Сборник материалов V Конференции молодых ученых «Реология и физико-химическая механика гетерофазных систем». — Москва, 2017. — С. 59-63.

- 278. Патлажан С.А., Вагнер С.А., Кравченко И. В. Влияние конфайнмента на особенности течения ньютоновских и степенных жидкостей // Материалы 28 Симпозиума по реологии. — Москва, 2016. — С. 31-32.
- 279. Patlazhan S.A., Vagner S.A. Hydrodynamics of power-law fluids in microchannel with superhydrophobic wall // Book of Abstracts of XXXI International Conference on «Equation of State for Matter» — Kabardino-Balkaria, Russia, 2016. — P. 88.
- 280. Вагнер С.А., Патлажан С.А. Геликоидальное течение в микроканалах с супергидрофобной стенкой. Численное моделирование // Материалы 27 Симпозиума по реологии. — Тверь, 2016. — С. 20.
- 281. Patlazhan S.A., Vagner S.A., Kravchenko I.V. Deformation and breakup of composite droplets in the narrow channel under shear flow. Numerical simulation // Book of Abstracts of XXXII International Conference on «Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter» — Kabardino-Balkaria, Russia, 2017. — P. 318.
- 282. Vagner S.A., Vagner S.A., Patlazhan S.A. The generation of microdroplets in the co-flowing Newtonian and non-Newtonian fluids. Mathematical modeling / Book of Abstracts of XXXII International Conference on «Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter» — Kabardino-Balkaria, Russia, 2016. — P. 319.
- 283. Вагнер С.А., Кравченко И.В., Патлажан С.А. Особенности гидродинамического поведения композитной капли в узком канале при течении сдвига. Численное моделирование // Тезисы 6-ой Всероссийской Каргинской конференции «Полимеры 2014». — Москва, 2014 — С. 217.
- 284. Vagner, S.A., Patlazhan S.A. Shear-induced helical flow in a microchannel with superhydrophobic wall // Book of abstracts of XXIX International Conference on «Equation of State for Matter» — Kabardino-Balkaria, Russia, 2014. — P. 52.
- 285. Patlazhan S.A., Vagner S.A., Kravchenko I.V. Dynamics of composite droplets subjected to shear flow in a narrow channel // Book of abstracts 6th International conference on polymer behavior (ICPB6) — Vienna, Austria, 2014. — P.37
- 286. Vagner S.A., Patlazhan S.A., Kravchenko. I.V. The formation dynamics of composite droplets and Janus particles // Book of abstracts XXX International Conference on «Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter» — Kabardino-Balkaria, Russia, 2015. — P. 193.
- 287. Patlazhan S.A., Vagner S.A. Hydrodynamics of homogeneous and multiphase fluids in a narrow channel // Book of abstracts of XXX International Conference on «Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter» Kabardino-Balkaria, Russia, 2015. P. 193.
- 288. Вагнер, С.А. Патлажан С.А. Особенности течения степенной жидкости в канале с супергидрофобной стенкой. Численное моделирование // Сборник докладов IV Конфе-

ренции молодых учёных «Реология и физико-химическая механика гетерофазных систем». — Москва, 2015 — С. 19.

- 289. Вагнер С.А., Кравченко И.В., Патлажан С.А. Гидродинамика полимерных жидкостей в микроскопических каналах // Сборник тезисов VI Бакеевской всероссийской с международным участием школы для молодых ученых «Макромолекулярные нанообъекты и нанокомпозиты» — Москва,2016. — С. 34.
- 290. Вагнер С.А., Патлажан С.А. Кажущееся скольжение полимерных жидкостей в микроканалах с супергидрофобным покрытием. Численное моделирование // Сборник тезисов VII Всероссийской Каргинской конференция «Полимеры 2017» — Москва, 2017 — С. 52.