

Молекулярное моделирование взаимодействия малых шаровых и несферических частиц с рельефным телом

И.А. Амелюшкин^{1,2}, А.Л. Стасенко^{1,3}

¹Центральный аэрогидродинамический институт им. проф. Н.Е. Жуковского, Жуковского 1, Жуковский, Россия, 140180

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы. 1, стр. 2, Москва, Россия, 119991

³Московский физико-технический институт (государственный университет), Институтский пер. 9, Долгопрудный, Россия, 141701

Аннотация. Разработаны оригинальные математические модели, численные алгоритмы расчета и управления взаимодействием аэрозольных течений с твердыми телами различной степени гидрофобности. Поведение атомов твердого тела определяется температурой и физическими свойствами материала. Получены результаты параметрических исследований влияния рельефа и температуры на коэффициенты восстановления скорости частиц, диаграмму направленности отраженных частиц при ударе о рельефное тело. Параметры удара капель соответствуют числам Вебера в реальных условиях. Результаты сопоставлены с данными других исследователей. Получены значения коэффициентов взаимодействия частиц воды с рельефным твердым телом в предположении, что характерные размеры рельефа поверхности значительно превышают размеры молекул. Помимо геометрических параметров рельефа обтекаемого тела на прилипание потока влияет коэффициент растекания – отношение сил адгезии к когезии, который связывает характерные значения энергий взаимодействия молекул с краевым углом смачивания. На основании полученных в работе экспериментальных данных созданы оригинальные математические модели молекулярных процессов, сопровождающих кристаллизацию переохлажденных метастабильных капель в задачах противодействия обледенению летательных аппаратов.

1. Введение

Моделирование управления взаимодействием потока с обтекаемой поверхностью представляет большой интерес в различных областях науки и техники. Одной из актуальных физических проблем авиации является проблема обледенения летательного аппарата в капельно-кристаллических облаках. Исследования, проведенные в течение почти столетия [1–3], основывались, как правило, на экспериментальных данных и феноменологическом описании процесса в рамках механики сплошных сред. Однако для успешного решения проблемы необходимо разработать математические модели и численные алгоритмы, учитывающие физические процессы, сопровождающие обледенение, на фундаментальном уровне. В этом отношении наиболее важным аспектом является взаимодействие отдельных (но состоящих из множества молекул) частиц и капель аэрозольного потока с шероховатым твердым телом [4].

Основные сложности моделирования связаны с тем, что для математического описания процесса столкновения требуется информация о таких макрохарактеристиках вещества, как вязкость, теплопроводность, предел текучести, модуль упругости и ряд других, которые, как правило, измеряются в статических условиях и не всегда пригодны для описания быстропротекающих ударных взаимодействий. В этом плане естественно рассмотрение этих явлений на более высоком уровне детализации. Отметим, что реальная поверхность летательного аппарата практически всегда шероховата. Так, в авиационной технике средняя шероховатость поверхности имеет порядок $h \sim 1$ мкм.

В [5] приведены результаты расчетов методом молекулярной динамики поведения капель на рельефном теле, поверхность которого обладает гидрофобными свойствами. Для грубых гидрофобных поверхностей отсутствует гистерезис контактного угла капли из-за интенсивных тепловых флуктуаций, которые возникают близи границы твердое тело-жидкость, на молекулярном уровне. В работе [6] представлены результаты молекулярно-динамического моделирования пограничного слоя однокомпонентной жидкости на волнистой поверхности с использованием упрощенного расчета с помощью известного термостата Ланжевена и искусственного коэффициента трения. Взаимодействие твердых микрочастиц с шероховатой поверхностью исследовалось ранее теоретически и экспериментально [7, 8].

Целью настоящей работы является создание алгоритмов, позволяющих рассчитывать взаимодействие гетерогенного потока с наноструктурированными поверхностями твердых веществ из различных материалов, процессов смачивания и движения частиц на поверхности в потоке воздуха. Специфика рассматриваемых проблем состоит в необходимости описания обтекания гидротермодинамики и массообмена воздушно-капельно-кристаллического потока с нанорельефной поверхностью твердого тела в сдвиговом потоке несущего газа.

Отметим, что реальный газ состоит не только из молекул, но содержит также их агломераты – молекулярные кластеры (ди-, три-, ..., N -меры), причем их концентрация и количество составляющих их молекул N растет с понижением температуры. Это касается в особенности паров воды, находящихся в предконденсационном состоянии; их кластеры, обтекающие вместе с несущим воздухом элементы конструкции летательного аппарата, могут участвовать в «подготовке» последних к обледенению.

Под наночастицами [9, 10] обычно понимают частицы размером от 1 до 100 нанометров. В тоже время под кластерами понимают скопления молекул, а под большими молекулярными кластерами [11] скопления молекул, число которых 100–1000 молекул.

Между объектами, входящих в понятие кластер и объектами, входящих в понятие наночастица, есть пересечение, т.к. кластер в 1000 молекул может заметно превышать минимальный размер наночастицы, т.е. 1 нанометр. Так, кластер воды из $N = 333$ молекул (999 атомов) имеет размер порядка $D = 2.3 \sqrt{\frac{3\mu_{\text{H}_2\text{O}}N}{4\pi\rho_l N_A}} \cong 2.7$ нм, где $\mu_{\text{H}_2\text{O}}$ – молярная масса воды, ρ_l – ее

плотность, N_A – число Авогадро. Хотя метод молекулярной динамики применим для описания поведения как отдельных молекул, так и их объединений – молекулярных кластеров, в настоящей работе метод молекулярной динамики применяется к описанию поведения частиц произвольного размера при выполнении следующих условий:

1. Число молекул в частице $\gg 10$;
2. Размер частицы значительно превышает толщину δ_σ поверхностного слоя, в котором действуют поверхностные силы.
3. При выполнении первых двух условий и основных критериев подобия (число Вебера $We = D\rho_l V^2 / \sigma_l$ и капиллярности) результаты, полученные для наночастиц, справедливы для микро- и макро частиц, здесь D – диаметр капли, σ_l – коэффициент поверхностного натяжения, V – скорость удара капли.
4. Взаимодействие молекул парное, потенциал симметричный, не учитывается распределение зарядов, но обеспечивается соответствие упругих, гидродинамических и термодинамических свойств дисперсной фазы аэрозольного потока.

Таким образом, под наночастицами подразумеваются молекулярные кластеры размером до 100 нанометров, в которых число молекул $N \gg 10$. Под частицами аэрозольного потока подразумеваются твердые тела, размеры которых на порядки превосходят размеры молекул.

Строго говоря, молекулярное моделирование удара капель и кристаллов льда требует учета непарности потенциала межмолекулярного взаимодействия, зависимости его от ориентации и образования водородных связей, не говоря о более тонких физических эффектах – таких как квантово-химические явления и электризация. Необходимость развития алгоритмов численного метода вызвана тем, что моделирование описанных выше явлений даже для малых молекулярных соединений, например, для исследования удара капли радиусом в несколько нанометров, требует колоссальных вычислительных затрат, не говоря о корректности постановки задачи, в которой могут иметь место множество неустойчивых конфигураций молекулярных объединений – кластеров.

В настоящей работе развит метод, позволяющий моделировать гидромеханические свойства жидкости со свободными границами, используя осесимметричные потенциалы, параметры которых определены из макроскопических табличных значений параметров, характеризующих гидродинамические свойства жидкости. В отличие от SPH (smoothed particle hydrodynamics), используемый в работе метод учитывает свободномолекулярные явления, реологические свойства жидкости, тепломассообмен на межфазных границах, особенности граничных условий на обтекаемом теле, обладающем гидрофобными свойствами, зависимость коэффициента поверхностного натяжения от радиуса кривизны межфазной границы жидкости и ряд других явлений. При этом, в отличие от метода молекулярной динамики, пренебрегается атомарной структурой молекул воды, т.е. асимметрией и непарностью потенциалов межмолекулярного взаимодействия, а также квантово-химическими явлениями. Такое пренебрежение вполне оправдано в задачах молекулярного моделирования макроскопических явлений, т.к. позволяет с высокой точностью моделировать гидродинамические процессы в движущейся жидкости.

Таблица 1. параметры уравнения Ван-дер-Ваальса (ВдВ) и потенциала парного взаимодействия молекул Леннарда-Джонса (ЛД).

Газ	Параметры газа ВдВ		Параметры потенциала ЛД	
	a Па·м ⁶ /моль ²	b , 10 ⁻⁵ м ³ /моль	σ , Å	ϵ / k_B , К
N ₂	0.1408	3.913	2.80	260
O ₂	0.1378	3.183	2.61	313
H ₂ O	0.5536	3.049	2.58	1310
Воздух	0.141	3.771	–	–

Таблица 2. Параметры потенциалов (уравнение (1)).

Взаимодействующие элементы	A/ϵ_0	ξ	χ	p	q
H ₂ O–H ₂ O	1	1	1	12	6
H ₂ O–Al	AK	1.19	1	12	6
H ₂ O–H ₂ O(<i>w</i>)	2.53	1	5/33	9	3
H ₂ O–Al(<i>w</i>)	2.99 AK	1.19	5/33	9	3
H ₂ O(<i>w</i>)–Al(<i>w</i>)	13AK · S, нм ²	1.19	5/132	8	2

2. Математическая модель и численный метод

В рассматриваемом подходе важную роль играют параметры межмолекулярного взаимодействия, которые могут быть получены как на основе квантовомеханических расчетов, так и из уравнения состояния реального газа, например, Ван-дер-Ваальса:

$$(P - a\rho/V\mu) (1 - b\rho/\mu) = \rho R_0 T / \mu, \quad (1)$$

где

$$a = -2\pi N_A^2 \int_d^{\infty} U(r)r^2 dr = \pi N_A^2 \frac{10\sqrt{2}}{9} \varepsilon \sigma_0^3 = N_A \frac{5}{3} b \varepsilon, \quad (2)$$

$$b = N_A \frac{2}{3} \pi d^3, \quad \sigma_0 = \frac{d}{\sqrt[6]{2}} = \frac{1}{\sqrt[6]{2}} \sqrt[3]{\frac{3b}{2\pi N_A}}. \quad (3)$$

Здесь предполагается, что потенциал взаимодействия молекул сферически симметричный и описывается законом Леннарда-Джонса (см., напр., [13]), параметры которого связаны с константами уравнения состояния реального газа Ван-дер-Ваальса. Сферическая симметрия потенциала существенно упрощает молекулярное моделирование микро- и макроскопических аэрогидродинамических явлений. В приведенных выше формулах μ – молярная масса, d – «диаметр» молекулы.

В более общем случае сферически симметричный потенциал имеет вид:

$$U(r) = A \left(\chi \left(\frac{\sigma}{r} \right)^p - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^q \right), \quad (4)$$

В таблицах 1 и 2 даны параметры уравнения состояния газа Ван-дер-Ваальса и связанные с ними параметры парного взаимодействия веществ A , p , q и χ ; $\sigma_0 = \sigma_{H_2O} \cong 2.6 \text{ \AA}$ – характерное расстояние [3], при котором потенциал парного взаимодействия обращается в нуль, R_0 – универсальная газовая постоянная.

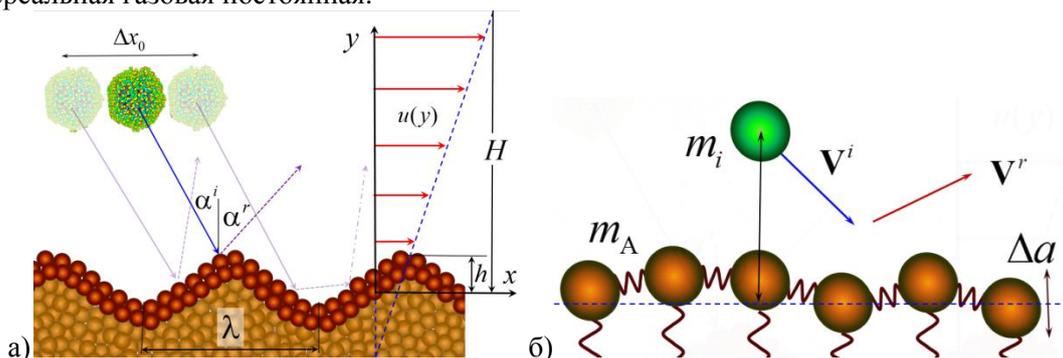


Рисунок 1. а) схема взаимодействия частиц с рельефным телом на дне пограничного слоя реального газа; б) схема взаимодействия молекул потока m_i с атомами твердого тела m_A . Углы α^i , α^r – между вектором скорости частицы и нормалью к средней поверхности тела.

Отметим, что используемый в настоящей работе подход позволяет обойти трудности учета непарного характера взаимодействия молекул, а также угловой зависимости межмолекулярных сил, для определения которых, строго говоря, необходимы методы квантовой химии решения уравнения Шредингера для многоэлектронной системы атомов. Этот подход позволяет рассчитывать, как континуальный, так и свободномолекулярный режимы взаимодействия частиц и капель с твердым телом, учитывая ряд физических явлений: фазовые переходы, зависимость коэффициента поверхностного натяжения от кривизны межфазной границы, процессы дробления, коагуляции и теплообмена с рельефным телом, атомы которого находятся в тепловом движении. При этом достоверность полученных в настоящей работе результатов обоснована сравнением с теоретическими и с экспериментальными оценками других исследователей, описанными в [7, 12]. Развитые в настоящей работе численные алгоритмы и программное обеспечение позволяют использовать различные потенциалы взаимодействия молекул и схемы интегрирования уравнений движения.

В настоящей работе в предположении о потенциальной природе взаимодействия между атомами или молекулами протестированы различные схемы интегрирования уравнений молекулярной динамики [13].

Предполагается, что частица аэрозольного потока, соударяющаяся с поверхностью твердого тела, ускорена обтекающим его воздухом, представляющим собой смесь азота (79 %) и

кислорода (21 %) с параметрами газа Ван-дер-Ваальса, которые вычислялись по правилу смешения Лоренца-Бертло:

$$a = \left(\sum \alpha_j \mu_j \right)^2 \cdot \left(\sum \frac{\alpha_j}{\mu_j} \sqrt{a_j} \right)^2; \quad b = \left(\sum \alpha_j \mu_j \right) \cdot \sum \frac{\alpha_j}{\mu_j} b_j; \quad R = R_0 \sum \frac{\alpha_j}{\mu_j} \quad (5)$$

Отметим, что наночастицы и тем более молекулярные кластеры имеют ничтожно малые числа Стокса и могут попасть на поверхность обтекаемого тела лишь благодаря тепловому движению, турбулентных пульсаций, несферичности формы и ряда других специфических процессов [3] (напр., электромагнитные явления). Тем не менее для расчета коэффициентов восстановления скорости от нанорельефной поверхности предполагается правомочным переносить результаты моделирования наночастиц на случай микро- и макрочастиц при выполнении описанных выше четырех условий. Также следует отметить незначительное влияние воздуха (молекул азота и кислорода) на движение наночастицы, т.к. плотность газа на три порядка меньше плотности частиц, а характерное время расчета несущественно превосходит отношение диаметра частицы к скорости ее удара о поверхность обтекаемого тела.

Вещество стенки описывается параметром, введенным ранее [12],

$$AK = \varepsilon_{w-m} / \varepsilon_{m-m} \approx 0.5 (1 + \cos \theta_0) \quad (6)$$

– коэффициентом растекания, который можно рассматривать как отношение энергии ε_{w-m} взаимодействия (A – адгезия) между молекулой потока (индекс m) и поверхностью атома (индекс w) к характерной энергии ε_{m-m} взаимодействия молекул потока друг с другом (K – когезия). Этот параметр характеризует свойства материала твердого тела, определяющие интенсивность прилипания к нему жидкости. Рассматриваются взаимодействия молекул, принадлежащих ко всем трем фазовым состояниям веществ: газа, налетающей частицы, жидкой или твердой, и поверхности обтекаемого тела.

В настоящей работе построена модель взаимодействия молекул потока с атомами твердого тела, находящимися в тепловом движении, в зависимости от температуры и физических свойств материала, определяемых температурой Дебая и молярной массой атомов, а также размером элементарной ячейки кристаллической решетки твердого тела.

С использованием выражения для потенциала взаимодействия, амплитуды колебаний атомов решетки твердого тела Δa , теплопроводности и теплоемкости веществ, в настоящей работе, получены значения коэффициентов взаимодействия молекул воды с твердым телом в предположении, что характерные размеры рельефа поверхности λ , h (рис. 1 а) значительно превышают размеры молекул. Исходя из закона изменения импульса, выражение для скорости отраженных (верхний индекс r – reflected) от поверхности тела молекул частицы в зависимости от их начальной (верхний индекс i – incident) скорости можно получить в следующем виде:

$$\mathbf{V}^r = \frac{\mathbf{V}^i (1 - \mu_A / \mu) + (2 / \sqrt{3}) (\mu_A / \mu) (\mathbf{n} + 2\boldsymbol{\tau}) \Delta a \omega \sin \omega t}{1 + \mu_A / \mu}. \quad (7)$$

Здесь \mathbf{n} и $\boldsymbol{\tau}$ – орты нормали и касательной. Для взаимодействия воды с алюминиевой поверхностью имеем $\mathbf{V}^r = -0.2\mathbf{V}^i + 0.693(\mathbf{n} + 2\boldsymbol{\tau}) \Delta a \omega \sin \omega t$, $\omega = \frac{\sqrt{3R_0 T / \mu_A}}{\Delta a \sqrt{2}}$ – циклическая

частота колебаний атомов кристаллической решетки обтекаемого тела. Отметим, что второе слагаемое в числителе выражения для \mathbf{V}^r содержит одну степень свободы колебаний по нормали и две – по касательной к поверхности, описывающие вклад колебаний атомов кристаллической решетки рельефного тела (рис. 1 б) по направлениям колебаний поверхности. Индекс A означает атом твердого тела. Амплитуда колебаний атомов поверхности Δa в зависимости от температуры T определяется известным выражением из физики твердого тела:

$$\Delta a^2(T) = \frac{9\hbar^2}{4m_A k_B \theta_D} \left(1 + 4 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^2 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x dx}{e^x - 1} \right). \quad (8)$$

Здесь θ_D – температура Дебая материала твердого тела, k_B , \hbar – постоянные Больцмана и Планка, соответственно. Достоинством такой модели является возможность учета тепловых колебаний атомов и более приближенное к реальности (по сравнению с традиционными моделями) описание взаимодействия молекул потока с твердым телом. К её недостаткам следует отнести большие вычислительные затраты при расчете потоков в крупной расчетной области. Так, например, при моделировании двух слоев поверхности обтекаемого тела (алюминий) размером 100×100 нм² требуется порядка 10^5 атомов, с которыми взаимодействуют молекулы потока. С увеличением шероховатости эта цифра значительно увеличивается.

Принятая в настоящей работе расчетная область (рис. 1 а) – параллелепипед $x_{\max}y_{\max}z_{\max} = LHD$, длина расчетной области $L = 2H$, ширина расчетной области $D = H = 20 \div 100$ нм. Граничные условия в плоскостях $z = 0$ и $z = D$ являются периодическими с характерным периодом шероховатости λ . В плоскости $x = 0$ задается массовый поток $q_x = \rho V_x$. По мере прохождения плоскостей $x = L$ и $y = H$ молекулы покидают расчетную область. В этом случае в плоскостях $x = 0$, $x = L$ и $y = H$ задаются дополнительные плотности потоков, обусловленные тепловым движением молекул $q_x = q_y = \rho \langle V \rangle / 2\sqrt{3} = \rho \sqrt{RT} / 2$. Здесь $\langle V \rangle$ – средняя скорость теплового движения молекул газа.

Нижней границей расчетной области (рис. 1а) является шероховатая поверхность обтекаемого тела, взаимодействие с которой описывается математическими моделями, определенными далее. В этой области молекулы воды и воздуха взаимодействуют с атомами твердого тела с учетом их физических свойств и температуры. Тепловые скорости всех молекул газа и частиц определяются в соответствии с максвелловским распределением скоростей.

Развиваемый в настоящей работе подход позволяет учесть возможность прилипания молекул к поверхности обтекаемого тела для различных режимов взаимодействия, например, образования инея и конденсации.

В случае плоской поверхности и в предположении, что взаимодействие молекулы воды с атомом описывается потенциалом Леннарда-Джонса с параметрами $\epsilon_w = AK \cdot \epsilon_{H_2O}$ (индекс $w \equiv$ wall), выражение для потенциала взаимодействия между молекулой потока и поверхностью обтекаемого тела имеет следующий вид [12]

$$U(h) = \frac{8}{15} \frac{\rho_w}{m_A} \pi \epsilon_w \sigma_w^3 \left(\frac{5}{33} \left(\frac{\sigma_w}{h} \right)^9 - \left(\frac{\sigma_w}{h} \right)^3 \right). \quad (9)$$

На основании квантово-химических оценок, $\sigma_w \approx \xi \sigma_0$ (таблица 2). Для оценки плотности энергии взаимодействия частиц, размер которых значительно больше размера молекулы, используем модель двух плоских поверхностей – твердого тела и «подножия» частицы. Заметим, что выражение для поверхностной плотности сил P взаимодействия между пластиной заданного материала и плоской поверхностью воды имеет следующий вид:

$$P = -\frac{1}{S} \frac{\rho}{m_m} \frac{\partial}{\partial h} Y(h) = B \left(\frac{5}{33} \left(\frac{\xi \sigma_0}{h} \right)^9 - \left(\frac{\xi \sigma_0}{h} \right)^3 \right), \quad (10)$$

$$B = \frac{8}{15} \frac{\rho_w \rho \pi \xi^3}{m_A m_m} AK \epsilon_0 \sigma_0^3 \quad (11)$$

$$\frac{Y(h)}{S} = \frac{\rho}{m_m} \int_{y=h}^{\infty} U(y) dy = \frac{B \sigma_0}{2} \left(\frac{5}{132} \left(\frac{\xi \sigma_0}{h} \right)^8 - \left(\frac{\xi \sigma_0}{h} \right)^2 \right). \quad (12)$$

Из последних соотношений определяется равновесное расстояние между двумя поверхностями при отсутствии внешних сил: $h_* = \xi \sigma_0 (5/33)^{1/6}$. Здесь ξ – безразмерная величина, равная отношению характерной длины взаимодействия молекулы обтекаемого тела с молекулой воды, к характерной длине взаимодействия молекул воды друг с другом. Для алюминия $\xi \approx 1.19$.

3. Результаты численных исследований

Ниже даны иллюстрации результатов расчетов. Во всех расчетах угол падения частицы $\alpha_i = \pi/4$, модуль ее скорости $|V| = 50$ м/с; число молекул в частице $N = 650, 1100$ и 4660 ; твердое тело – алюминий. Согласно [14], угол θ_0 смачивания водой гладкой поверхности алюминия приблизительно равен 110 град. Параметры газового потока определялись температурой и атмосферным давлением, используемый в работе численный алгоритм и программа ЭВМ позволяют определять параметры состояния пограничного слоя в расчетных областях, размеры которых значительно превышают длину свободного пробега молекул.

Понятно, что чем мельче частица, тем скорее она тормозится в пограничном слое на обтекаемом теле, но тем большую роль в ее динамике играют тепловые флуктуации (броуновское движение). Если для молекулы воды средняя скорость теплового движения около 600 м/с, то для рассмотренных кластеров ее значения составляют приблизительно 25, 20 и 10 м/с. Таким образом, несмотря на быструю релаксацию мелких частиц вблизи поверхности твердого тела, суммарная скорость их соударения с твердым телом может достигать десятков метров в секунду.

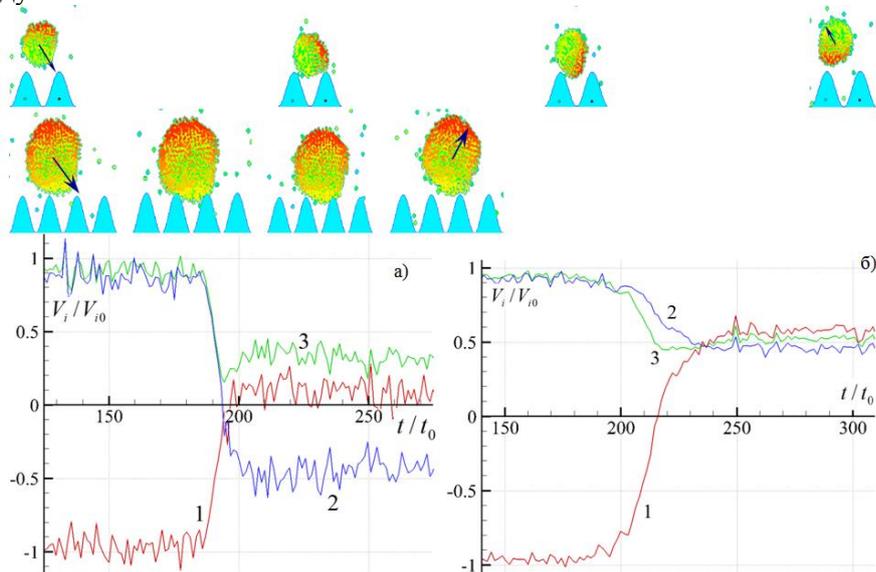


Рисунок 2. Временной ход компонент скорости частиц, соударяющихся с волнистой поверхностью: а) $N \approx 650$, $\Delta x_0/\sigma_0 = 0.05$, б) $N \approx 2500$, $\Delta x_0/\sigma_0 = 0.03$. Компоненты скорости частиц в процессе соударения с поверхностью отнесены к их начальным значениям: 1 – нормальная компонента, 2 – тангенциальная компонента, 3 – модуль скорости.

На рис. 2 показаны временные зависимости компонент скорости частиц в процессе их соударения с волнистым твердым телом. По оси абсцисс отложено значение безразмерного времени t/t_0 ($t_0 = \sigma_{H_2O} \sqrt{m_{H_2O}/\epsilon_{H_2O}}$). Массы двух рассмотренных частиц отличаются почти в четыре раза, характерные размеры – в полтора. Видна деформация и положение частиц для различных этапов процесса столкновения – подлет, взаимодействие с твердым телом для одного и того же прицельного параметра, отлет; стрелки соответствуют вектору скорости центра масс частицы; для меньшей частицы видно возникновение отрицательного значения $V_t(t)$, в отличие от большей. Из рисунка видно, что место попадания частицы на поверхность также влияет на знак касательной компоненты скорости отраженной частицы. В работе [7] для случая специально подготовленной линейной периодической шероховатости также получены отрицательные значения a_t .

На рис. 3 показаны зависимости коэффициентов восстановления скорости (отношения компонент скорости после удара к соответствующему значению до удара) частиц от относительных значений параметра шероховатости поверхности твердого тела λ/σ_0 . Соединяющие их линии проведены лишь для более четкой привязки к одному из двух семейств

точек; на самом деле между каждой их парой следовало бы указать значения коэффициентов еще при нескольких значениях λ/σ_0 . Однако и при таком построении видна тенденция периодичности зависимостей функций a_n и a_τ от шероховатости твердого тела. Коэффициенты восстановления скорости частиц при их ударе о поверхность оценены для частиц радиусом $a_p=3.2$ нм и 20 мкм также на основе выражений, приведённых в [13] для плоской поверхности при одинаковых значениях числа Вебера для частиц и отмечены горизонтальными точечными прямыми. В расчётах были использованы параметры, которые приведены в таблице 3.

Таблица 3. Свойства кристаллических решеток Al и H₂O при температуре -10 °C.

Материал	ρ , кг/м ³	μ , г/моль	m	a_c , Å	E , ГПа	θ_D , К	Δa , Å	ω , 10 ¹² с ⁻¹
Al	2700	27	4	4.05	68	394	0.14	48
H ₂ O (лед)	917	18	2	2.85	5	192	0.51	17

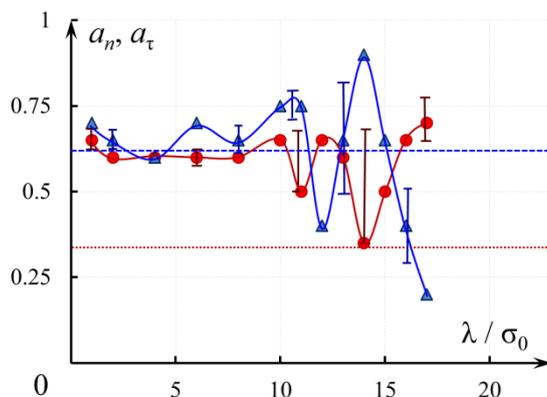


Рисунок 3. Зависимость коэффициентов восстановления компонент скорости частиц на поверхности с ($h = 1$ нм) при различных значениях параметра шероховатости поверхности; кружки – нормальная компонента скорости, треугольники – тангенциальная.

Развитые алгоритмы можно использовать как для капли, так и для кристалла льда, выражая при этом силу упругости через суммарную силу межмолекулярного взаимодействия.

Вопрос о фазовом состоянии рассмотренных частиц нетривиален. Еще М. Фарадей предполагал (1842) существование жидких слоев на поверхности кристалла льда ниже температуры замерзания. В недавней работе [17] существование таких слоев подтверждено в диапазоне температур от -90 до -1 °C. Ситуация аналогична отсутствию резкой границы между жидкостью и паром [18]. Однако, поскольку размеры рассмотренных кластеров имеют порядок толщины переходных межфазных слоев, в настоящей работе такие молекулярные образования называются просто частицами.

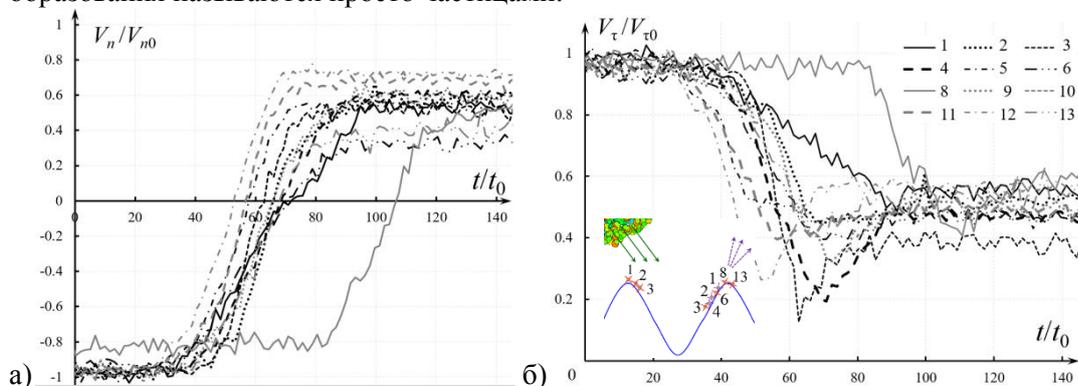


Рисунок 4. Изменение с течением времени а) нормальной и б) касательной компонент скорости частиц воды с $N \approx 2500$ молекул при их ударе о волнистую поверхность при различных значениях прицельного параметра: номера кривых соответствуют значению Δx_0 , отнесенному к $0.01\sigma_0$, $\lambda = 8\sigma_0$; в) расположение точек соударения частиц с поверхностью.

На рис. 4 показаны временные зависимости компонент скорости частиц, соударяющихся с поверхностью волнистого тела при различных прицельных параметрах Δx_0 и соответствующие точки соударения. Видно, что большая часть кривых группируется вокруг некоей средней; отдельные кривые, соответствующим точкам соударения 1 и 8, значительно отличаются от этой средней как вследствие больших потерь поступательной кинетической энергии на вращение (кривая 1), так и больших значений времени, связанного с пролетом падающей частицы вглубь ущелья между хребтами шероховатости (кривая 8), $\Delta x_0 = 0.01\sigma_0$. Отметим возникновение минимума в зависимостях $V_x(t)$.

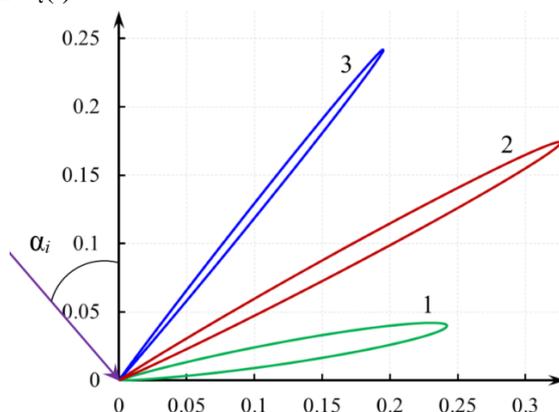


Рисунок 5. Сечение диаграммы направленности отраженных от поверхности рельефного тела частиц: 1 – $N=650$, $\lambda/\sigma_0 = 10$; 2 – $N=1100$, $\lambda/\sigma_0 = 2$; 3 – $N=4600$, $\lambda/\sigma_0 = 4$.

На рис. 5 показаны индикатрисы отражения наночастиц воды от поверхности твёрдого тела, представляющей собой линейную периодическую шероховатость, заданную гармонической функцией с амплитудой h и периодом λ . Угловая ширина индикатрис отражения определяется прицельной длиной Δx_0 (рис. 1). Поскольку колебания атомов твёрдого тела происходят вдоль всех трех осей, диаграмма направленности является, строго говоря, трехмерной фигурой. На рисунках представлены ее сечения трехмерной плоскостью x, y .

4. Заключение и обсуждение

Разработаны математические модели, численные алгоритмы и программы для расчета взаимодействия частиц дисперсного потока и молекул газовой фазы этого потока, несущей частицы, с наноструктурированной поверхностью твердого тела с заданными физическими и геометрическими свойствами. Эти модели позволяют формулировать граничные условия на обтекаемой поверхности, оптимизировать взаимодействие потока с телом, рассчитывать режимы столкновения частиц и капель с твердым телом, имитировать смачивание и движение капель по поверхности, а также могут служить основой для решения задач моделирования и управления пристенными турбулентными течениями.

Использованный метод молекулярной динамики является промежуточным между методами квантовой химии и континуальным подходом. При анализе нестационарных процессов (в частности, ударных) он позволяет избежать необходимость использования макроскопических физико-механических характеристик веществ, полученных в квазистатических условиях. Принятое в настоящей работе упрощающее предположение о сферической симметрии атомно-молекулярных потенциалов оправдано масштабом исследуемого явления (характерный размер частицы значительно превосходит расстояние межмолекулярного взаимодействия).

5. Благодарности

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ (проект № 18-31-00485), а также проекта MUSIC-haic программы HORIZON 2020 ЕС при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках федеральной целевой программы «Исследования

и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технического комплекса России на 2014–2020 годы, уникальный идентификатор проекта RFMEFI62818X0010».

6. Литература

- [1] Yarin, A.L. Drop impact dynamics: splashing, spreading, receding, bouncing // *Annu. Rev. Fluid Mech.* – 2006. – Vol. 38. – P. 159-192.
- [2] Tsai, P. Microscopic structure influencing microscopic splash at high Weber number / P. Tsai, M.H. Henrix, R.R. Dijkstra, L. Shui, D. Lohse // *Soft Matter.* – 2011. – Vol. 7(24). – P. 11325-11333.
- [3] Amelyushkin, I.A. Interaction of supercooled droplets and nonspherical ice crystals with a solid body in a mixed cloud / I.A. Amelyushkin, A.L. Stasenko // *CEAS Aeronautics Journal.* – 2018. – Vol. 9(4). – P. 711-720.
- [4] Макаров, Г.Н. Экстремальные процессы в кластерах при столкновении с твердой поверхностью // *УФН.* – 2006. – Т. 176, № 2. – С. 121-174.
- [5] Yang, C. Nanodroplets on rough hydrophilic and hydrophobic surfaces / C. Yang, U. Tartaglino, B.N.J. Persson // *Eur. Phys. J.* – 2008. – Vol. E 25. – P. 139-152.
- [6] Priezjev, N.V. Collective nonaffine displacements in amorphous materials during large-amplitude oscillatory shear // *Physical Review.* – 2017. – Vol. E95. – P. 023002-1-7.
- [7] Лашков, В.А. Взаимодействие твердых частиц газозвеси с поверхностью сложного профиля // *Вестник С.-Петерб. ун-та. Сер. 1.* – 2008. – № 4. – С. 125-130.
- [8] Панфилов, С.В. Рассеяние несферических частиц примеси при отскоке от гладкой и шероховатой поверхностей в высокоскоростном потоке газозвеси / С.В. Панфилов, Ю.М. Циркунов // *Прикладная механика и техническая физика.* – 2008. – Т. 49, № 2(288). – С. 222-230.
- [9] ISO/TS 27687:2008. Nanotechnologies – Terminology and definitions for nano-objects – Nanoparticle, nanofibre and nanoplate.
- [10] Batista, C.A.S. Nonadditivity of nanoparticle interactions / C.A.S. Batista, R.G. Larson, N.A. Kotov // *Science.* – 2015 – Vol. 350(6257). – P. 1242477. DOI: 10.1126/science.1242477.
- [11] Rattunde, O. Clusterphysik / O. Rattunde, H. Haberland // *Lexikon der Physik*, 2017.
- [12] Амелюшкин, И.А. Взаимодействие нанокнопель аэрозольного потока с твердым телом / И.А. Амелюшкин, А.Л. Стасенко // *Наноструктуры. Математическая физика и моделирование.* – 2016. – Т. 14, № 2. – С. 5-23.
- [13] Allen, M. *Computer Simulation of Liquids* / M.Allen, D. Tildesley – London: Clarendon Press, 1987. – 385 p.
- [14] Romanszki, L. A comparison of contact angle measurement results obtained on bare, treated, and coated alloy samples by both dynamic sessile drop and Wilhelmy method / L. Romanszki, M. Mohos, J. Telegdi, Zs. Keresztes, L. Nyiko // *Periodica Polytechnica. Chemical Engineering.* – 2014. – Vol. 58. – P. 53-59. DOI:10.3311/PPch.7188.
- [15] Ерофеев, А.И. Влияние шероховатости поверхности на рассеяние свободномолекулярного потока газа твердыми телами / А.И. Ерофеев, А.П. Никифоров, С.Б. Нестеров, Р.А. Нижметдинова // *Ученые записки ЦАГИ.* – 2016. – Т. XLVII, №. 4. – С. 12–27.
- [16] Амелюшкин, И.А. Взаимодействие потока газа, несущего несферические микрочастицы, с поперечным цилиндром / И.А. Амелюшкин, А.Л. Стасенко // *Инженерно-физический журнал.* – 2018. – Т. 91, № 2. – С. 307-318.
- [17] Asakava, H. Two types of quasiliquid crystals are formed kinetically / H. Asakava, G. Sazaki, K. Nagashima, S. Nakatsubo, Y. Furukava // *PNAS.* – 2016. – Vol. 113(7). – P. 1749-1753.
- [18] Радченко, И.В. *Молекулярная физика* – М.: Наука, 1965. – 480 с.
- [19] Гиршфельдер, Дж. *Молекулярная теория газов и жидкостей* / Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд – М.: изд-во ИЛ, 1961. – 928 с.
- [20] Poole, P.H. Phase behavior of metastable water / P.H. Poole, F. Sciortino, U. Essman, H.E. Stanley // *Nature.* – 1992. – Vol. 360(6402). – P. 324-328.

Molecular modeling of the interaction of small spherical and nonspherical particles with a solid body

I.A. Amelyushkin^{1,2}, A.L. Stasenko^{1,3}

¹Central Aerohydrodynamic Institute, Zhukovsky street 1, Zhukovsky, Russia, 140180

²Lomonosov Moscow State University, Lenin's mountains 1, p. 2, Moscow, Russia, 119991

³Moscow Institute of Physics and Technology (State University), Institutskii per. 9, Dolgoprudny, Russia, 141701

Abstract. Controlling the interaction of small particles of aerosol flows with a solid body is of interest in a wide range of practical applications. Original mathematical models, numerical algorithms for calculating and controlling the interaction of aerosol flows with solids of varying degrees of hydrophobicity have been developed. The behavior of solid atoms is determined by the Debye temperature, molar mass, and temperature. The results of parametric studies of the effect of relief and temperature on the recovery coefficients of particle velocity, the pattern of reflected particles when they impinge a relief body are obtained. The results are compared with data from other researchers. The values of the coefficients of the interaction of water particles with a corrugated solid are obtained under the assumption that the characteristic dimensions of the surface relief λ , h (Fig.) significantly exceed sizes of the molecules.