

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРООСМОСА НА ГРАНИЦЕ ЖИДКОСТЬ-ГАЗ

А.С. Потапов^{1,2}, А.В. Беляев^{1,2}, В.А. Лобаскин³, О.И. Виноградова^{1,2}

¹МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический факультет,
Москва. 119992, Ленинские горы, д.1 стр.2;

²ИФХЭ РАН, 119071, Москва, Ленинский проспект, д.31, корп. 4;

³School of Physics at University College Dublin (UCD), Belfield, Dublin 4, Ireland.
e-mail: alexandrows@mail.ru

На границе жидкость-газ всегда присутствует избыточный поверхностный заряд, что было экспериментально доказано в [1]. При электроосмотическом течении жидкости адсорбированный поверхностный заряд подвижен. Её динамика описывается уравнением Стокса: $\eta \nabla^2 \vec{U} = -\rho_e \vec{E}$. Нами были предложены граничное условие для описания подвижности заряда: $\eta \partial_y U - q_H E_0 = 0$, которое показывает, что при адсорбции зарядов на границе сред, в присутствии внешнего поля, на эту границу будет действовать дополнительная электростатическая сила, которой нельзя пренебречь.

Для проверки данного предположения была смоделирована система, состоящая из твердого нижнего слоя, и верхнего газового слоя, между которыми помещен электролит, с помощью пакета программ ESPResSo (Extensible Simulation Package for Research on Soft matter) и компьютерного термостата Диссипативной Динамики Частиц на суперкомпьютере «Чебышев» МГУ.

Полученные в компьютерном эксперименте результаты профиля скорости жидкости были сопоставлены с теоретическими профилями скорости. На рисунке 1 видно, что теоретический и смоделированный профиль совпали, что подтверждает правильность описания поведения жидкости граничным условием, используемым в теории.

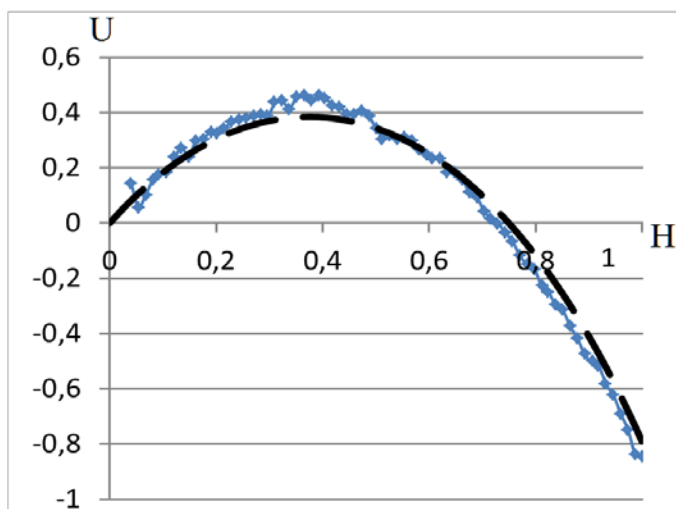


Рис. 1. Пример теоретического (пунктир) и смоделированного профиля скорости.

Литература

1. A.S. Najafi, J.Drelich, A.Yeung, Z.Xu, J.Masliyah, aJ. Coll. Int. Sci. 308 (2007) 344–350