

Phasenfeld Simulationen eines Tropfenaufpralls auf strukturierten Oberflächen

Phasefield simulations of droplet spreading on structured surfaces

Masterarbeit
von

Ronan Bernard

An der Fakultät für Maschinenbau,
Institut für Strömungsmechanik

Betreuer: M. Sc. Verena Fink
M. Sc. Xuan Cai
Dr.-Ing. Martin Wörner
Prof. Dr.-Ing. Bettina Frohnepfel

Bearbeitungszeit: Dezember 2015 – April 2016

Ich versichere wahrheitsgemäß, die Arbeit selbstständig angefertigt, alle benutzten Hilfsmittel vollständig und genau angegeben und alles kenntlich gemacht zu haben, was aus Arbeiten anderer unverändert oder mit Abänderungen entnommen wurde.

Karlsruhe, 15. 04. 2016

.....

(Ronan Bernard)

Abstract

The wetting behaviour on grooved, hydrophobic and superhydrophobic surfaces is investigated performing droplet impact simulations. The phasefield method is particularly suited for the simulations of droplet spreading on solid surfaces: based on the coupling of the Navier-Stokes equations with the Cahn-Hilliard equation, it allows the movement of the contact line in spite of the no-slip condition. The main parameters of the phasefield method are the Cahn number and the mobility factor. First, 2D simulations are performed on smooth surfaces to get a better understanding of the influence of those parameters. Thereby, a good agreement with experimental data is aimed for. Based on those results, 3D simulations of droplet spreading on $60\ \mu\text{m}$ and $180\ \mu\text{m}$ grooved surfaces with a droplet's diameter of $2,1\ \text{mm}$ are performed. In order to keep the computational cost as small as possible, the behaviour between the diffuse interface thickness and the groove width is investigated. The simulations on grooved surfaces allow the observation of the transition from Cassie-Baxter's to Wenzel's state as well as the so-called *pinning* effect.

Kurzfassung

Das Benetzungsverhalten gerillter, hydrophober und superhydrophober Oberflächen wird anhand von Tropfenauflprallsimulationen untersucht. Die Phasenfeld Methode, die auf der Koppelung der Navier-Stokes Gleichungen mit der Cahn-Hilliard Gleichung beruht, ist für die Simulation des Tropfenauflpralls besonders geeignet, da sie die Bewegung der Kontaklinie auf der festen Oberfläche trotz der Haftbedingung erlaubt. Die Hauptparameter der Phasenfeld Methode sind die Cahn Zahl und der Mobilitätsfaktor. Zunächst wird die Sensitivität der Lösung bezüglich dieser Hauptparameter mittels 2D Simulationen auf glatten Oberflächen untersucht. Dabei wird eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment angestrebt. Auf dieser Basis kann die 3D Simulation des Tropfenauflpralls auf $60\ \mu\text{m}$ und $180\ \mu\text{m}$ gerillten Oberflächen mit einem Tropfendurchmesser von $2,1\ \text{mm}$ durchgeführt werden. Um den Rechenaufwand möglichst gering zu halten, wird das Verhältnis zwischen Grenzflächendicke und Rillenbreite untersucht. Schließlich kann in Simulationen mit gerillten Oberflächen der Übergang vom Cassie-Baxter- in den Wenzel-Zustand und auch der sogenannte *pinning*-Effekt beobachtet werden.

Inhaltsverzeichnis

Abstract	iii
Kurzfassung	iv
1 Einleitung	1
2 Grundlagen	3
2.1 Strömungsmechanische Grundlagen	3
2.1.1 Benetzbarkeit	3
2.1.1.1 Tropfenaufprall	3
2.1.1.2 Kontaktwinkel	5
2.1.1.3 Ausbreitungsfaktor	6
2.1.2 Wenzel und Cassie-Baxter Zustand	7
2.2 Numerische Methode	8
2.2.1 Phasenfeld Methode	8
2.2.1.1 Phasenparameter	8
2.2.1.2 Cahn-Hilliard Gleichung	9
2.2.2 Navier-Stokes Gleichungen	10
2.2.3 Koppelung der Gleichungen	10
3 Tropfenaufprall auf glatten Oberflächen	12
3.1 Aufbau der Simulation	12
3.1.1 Bedingungen des Wassertropfenaufpralls	12
3.1.2 Rand- und Anfangsbedingungen	13
3.2 Sensitivitätsanalyse	14
3.2.1 Numerische Parameter	14
3.2.1.1 Cahn Zahl	14
3.2.1.2 Courant Zahl und maximaler Zeitschritt	19
3.2.1.3 Mobilitätsfaktor	19
3.2.2 Physikalische Parameter	20
3.2.2.1 Gleichgewichtskontaktwinkel	20
3.2.2.2 Aufprallgeschwindigkeit	22
3.2.2.3 Durchmesser	23
3.3 Vergleich mit experimentellen Daten	24
3.3.1 Ausbreitungsphase	24
3.3.2 Rückzugsphase und Oszillationen	26
3.3.3 Gleichgewichtszustand	26
4 Tropfenaufprall auf strukturierten Oberflächen	28
4.1 Charakteristik der Strukturierung	28
4.1.1 Charakteristiken der Rillenstruktur	28
4.1.2 Größenbeziehung zwischen Tropfen und gerillter Oberfläche	29

4.2	Herausforderung der Simulation	30
4.2.1	Voraussetzung für Cahn Zahl und Auflösung	30
4.2.2	Erzeugung des gesamten Gitters	32
4.3	Ergebnisse	33
4.3.1	Verhalten der Ausbreitungsfaktor	35
4.3.1.1	Ausbreitung entlang und vertikal zu den Rillen	35
4.3.1.2	Ausbreitung quer zu den Rillen	36
4.3.2	Übergang vom Cassie-Baxter zum Wenzel Zustand	38
5	Zusammenfassung und Ausblick	42
	Symbolverzeichnis	44
	Abbildungsverzeichnis	45
	Tabellenverzeichnis	47
	Literaturverzeichnis	48

1. Einleitung

Oft sind strukturierte Oberflächen in der Natur zu finden, z.B. auf Lotusblättern oder auf Schmetterlingsflügeln. Einige haben die besonderen Eigenschaften, das hydrophile oder hydrophobe Verhalten einer glatten Oberfläche verbessern zu können. Glatte hydrophobe Oberflächen können über eine entsprechende Strukturierung die Eigenschaften einer superhydrophoben Oberfläche erreichen. Das heißt, dass der Kontaktwinkel zwischen dem Tropfen und der Oberfläche größer als 140° ist [8]. Nach den erwähnten Lotusblättern wurde der Lotus-Effekt benannt, dabei perlt ein Tropfen auf der Oberfläche ab und nimmt dabei die Schmutz-Partikel der Oberfläche mit (siehe Abbildung 1.1). Heutzutage ist es dank Mikrofabrikationstechnologien möglich solche Oberflächen wirtschaftlich herzustellen, was zusätzlich anti-korrosive, anti-eisbildende und reibungsminimierende Eigenschaften ermöglicht.



Abbildung 1.1: Abperlender Tropfen auf einem Lotusblatt. [15]

Um solche Oberflächen zu charakterisieren, werden Tropfenaufprallversuche durchgeführt. Über diese Versuche kann die Benetzbarkeit klassifiziert werden.

Diese Tropfenaufprallversuche können entweder experimentell oder numerisch durchgeführt werden. Am ISTM wurden bereits glatte und strukturierte Oberflächen experimentell untersucht. Dabei sind vor allem die Rillenstrukturen interessant, weil sie eine gerichtete Benetzbarkeit aufweisen. Rillenstrukturen zu untersuchen ist noch wichtiger, da solche oft gewollt oder ungewollt durch Fertigungsverfahren erzeugt werden. Die experimentellen Daten, die zur Verfügung stehen, wurden unter den Bedingungen gemessen, die typischerweise zu einer Absetzung des Tropfens mit partiellem Abprall auf hydrophobe Oberflächen führen [19].

Allerdings kann aus den experimentellen Daten lediglich die Benetzbarkeit der Oberfläche abgelesen werden. Um ein tiefergehendes Verständnis des physikalischen Vorgangs eines Tropfenaufpralls zu erlangen, ist z.B. das Verhalten der Phasengrenzflächen wichtig. Eine numerische Untersuchung des Tropfenaufpralls bietet die Möglichkeit zusätzlich Geschwindigkeits- und Druckverteilungen analysieren zu können.

Der Tropfenaufprall wird über eine Koppelung der Navier-Stokes Gleichungen mit der Phasenfeld Methode simuliert, und ist bereits in OpenFOAM[®] implementiert [5]. Dank der Phasenfeld Methode ist der Widerspruch zwischen der konventionellen Haftbedingung an der Wand und der sich während des Aufpralls bewegenden Kontaktlinie gelöst: die Umsetzung erfolgt über die sogenannte Cahn-Hilliard Gleichung, die einen diffusiven Prozess der Kontaktlinie auflöst. Darüber hinaus ermöglicht diese Methode die Übertragung großer Dichteunterschiede, und somit den gesamten Verlauf eines Wassertropfenaufpralls in Luft quantitativ zu simulieren.

Im Rahmen dieser Arbeit, werden Tropfenaufprälle auf strukturierten hydrophoben Oberflächen simuliert. Die Herausforderung besteht darin, die Simulation entsprechend der Experimente durchzuführen und die jeweiligen Benetzbarkeiten zu vergleichen. Dazu gehört es, den Einfluss der verschiedenen Tropfenaufprallparameter abzuschätzen und den Zugang zu experimentell unmessbaren Daten zu nutzen.

In dieser Arbeit werden zuerst die unterschiedlichen Kriterien der Benetzbarkeit vorgestellt, die für die Beschreibung und Auswertung eines Tropfenaufpralls nötig sind. Anschließend werden die verschiedenen numerischen Parameter der Phasenfeld-Methode vorgestellt. Die Anisotropie der Oberflächenstrukturierung verlangt eine 3D-Simulation. Bevor diese aufwändige Simulation durchgeführt wird, wird der Tropfenaufprall auf einer glatten Oberfläche untersucht. Dieses Problem kann über eine 2D-Simulation beschrieben werden, für die eine Sensitivitätsanalyse der physikalischen und numerischen Parameter effizienter ist. Aus den Ergebnissen der Sensitivitätsanalyse werden die Bedingung der Gittererstellung für die 3D-Simulationen bestimmt. Zum Schluss wird die numerische Simulation des Tropfenaufpralls auf gerillten Oberflächen durchgeführt.

2. Grundlagen

Im Rahmen dieser Arbeit werden Tropfenaufrälle mit Hilfe numerischer Simulationen durchgeführt. In diesem Grundlagenkapitel werden verschiedenen Zustände der Benetzbarkeit und deren Klassifizierung durch einen Tropfenaufrall erläutert. Anschließend werden die verwendeten numerischen Methoden vorgestellt: die numerische Darstellung der Mehrphasenströmungen, die aufgelöste Gleichungen und ihrer Koppelung.

2.1 Strömungsmechanische Grundlagen

Zu Beginn werden die Benetzbarkeitseigenschaften im Bezug auf einem Tropfenaufrall dargestellt. Insbesondere werden die Begriffe Kontaktwinkel und Ausbreitungsfaktor erklärt. Danach werden die zwei Zustände, Wenzel- und Cassie-Baxter Zustand, die auf einer strukturierten Oberflächen auftreten können, deren Klassifizierung und deren Einfluss auf die Benetzbarkeit vorgestellt.

2.1.1 Benetzbarkeit

Die Benetzbarkeit einer festen Oberfläche stellt die Ausbreitungsfähigkeit, eines flüssigen Mediums auf dieser Oberfläche dar. Sie ist spezifisch für eine Kombination aus flüssiger, gasförmiger und fester Phase. Um die Benetzbarkeit einer Oberfläche zu charakterisieren, können der Kontaktwinkel und der Ausbreitungsfaktor eines auf der Oberfläche aufgetragenen Flüssigkeitstropfen genutzt werden.

2.1.1.1 Tropfenaufrall

Tropfenaufrallversuche erlauben die Untersuchung der Benetzung eines flüssigen Mediums auf einer festen Oberfläche. Abhängig vom Verhalten des Tropfens während des Aufpralls kann die Beziehung zwischen flüssigem Medium, umgebendem Gas und fester Oberfläche charakterisiert werden. Die ersten Tropfenaufrallversuche wurden von Worthington Ende des 19. Jahrhunderts durchgeführt [22]. Seitdem haben sie immer mehr an Bedeutung gewonnen, da Tropfenaufrälle in zahlreichen Anwendungsbereichen wie Beschichtung, Schmierung oder Mikrofabrikation auftreten. Dieses Interesse wurde noch verstärkt durch die Entdeckung des sogenannten Lotus-Effekts von Wilhelm Barthlott in den neunziger Jahren.

Tropfenaufralluntersuchungen gehören zum Bereich der Hydrodynamik, da das dynamische Verhalten des Tropfens, betrachtet als deformierbares Medium, dargestellt wird. Sein

Verhalten resultiert aus der Beziehung zwischen Impuls, viskosen Kräften, und Oberflächenspannungen. Vor dem Aufprall kann der Tropfen als kugelförmig betrachtet werden (unter der Bedingung, dass die Gravitationskraft im Vergleich zur Oberflächenkraft vernachlässigbar ist). Die Kugelform erlaubt dem Tropfen, die kleinstmögliche Oberfläche zu erhalten: die Integration der Oberflächenspannung über die Kugeloberfläche ergibt ein Energieminimum. Die Oberflächenspannung ist auf Molekularbindungen zurückzuführen: die Moleküle an der Oberfläche haben weniger Nachbarn als im Inneren des Tropfens, was zu stärkeren Bindungen führt. Wenn der Tropfen auf eine feste Oberfläche trifft, wird dieser Gleichgewichtszustand verändert. Abhängig von der Höhe der Oberflächenenergie des Festkörpers, wird sich der Tropfen mehr oder weniger auf der Oberfläche ausbreiten. Der Tropfen wird durch die Form einer Kugelkappe angenähert. Die Kugelkappenform tritt auf, wenn die Gravitationseffekte vernachlässigbar gegenüber den Kapillarkräften sind, da Gravitationskraft zu einer Abplattung des Tropfens führt. Diese Annahme trifft zu, wenn der Ausgangsdurchmesser des Tropfens unter die Kapillarlänge des Fluids liegt. Die Kapillarlänge L_c ist definiert als

$$L_c = \sqrt{\frac{\gamma}{\rho g}} \quad (2.1)$$

mit der Oberflächenspannung des Fluids γ und seiner Dichte ρ . L_c liegt bei 2.7mm für Wasser.

Die Einflussparameter auf einen Tropfenaufprall sind zahlreich. Das Verhalten hängt zunächst von den Eigenschaften jeder Phase ab: für die Fluide sind ihre Eigenschaften wie Dichte, Viskosität und Oberflächenspannung zu betrachten. Für die feste Oberfläche spielen das Material, die Rauigkeit und Strukturierung, die chemische Homogenität, die Temperatur und die Ausgangsbenetzung eine Rolle. Der Druck des umgebenden Gases kann auch Einfluss auf den Tropfenaufprall haben. Weitere Einflussfaktoren sind Aufprallbedingung wie Tropfengröße, Aufprallgeschwindigkeit und Fallrichtung.

Je nach Tropfenaufprallbedingungen werden 6 unterschiedliche Kategorien unterschieden [19]. Diese Kategorien sind in Abbildung 2.1 dargestellt.

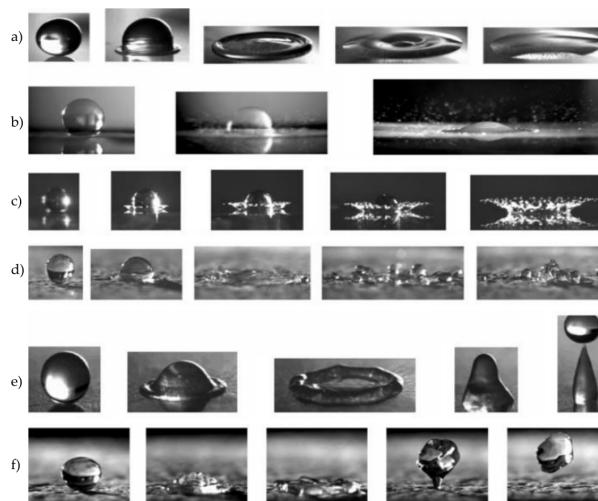


Abbildung 2.1: Unterschiedliche Tropfenaufprallszenarien aus Rioboo *et al.* [19].

a) Absetzen, b) schneller Tropfenaufschlag, c) kronenförmiger Tropfenaufschlag, d) zurückgehender Aufbruch, e) teilweiser Abprall, f) totaler Abprall

Die Fälle, die hier untersucht werden, sind das Absetzen (Reihe a), der teilweise Abprall (Reihe e) und der totale Abprall (Reihe f). Beim Absetzen bleibt der Tropfen an der

Oberfläche haften und wird nur verformt. Der Übergang bis zum Abprall kann dank der enddimensionierten Weber Zahl quantifiziert werden. Die Weber Zahl stellt das Verhältnis zwischen Impuls- und Kapillarkräften dar und ist definiert als

$$\text{We} = \text{Re} \cdot \text{Ca} \quad \text{mit} \quad \begin{cases} \text{Kapillar Zahl:} & \text{Ca} = \frac{\rho \nu V}{\gamma} \\ \text{Reynolds Zahl:} & \text{Re} = \frac{V d_0}{\nu} \end{cases} \quad (2.2)$$

mit dem Ausgangsdurchmesser des Tropfens d_0 , seiner Aufprallgeschwindigkeit V und seiner kinematischen Viskosität ν . Die Weber Zahl We kann mithilfe der Reynolds Zahl Re , die das Verhältnis von der Trägheits- zu der Viskositätskräften darstellt, und der Kapillar Zahl Ca , der das Verhältnis von Viskositätskräften zu Oberflächenspannungen darstellt, definiert werden. Für kleine We ($\simeq 0.1$) wird der Fall des kompletten Abpralls beobachtet. Für größere Werte ($\text{We} \simeq 20$) entsteht ein teilweiser Abprall [23]. Diese Schwellenwerte sind trotzdem von der Topographie der Oberfläche abhängig.

2.1.1.2 Kontaktwinkel

Geometrisch gesehen entspricht der Kontaktwinkel dem Winkel zwischen benetzter Oberfläche und der Tangente, entlang an der Phasengrenze flüssig-gas ausgehend vom Tropfen. Abbildung 2.2 zeigt in grün die Kontaktwinkel für hydrophile, hydrophobe und superhydrophobe Oberflächen.

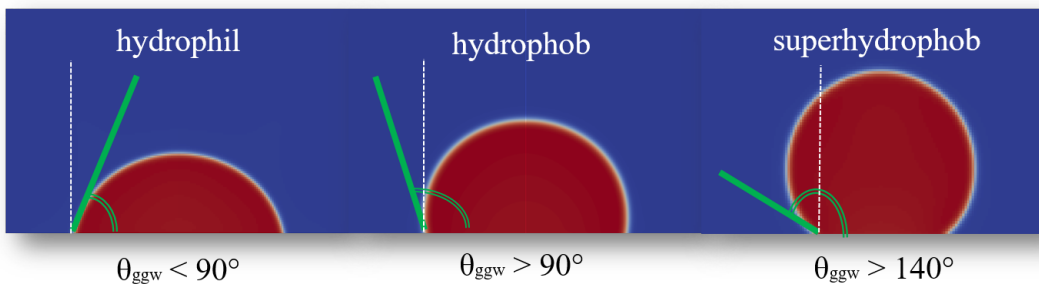


Abbildung 2.2: Der Kontaktwinkel bei verschiedenen Benetzbarkeiten.

Befindet sich der Kontaktwinkel in einem stationären Zustand, wird er als Gleichgewichtskontaktwinkel (GGKW) θ_{ggw} bezeichnet. der GGKW entsteht durch die Grenzflächenspannungen der verschiedenen Phasen und ist für Oberflächen über die Young'sche Gleichung (2.3) definiert:

$$\cos(\theta_{\text{ggw}}) = \frac{\gamma_{\text{f-g}} - \gamma_{\text{fl-f}}}{\gamma} \quad (2.3)$$

$\gamma_{\text{f-g}}$, $\gamma_{\text{fl-f}}$, und γ stellen die Grenzflächenspannungen der jeweiligen Phasenkombinationen fest-gasförmige, flüssig-fest und flüssig-gasförmige dar. Mit der Gleichung 2.3 können die hydrophilen und hydrophoben Oberflächen definiert werden, für $\theta_{\text{ggw}} < 90^\circ$ beziehungsweise $\theta_{\text{ggw}} > 90^\circ$ (siehe Abbildung 2.2).

2.1.1.3 Ausbreitungsfaktor

Der Ausbreitungsfaktor d^* ist definiert als Quotient zwischen dem Durchmesser der benetzten Oberfläche d_{benetz} und dem Durchmesser des Tropfens vor dem Aufprall d_0 (wie in Abbildung 2.3 dargestellt).

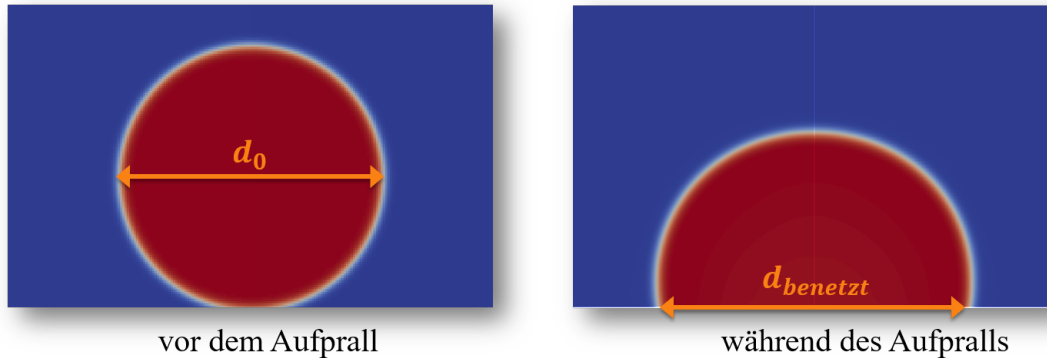


Abbildung 2.3: Berechnung des Ausbreitungsfaktors $d^* = \frac{d_{\text{benetz}}}{d_0}$.

Er stellt die relative Kontaktfläche von Flüssigkeit und fester Oberfläche dar und damit die Benetzbarkeit der Oberfläche. Bei einem Aufprall wird der Ausbreitungsfaktor zu jedem Zeitpunkt bestimmt und ermöglicht das dynamische Verhalten des Aufpralls darzustellen. Die Entwicklung dieses Faktors über der Zeit erlaubt die Einteilung in charakteristische Phasen (siehe Abbildung 2.4).

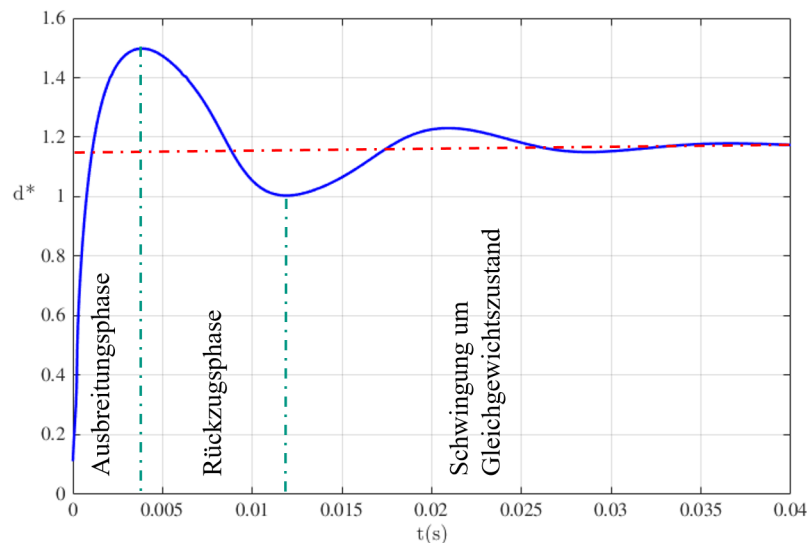


Abbildung 2.4: Verlauf des Ausbreitungsfaktors über die Zeit.

Zuerst kommt die Ausbreitungsphase, bei der der Tropfen auf die Oberfläche trifft. Wenn der maximale Ausbreitungsfaktor größer als der Gleichgewichtswert während der Ausbreitungsphase ist, tritt eine Rückzugsphase auf. Am Ende der Rückzugsphase kann es zu einem Abprall kommen [19]. Danach schwingt der Tropfen um seinen Gleichgewichtszustand. Wichtig für die Beschreibung des dynamischen Prozesses sind der maximale Ausbreitungsfaktor und der Gleichgewichtswert. Für hydrophobe Oberfläche (ab $\theta_{\text{ggw}} = 90^\circ$) treten Gleichgewichtsausbreitungsfaktoren ab $d^* = \sqrt[3]{2}$ auf. Je hydrophober eine Oberfläche ist, desto kleiner wird der Ausbreitungsfaktor.

2.1.2 Wenzel und Cassie-Baxter Zustand

Auf einer strukturierten Oberfläche können 2 Tropfenzustände auftreten: benetzt der Tropfen die Kontur der Struktur vollständig, liegt der Wenzel Zustand vor. Im Gegensatz dazu tritt der Cassie-Baxter Zustand auf, wenn es teilweise gasförmige Einschlüsse zwischen Tropfen und Kontur der Struktur gibt. Die Abbildung 2.5 schematisiert diese zwei Zustände auf einer gerillten Oberfläche.

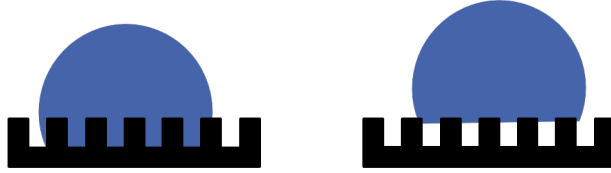


Abbildung 2.5: Darstellung des Wenzel- (links) und Cassie-Baxter Zustand (Rechts) auf einer gerillten Oberfläche.

Diese Einschlüsse treten auf, wenn es eine größere Aufwand gibt, um die ganze Struktur zu benetzen, als die flüssig-gasförmige gebildeten Oberfläche zu behalten.

Der Cassie-Baxter Zustand ist meistens erwünscht, da er für Strömungen zu einer oberflächenspezifischen Schlupflänge führt, und damit zu Reibungsminderung führen kann. Der Zustand ist metastabil, wenn $\theta_{\text{ggw,glatt}}$ kleiner als einen kritischen Kontaktwinkel $\theta_{\text{ggw,krit}}$ abhängig von der Topographie der Oberfläche ist [3]:

$$\theta_{\text{ggw,glatt}} < \theta_{\text{krit}} \quad \text{mit} \quad \cos(\theta_{\text{krit}}) = \frac{\Phi_s - 1}{r - \Phi_s} \quad (2.4)$$

mit Φ_s als Quotient von hervorstehender Oberfläche über der gesamten Oberfläche und dem Quotienten r von gesamter Oberfläche durch die horizontal-projizierte Fläche. Es gilt für Fälle, in denen der Tropfen viel größer als die Struktur ist.

Die Strukturierung der Oberfläche führt zu einer Änderung der festen Grenzflächenenergie, und damit zu einer Änderung des Kontaktwinkels (siehe Gleichung 2.3). Der Kontaktwinkel im Wenzel Zustand kann wie folgt ausgedrückt werden [11]:

$$\cos(\theta_W) = r \cos(\theta_{\text{ggw,glatt}}) \quad (2.5)$$

Diese Gleichung zeigt, dass $\theta_{\text{ggw,glatt}} > 90^\circ$ beziehungsweise $\theta_{\text{ggw,glatt}} < 90^\circ$ zu einem noch größeren beziehungsweise noch kleineren θ_W führt, da r immer größer als 1 ist. Es ergibt sich ein hydrophoberes beziehungsweise ein hydrophileres Verhalten. Allerdings stellt die Gleichung nur die Tendenz dar, quantitativ stimmt sie nicht [16].

Im Cassie-Baxter Zustand gilt die folgende Gleichung [11]:

$$\cos(\theta_{CB}) = -1 + \Phi_s \left(\cos(\theta_{\text{ggw,glatt}}) + 1 \right) \quad (2.6)$$

Meistens führt der Cassie-Baxter Zustand zu einem Größeren $\theta_{\text{ggw,glatt}}$ als in Wenzel Zustand, also zu besseren Benetzungseigenschaften.

2.2 Numerische Methode

Das dynamische Verhalten des Tropfenaufpralls kann mithilfe numerischer Strömungsmechanik berechnet werden. D.h. die Navier-Stokes Gleichungen werden gelöst. Der Schwerpunkt der Beschreibung einer hydrodynamischen Ausbreitung besteht darin, die Bewegung der Dreiphasenkontaktlinie (DPKL), d.h. die Schnittlinie aller drei Phasen, verlässlich zu simulieren. Die traditionellen *Sharp Interface* Modelle führen zu einem Widerspruch zwischen der sich bewegenden DPKL und der Haftbedingung an der Wand. Daraus folgt eine unendlich hohe viskose Spannung, die numerisch schwierig zu handhaben ist. Um die Bewegung der DPKL darzustellen ist die Phasenfeld Methode vielversprechend. Sie fügt der Kontaktlinie eine Diffusionsfähigkeit hinzu. Die Umsetzung erfolgt über eine Kopplung der Navier-Stokes Gleichungen (NSG) mit der Cahn-Hilliard Gleichung (CHG).

2.2.1 Phasenfeld Methode

Die Phasenfeld Methode beruht auf einer Phasenverteilung der Fluide, die von dem Phasenparameter C dargestellt wird. Dieser Phasenparameter wird mithilfe der Cahn-Hilliard Gleichung berechnet.

2.2.1.1 Phasenparameter

Die Phasenfeld Methode nutzt einen Phasenparameter, um das Verhalten von unmischbaren Strömungen darzustellen. Im Fall von 2 Fluiden ist der Phasenparameter C als die Differenz zwischen dem Phasenvolumenanteil α der zwei Phasen definiert:

$$C = \alpha_{\text{gas}} - \alpha_{\text{flüssig}} \quad (2.7)$$

Der Phasenparameter nimmt den Wert 1 in der reinen Gasphase und -1 in der reinen Flüssigphase an (siehe Abbildung 2.6).

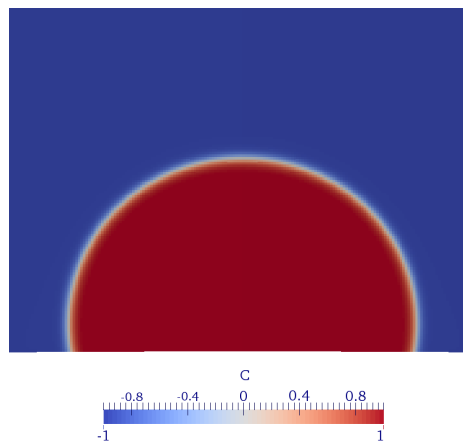


Abbildung 2.6: Verteilung des Phasenparameters am Beispiel eines Tropfens.

Der Übergang zwischen den 2 Phasen ist aber nicht scharf (siehe weiße Grenzfläche in der Abbildung 2.6). Die Grenzflächendicke L_g ist definiert als die Länge senkrecht zur Phasengrenzfläche, auf der C von -0,9 bis 0,9 variiert (siehe Abbildung 2.7). Der Verlauf von C kann berechnet werden, indem die Helmholtzsche freie Energie, die das System modelliert, nach C abgeleitet und zu Null gesetzt wird (was einem lokalen Gleichgewicht entspricht). Die Lösung ist eine hyperbolische, tangensförmige Funktion [6].

$$C = \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \quad (2.8)$$

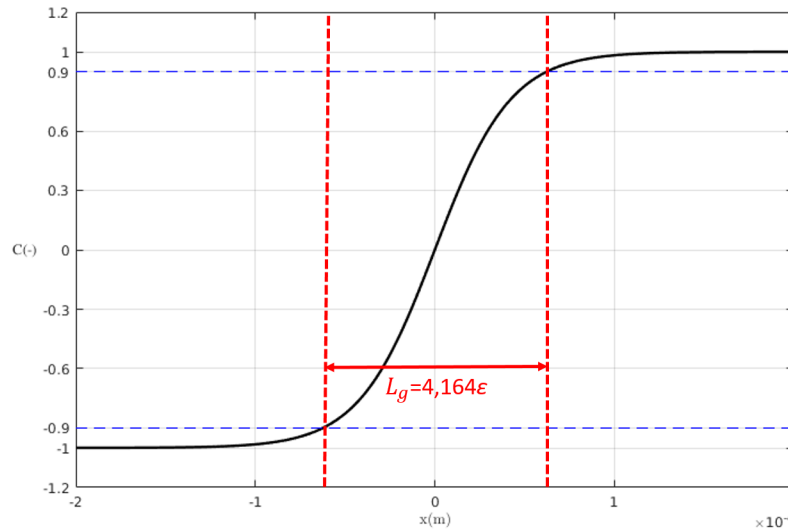


Abbildung 2.7: Verlauf des Phasenparameters in der Grenzflächendicke

In Gleichung (2.8) stellt x die Abszisse der Abbildung 2.7 dar. x verläuft senkrecht durch die Phasengrenzfläche. Aus Gleichung (2.8) folgt mit o.g. Definition $\varepsilon = L_g/4,164$. In Abbildung 2.7 wird der Verlauf des Phasenparameters für den Wert $\varepsilon = 3 \cdot 10^{-5}$ m dargestellt. Die Grenzflächendicke L_g ist in Rot vermerkt, sie misst ungefähr $1,25 \cdot 10^{-4}$ m.

Um das Verhältnis zwischen einer Referenzlänge des Systems L_{ref} (z.B. der Tropfendurchmesser) und der Dicke der Grenzfläche – proportional zu ε – darzustellen, wird eine relative Dicke eingeführt: die sogenannte Cahn Zahl

$$Cn = \frac{\varepsilon}{L_{ref}} \quad (2.9)$$

Das reale, physikalische Verhalten des Tropfens wird korrekt abgebildet, wenn die Cahn Zahl hinreichend klein ist.

2.2.1.2 Cahn-Hilliard Gleichung

Die Cahn-Hilliard Gleichung modelliert die instantane Position des Tropfens und deren Änderung. Es handelt sich um eine Differentialgleichung, die den Phasenparameter C auflöst.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + ((\mathbf{u} \cdot \nabla) \cdot C) = \kappa \nabla^2 \Phi \quad (2.10)$$

Der rechte Teil der Gleichung stellt den diffusiven Anteil dar. Wenn das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} wie im Fall der Haftbedingung gleich Null ist, gewinnt der Diffusionsterm an Bedeutung. Daher kann eine Bewegung der DPKL durch Diffusion erfolgen. Dieser Diffusionsterm besteht aus dem Gradienten des chemischen Potentials $\nabla^2 \Phi$ und dem Mobilitätsfaktor κ . Das chemische Potential Φ wird über die Ableitung nach dem Phasenparameter C von der Helmholtzschen freien Energie bestimmt und ist wie folgt definiert:

$$\Phi = \frac{3\varepsilon\gamma_{F/G}}{2\sqrt{2}} \cdot \left(\frac{C(C^2 - 1)}{\varepsilon^2} - \nabla^2 C \right) \quad (2.11)$$

Das chemische Potential und damit die Diffusion ist also von der Phasenverteilung und von ε abhängig.

Um die Geschwindigkeit der DPKL richtig zu modellieren, muss der Diffusionsterm angepasst werden. Dafür wird der Mobilitätsfaktor κ eingeführt. Je größer dieser Anpassungsparameter ist, desto schneller breitet sich die Kontaktlinie aus. Häufig wird $\kappa/\varepsilon^2 = 1 \text{ m}\cdot\text{s}/\text{kg}$ verwendet.

2.2.2 Navier-Stokes Gleichungen

Die Navier-Stokes Gleichungen werden benutzt, um das Strömungsfeld mit dem Tropfen und dem umgebenden Gas zu simulieren. Die Umsetzung erfolgt über Phasenparameter abhängende Fluideigenschaftenvariablen (Index C in Gleichung (2.12)). Sie werden für isotherme, unmischbare, inkompressible Strömungen Newtonischer Fluide angewendet. Die *inkompressible* Bedingung ist für Aufprallgeschwindigkeiten kleiner als 30 m/s erfüllt [23].

Die verwendeten Gleichungen bestehen aus der Kontinuitätsgleichung (Gleichung (2.12a)) und der Navier-Stokes Gleichungen (Gleichung (2.12b)).

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.12a)$$

$$\rho_C \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu_C (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) + f_{OS} + \rho_C \mathbf{g} \quad (2.12b)$$

Für Tropfenaufprallbetrachtung muss die Oberflächenspannungskraft f_{OS} in den NSG enthalten werden. f_{OS} und die phasenabhängigen Fluideigenschaften werden im nächsten Abschnitt behandelt.

2.2.3 Koppelung der Gleichungen

Die Koppelung zwischen der CHG und den NSG erfolgt aufgrund der gegenseitigen Abhängigkeit einiger Variablen.

In der CHG (Gleichung (2.10)) wird das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} im Advektionsterm $((\mathbf{u} \cdot \nabla) \cdot C)$ mit den NSG (Gleichung (2.12)) berechnet.

In den NSG sind die Oberflächenspannungskraft \mathbf{f}_{OS} und die Fluideigenschaften μ_C und ρ_C vom Phasenparameter C abhängig. Die Oberflächenspannungskraft ist als Potentialkraft des chemischen Potentials Φ definiert.

$$\mathbf{f}_{OS} = -C \nabla \Phi \quad (2.13)$$

$$\mu_C = \frac{1}{2} (\mu_{\text{gas}}(C + 1) - \mu_{\text{flüssig}}(C - 1)) \quad (2.14a)$$

$$\rho_C = \frac{1}{2}(\rho_{\text{gas}}(C + 1) - \rho_{\text{flüssig}}(C - 1)) \quad (2.14b)$$

Die NSG und die CHG werden mithilfe der *Finite Volumen Methode* diskretisiert. Die Anfangsbedingungen bestehen aus der Ausgangsverteilung von C , dem Ausgangsgeschwindigkeitsfeld $\mathbf{u}(t_0)$, dem Ausgangsdurchmesser des Tropfens und der Grenzflächendicke L_g .

Die Koppelung der Gleichungen erfolgt über eine iterative Berechnungsschleife, die wie folgt implementiert ist [6]:

1. Berechnung des chemischen Potentials Φ (2.11) mit $C(t_n)$.
2. Berechnung von $C(t_{n+1})$ mit der CHG, mithilfe $C(t_n)$ und $\mathbf{u}(t_n)$ aus der NSG.
3. Berechnung von f_{OS} und μ_C mit $C(t_{n+1})$.
4. Berechnung von $\mathbf{u}(t_{n+1})$ durch Einsetzung von f_{OS} und μ_C in den NSG.

Dann beginnt die Schleife wieder von vorn. Für jeden Zeitschritt wird die Schleife so oft berechnet, bis die Ergebnisse konvergiert sind, um daraus das dynamische Verhalten des Tropfenauflaufs zuverlässig zu simulieren.

3. Tropfenaufrall auf glatten Oberflächen

Die numerische Untersuchung des Tropfenaufralls auf glatten Oberflächen beinhaltet die Optimierung der Simulationsparameter und die Beurteilung deren Einflüsse. Dafür werden glatte Oberflächen verwendet, deren Oberflächen vollständig symmetrisch sind und deshalb der Tropfenaufrall auch idealisiert als symmetrisch angenommen wird. Um den Rechenaufwand gering zu halten, werden 2D Simulationen durchgeführt.

3.1 Aufbau der Simulation

Diese numerische Studie bildet Tropfenaufrallexperimente nach, die bereits am ISTM durchgeführt wurden [21]. Dabei kam eine hydrophobe Oberfläche aus Polydimethylsiloxan (PDMS), einem Silikonkautschuk, zum Einsatz. Der Gleichgewichtskontaktwinkel von dem vorliegende PDMS liegt bei $\theta_{\text{ggw,PDMS}} = 100,3^\circ$ [21].

3.1.1 Bedingungen des Wassertropfenaufralls

In der numerischen Untersuchung des Tropfenaufralls wird idealisiert angenommen, dass die Oberfläche trocken und chemisch homogen sei, und es herrsche Umgebungstemperatur. Der Tropfen besteht aus Wasser und das umgebende Gas ist Luft. Der Durchmesser beträgt ungefähr 2,1 mm; die Fallhöhe beträgt 2 cm, welche zu einer Aufprallgeschwindigkeit von 0,62 m/s senkrecht zur Oberfläche führt.

Unter diesen Bedingungen liegt die Kapillanzahl (Gleichung (2.2)) bei $\text{Ca} = 8,6 \cdot 10^{-3}$, welche unter der Schwelle von 0,2 ist, was die Nutzung der Randbedingung eines konstanten lokalen Kontaktwinkels $\theta_L = \theta_{\text{ggw,PDMS}}$ erlaubt (siehe Abschnitt 3.1.2).

Die Koppelung der Phasenfeld Methode und den NSG erlaubt die Benutzung der realen Fluideigenschaften. Darunter sind die Dichte ρ , die kinematische Viskosität ν und die Oberflächenspannung γ zwischen dem umgebenden Gas und der Flüssigkeit. Diese Fluideigenschaften sind wie folgt gegeben:

bei 20°	Wasser	Luft
$\rho [kg \cdot m^{-3}]$	998,2	1,2
$\nu [m^2 \cdot s^{-1}]$	$1,007 \cdot 10^{-6}$	$1,55 \cdot 10^{-5}$
$\gamma [kg \cdot s^{-2}]$	$7,28 \cdot 10^{-2}$	

Tabelle 3.1: Dichte, kinematische Viskosität und Oberflächenspannung der Fluide.

3.1.2 Rand- und Anfangsbedingungen

Der Berechnungsbereich besteht aus einer Wand an der unteren Oberfläche, Symmetrieebenen an den zwei Seiten und Freistromrändern. Abbildung 3.1 stellt den Bereich einer 2D-achsensymmetrischen Simulation dar. Die untere Fläche (in dunkelgrau) repräsentiert den Boden, die äußeren Ränder, die auf dem Zylindermantel und der Oberseite liegen, sind die Freistromränder. Die Abbildung zeigt die Anfangssituation: der Tropfen berührt die untere Oberfläche, das bedeutet der Abstand zwischen dem Zentrum des Tropfens und der Wand entspricht genau seinem Radius. Der Tropfenradius misst den Abstand der Fläche mit $C = 0$ vom Mittelpunkt des Tropfens. Alle Zellen, die zum Tropfen gehören ($C \geq 0$) werden mit der gewählten Aufprallgeschwindigkeit definiert.

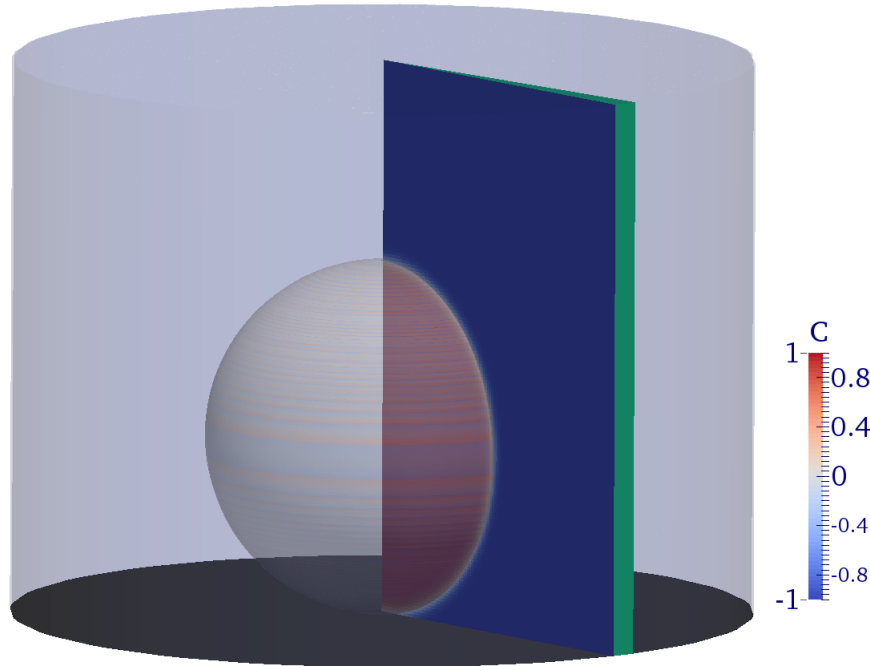


Abbildung 3.1: Darstellung des Berechnungsbereich im Fall einer 2D-achsensymmetrischen Simulation.

Für die Randbedingungen der Freistromränder in grün dargestellt wird der relative Druck null gesetzt. Die Gradienten von Geschwindigkeit und Phasenparameter sind ebenfalls Null.

An dem Boden sind die Randbedingungen wie folgt definiert: wegen der Haftbedingung wird das Geschwindigkeitsfeld Null gesetzt. Der Druck ist hier auch mit einem Null-Gradient definiert. Zum Schluß ist der Phasenparameter C mit der folgenden Neumann-Bedingung definiert:

$$\mathbf{n}_s \cdot \nabla C = \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\cos(\theta_L)}{\varepsilon} (1 - C^2) \quad (3.1)$$

Diese Randbedingung bestimmt die Tangente an der Grenzfläche zwischen flüssiger und gasförmiger Phase am einem Dreiphasenkontaktpunkt. Diese Tangente ist mit einem lokalen Kontaktwinkel θ_L definiert. Dieser kommt aus einem hydrodynamischen Modell, um die Benetzbarkeit des Materials zu charakterisieren. Er kann von dem wirklichen Kontaktwinkel während des Aufpralls unterschiedlich sein.

Hat die Kapillanzahl Ca (Gleichung (2.2)) einen Wert kleiner als 0,2, ist dieser lokale Winkel unabhängig von der Kontaktliniengeschwindigkeit [17]. Unter dieser Bedingung wird angenommen, dass der lokale Kontaktwinkel konstant und gleich dem GGKW ist:

$$\theta_L = \theta_{\text{ggw}} \quad (3.2)$$

Der große Vorteil dieses Modells besteht darin, dass die Bestimmung von θ_{ggw} experimentell auf einer glatten Oberfläche im Gleichgewichtszustand erfolgen kann. Dann kann diese Eigenschaft benutzt werden, um den Tropfenaufprall numerisch auf einer strukturierten Oberfläche aus dem gleichen Material zu untersuchen.

3.2 Sensitivitätsanalyse

Die Sensitivitätsanalyse wird zuerst für die numerischen Parameter durchgeführt, um die Voraussetzungen einer möglichst genauen Simulation in unserem Fall zu schaffen. Danach werden die physikalischen Parameter untersucht, um die Wahl der Aufprallbedingung für die Simulation zu optimieren. Die Untersuchung konzentriert sich auf den Ausbreitungsfaktor, da die Messung des Kontaktwinkels – aufgrund der unscharfen Grenzfläche und des konstanten, lokalen Kontaktwinkels als Randbedingung – schwierig ist.

3.2.1 Numerische Parameter

Die Hauptparameter, die hier betrachtet werden, sind die Grenzflächendicke und ihre Auflösung, die zeitliche Diskretisierung und der Mobilitätsfaktor κ .

3.2.1.1 Cahn Zahl

Die Cahn Zahl C_n stellt die relative Größe der Grenzfläche dar. In unserem Fall wird der Tropfendurchmesser konstant gehalten, die Cahn Zahl C_n (Gleichung (2.9)) ist also nur vom Grenzflächendickeparameter ε abhängig. In der Realität ist die Cahn Zahl sehr klein, da die Grenzflächendicke bei einigen Nanometern liegt. Je kleiner also die Cahn Zahl ist, desto realitätsnäher ist die Simulation.

Dazu kommt, dass ε in dem Diffusionsterm der CHG entsteht und dementsprechend einen Einfluss darauf hat. Dieser Einfluss ist komplex, aber eine größere Grenzflächendicke führt prinzipiell zu einer größeren Diffusion, abhängig von dem Wert des Mobilitätsfaktors gegenüber ε^2 .

Ein Teil des Fluids kann wegen numerischer Diffusion verschwinden, was zu Massenerhaltungsproblemen führt [24]. Die Massenerhaltung des Tropfens wird während der Simulation zu jedem Zeitschritt überprüft. Wenn es sich aber um kleinere Systeme wie Luftpinschlüsse handelt, muss ε noch an ihre Größe angepasst werden. Eine lokale hohe C_n (ε geteilt durch die lokale Referenzlänge) wird zu abnehmenden Einschlüssen führen. Dieses Phänomen ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Der gesamte entsprechende Tropfen ist Abbildung 3.10 zu sehen.

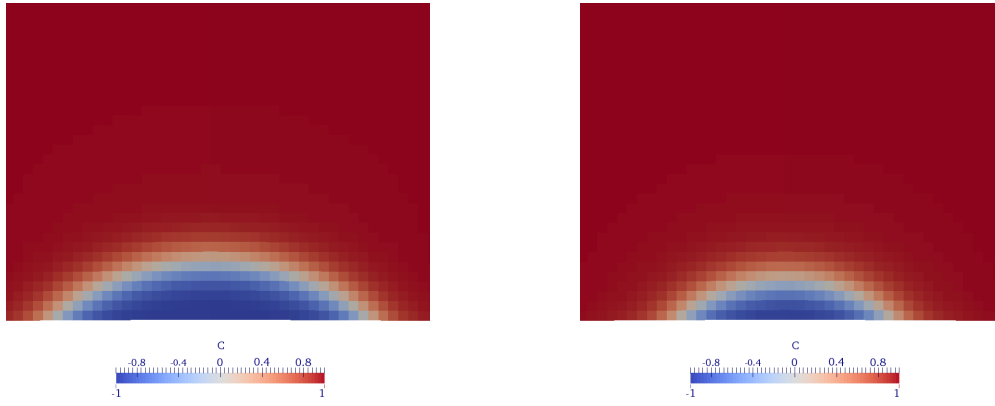


Abbildung 3.2: Abnahme des Luftpneinschlusses (Blau) unter dem Tropfen (Rot) mit der Zeit.
 (Links): $t = 0,06$ s nach dem Aufprall; Länge 0,57 mm; Höhe 0,11 mm (Rechts):
 $t = 0,14$ s nach dem Aufprall; Länge 0,39 mm; Höhe 0,08 mm

Die Wahl der Cahn-Zahl beeinflusst den Rechenaufwand der Simulation. Es muss immer beachtet werden, dass die Grenzfläche mit genügend vielen Zellen aufgelöst wird. Je kleiner die Cahn Zahl ist, desto feiner ist das Netz auf der Grenzfläche. Innerhalb dieser Arbeit ist das Netz äquidistant. Eine Verfeinerung des Netzes führt zu einem höheren Rechenaufwand.

Die durchschnittliche Anzahl von Zellen in der Grenzfläche N stellt diese Auflösung dar.

$$N = \frac{L_g}{\Delta x} = \frac{4.164 \varepsilon}{\Delta x} \quad (3.3)$$

Δx stellt die Kantenlänge einer Zelle des Gitters dar. Die Zellen sind kubisch. Da die Zellen in der Grenzfläche nicht immer senkrecht auf dieser Grenzfläche liegen, ist N ein Durchschnittswert.

Die Auflösung der räumlichen Diskretisierung in der Grenzfläche N soll mindestens 4 Zellen betragen [6]. Es kann aber auch ein wesentlicher höherer Wert für N notwendig sein, um ein konvergiertes Tropfenverhalten zu erzeugen.

Die Auflösung der Grenzflächendicke bedingt die Auflösung im gesamten Bereich. Um die Auflösung des Tropfens zu quantifizieren, wird die Auflösung des Tropfendurchmessers N_d eingeführt. Sie ist wie folgt definiert:

$$N_d = \frac{d_0}{\Delta x} = \frac{N}{4 Cn} \quad (3.4)$$

Die folgenden Abschnitte sind der Abhängigkeit von N von erstens der Cahn Zahl bei $|\kappa| = |\varepsilon^2|$ (d.h. $\kappa/\varepsilon^2 = 1 \text{ m} \cdot \text{s}/\text{kg}$) und zweitens von der Geschwindigkeit der DPKL gewidmet.

Abhängigkeit von Cn mit $\kappa/\varepsilon^2 = 1 \text{ m} \cdot \text{s}/\text{kg}$

Unter den in Abschnitt 3.1 genannten Voraussetzungen des Tropfenaufpralls wird zunächst $Cn = 0,02$ gewählt, was einer Grenzflächendicke L_g von 0,17 mm (und $\varepsilon = 4,2 \cdot 10^{-5} \text{ m}$) für einen Durchmesser d_0 von 2,1 mm entspricht. Die Abbildung 3.3 zeigt den Verlauf des Ausbreitungsfaktors für eine Auflösung der Grenzfläche mit 4, 6, 8 und 10 Zellen, bzw. eine Auflösung des Tropfens N_d von 50, 75, 100, und 125 Zellen.

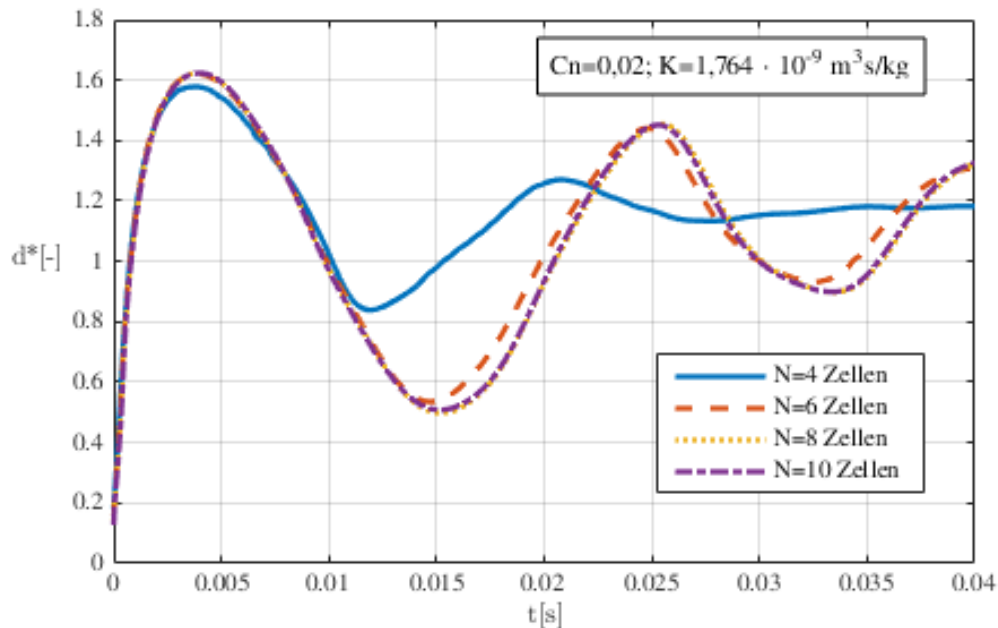


Abbildung 3.3: Untersuchung der Gitterabhängigkeit der Lösung für dem Ausbreitungsfaktor ($C_n = 0,02$ und $\kappa = 1,764 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$).

Ab $N = 8$ konvergieren die Simulationen zu einer Netz-unabhängigen Lösung: Die Abweichung der Kurven für 8 und 10 Zellen ist sehr klein und wird im Rahmen dieser Arbeit vernachlässigt. Die Auflösung ist ausreichend hoch, um den Diskretisierungsfehler akzeptabel klein zu halten. Die Abbildung zeigt auch, dass die Ausbreitung des Tropfens durch ungenügende Auflösung gedämpft wird. Der Gleichgewichtszustand aber scheint unabhängig von der Auflösung. Nur die dynamischen Effekte werden ungenau wiedergegeben.

Die Abbildung 3.4 zeigt den Verlauf des Ausbreitungsfaktors d^* für eine Auflösung der Grenzfläche für $C_n = 0,007$ mit 6, 8, 10 und 12 Zellen, bzw. eine Auflösung des Tropfens N_d von 214, 286, 357, und 429 Zellen. Es gibt hier noch große Unterschiede zwischen 8 und 10 Zellen. Eine genügend hohe Auflösung liegt hier erst bei $N = 10$ vor. Zusammenfassend muss die Auflösung der Grenzflächendicke N bei einer kleineren Cahn Zahl C_n prinzipiell erhöht werden, wenn $\kappa/\varepsilon^2 = 1 \text{ m} \cdot \text{s}/\text{kg}$.

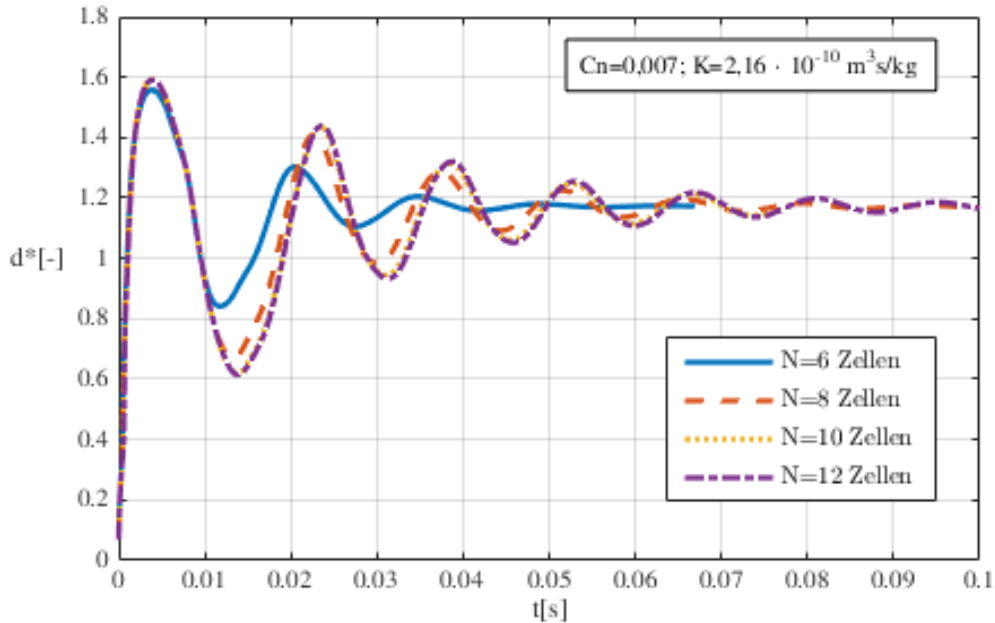


Abbildung 3.4: Untersuchung der Gitterabhängigkeit der Lösung für dem Ausbreitungsfaktor ($C_n = 0,007$ und $\kappa = 2,16 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$).

Wenn $\kappa/\varepsilon^2 = 1 \text{ m} \cdot \text{s}/\text{kg}$ gilt, stellt die Reduktion der Cahn-Zahl einen doppelten Aufwand dar: erstens erfordert die Abnahme der Grenzflächendicke zum gegebenen N kleinere Zellen; zweitens muss die Grenzfläche mit mehr Zellen aufgelöst werden (d.h. Δx wird noch kleiner), um Gitter unabhängige Ergebnissen zu erzielen.

Abhängigkeit von der Geschwindigkeit der DPKL

Die Auflösung der Grenzflächendicke ist auch von der Geschwindigkeit der DPKL abhängig, und damit von allen Parametern die einen Einfluss auf diese Geschwindigkeit haben. Darunter sind z.B. die Aufprallgeschwindigkeit, die Dichten und Viskositäten der Fluide.

Abbildung 3.5 zeigt den Verlauf des Ausbreitungsfaktors für einen Tropfenaufprall mit vertauschten Viskositäten für Luft und Wasser. Da Wasser viskoser ist als Luft, verlangsamt sich die Bewegung des Tropfens. Die kleinere Amplitude des Ausbreitungsfaktors im Vergleich zu 3.3 ist auf die höheren Reibungsverluste zurückzuführen. In der Abbildung sind die Kurven zu unterschiedlichen Auflösungen der Grenzflächendicke mit 4, 6 oder 8 Zellen dargestellt bei $C_n = 0,02$ und $\kappa = 1,76 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$. Das Verhalten ist schon ab $N=6$ Zellen konvergiert, im Gegensatz dazu bedarf es bei normalen Viskositäten 8 Zellen bei gleicher Cahn Zahl (siehe Abbildung 3.3). Dieser Vergleich zeigt anschaulich, dass bei höherer Geschwindigkeit der DPKL eine bessere Auflösung gewählt werden muss, um die dabei auftretenden, großen Gradienten abbilden zu können.

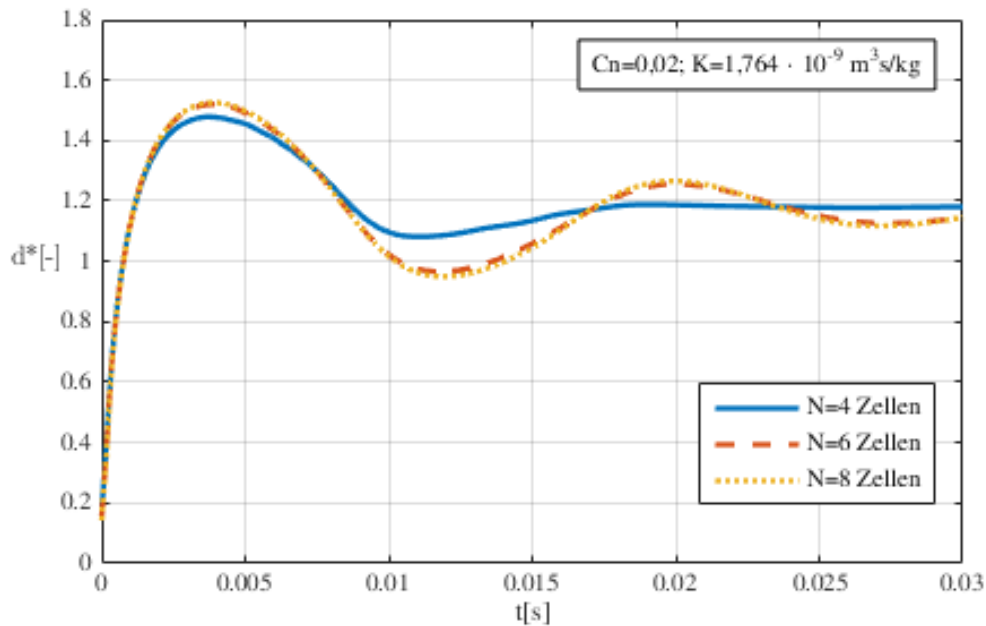


Abbildung 3.5: Untersuchung der Gitterabhängigkeit der Lösung für dem Ausbreitungsfaktor bei langsamerer Bewegung der DPKL ($C_n = 0,02$ und $\kappa = 1,76 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$).

Wenn die Auflösung nicht ausreichend hoch ist, ist die dynamische Phase der Ausbreitung von dem Gitter abhängig. Dieses Ergebnis soll noch einmal bestätigt werden an einer dreidimensionalen Simulation des Tropfenaufpralls: Der Berechnungsbereich besteht aus einem Viertel des Tropfens. Abbildung 3.6 zeigt die benetzte Oberfläche 0,0024s nach dem Aufprall. Zu diesem Zeitpunkt sind die Auswirkungen der schnelleren Bewegung der DPKL während der Ausbreitungsphase am deutlichsten sichtbar.

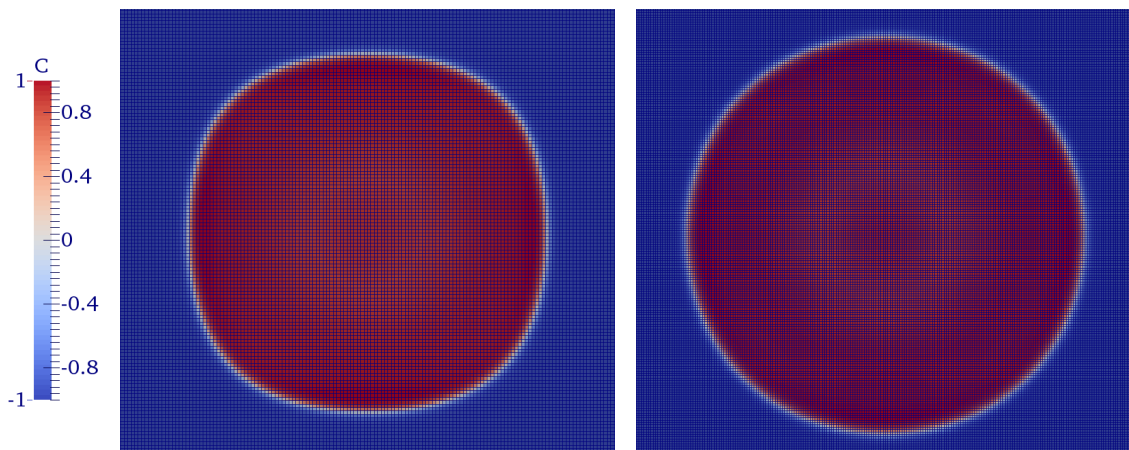


Abbildung 3.6: Benetzte Oberfläche (Rot) am $t=0,0024 \text{ s}$ mit sichtbarem Gitter bei nicht genügender Auflösung. (Links): $C_n = 0,01$; Auflösung von 4 Zellen (nicht genügend) (Rechts): $C_n = 0,01$; Auflösung von 6 Zellen

Im Rechengitter auf der linken Seite ist die Auflösung nicht genügend (4 Zellen für $C_n = 0,01$), im Gegensatz dazu besitzt die rechte Seite 6 Zellen. Da die Ausbreitung von dem Gitter abhängt, eine Abweichung von der erwarteten Kreisform kann auf der linken Seite wegen der Gittersabhängigkeit beobachtet werden, da die kubischen Zellen $\sqrt{2}$ -mal größer in diagonalen Richtung sind.

3.2.1.2 Courant Zahl und maximaler Zeitschritt

Während des Tropfenaufpralls spielen die Konvektion und die Diffusion eine wichtige Rolle. Was die Konvektion betrifft, so wird die Stabilität der Simulation mithilfe der zeitlichen Auflösung der Courant Zahl Co überprüft werden. Die Courant Zahl ist wie folgt definiert, die Berechnung im verwendeten Programm erfolgte jedoch mit bearbeiteten Daten ([2], Gleichung (27)).

$$Co = \frac{U \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad (3.5)$$

Δt stellt den Zeitschritt der Simulation dar, Δx ist die charakteristische Länge der Zellen und U wird mit dem Maximum der aktuellen Geschwindigkeitsverteilung abgeschätzt. Co_{max} wird als Ausgangsparameter vorgegeben. Damit wird der adaptativ Zeitschritt $\Delta t_{Co,max}$ für jede Iteration berechnet. Im Rahmen dieser Studie werden Co von 0,1 bis 0,01 angewendet.

Für die zeitliche Überwachung der Diffusion ist Co in der aktuellen verwendeten Programm nicht geeignet, da die Diffusionsgeschwindigkeit nicht enthalten ist. Anstatt die Courant-Bedingung zu nutzen, wurde der maximale Zeitschritt Δt_{max} manuell beschränkt. Er wurde so gewählt, dass der Transport durch Diffusion innerhalb des Zeitschrittes kleiner als eine Zellweite ist. Δt_{max} liegt in unserem Fall zwischen $5 \cdot 10^{-6}$ und $1 \cdot 10^{-7}$ s.

Zu jedem Zeitschritt werden $\Delta t_{Co,max}$ und Δt_{max} verglichen, und der kleinste Wert wird für den Zeitschritt angewendet.

Wenn feine Gitter genutzt werden, muss Δt_{max} und manchmal auch Co angepasst werden. Wenn Δt_{max} oder $\Delta t_{Co,max}$ zu groß sind, kann es zu Instabilitäten in der C-Verteilung kommen. Die Abbildung 3.7 zeigt eine Explosion des Tropfens aufgrund eines zu großen Zeitschritts in 2D. Diese Instabilitäten können festgestellt werden, indem die Geschwindigkeitsamplitude des Feldes betrachtet wird. Wird ein ausreichend kleiner Zeitschritt eingeführt, treten keine numerischen Instabilitäten auf. Eine weitere Reduktion des Zeitschritts liefert das gleiche Ergebnis.

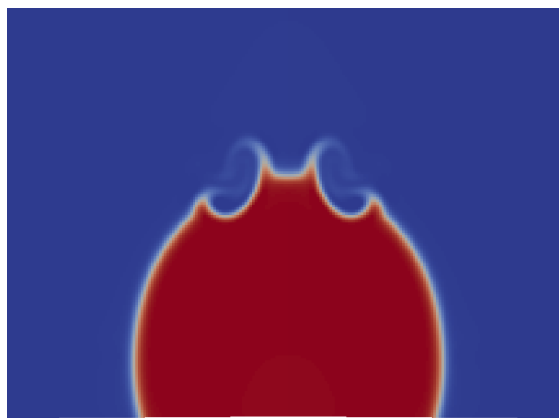


Abbildung 3.7: „Explosion“ eines Tropfens: Das Rechenverfahren wird instabil durch unzureichende Zeitschrittbegrenzung. (Hier Zeitschrittwahl mit $Co = 0,1$).

3.2.1.3 Mobilitätsfaktor

Der empirische Mobilitätsfaktor κ ist der Anpassungsparameter, der die Bewegung der DPKL beherrscht. Es ist ein phänomenologischer Parameter, der in dem Diffusionsterm

der CHG steht (siehe Abschnitt 2.2.1.2). Der Mobilitätsfaktor κ wird häufig von der Größenordnung von ε^2 angenommen [12]. Je größer der Mobilitätsfaktor κ ist, desto größer ist die Geschwindigkeit der DPKL. Die Abbildung 3.8 zeigt den Ausbreitungsfaktor d^* mit einem Referenzwert κ_{ref} von ε^2 , $\kappa_{ref}/5$ und $3 \cdot \kappa_{ref}$. Die Cahn Zahl beträgt hier 0,013, was $\varepsilon = 2,75 \cdot 10^{-5}$ m entspricht. Dementsprechend beträgt $\kappa_{ref} = 7,56 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$.

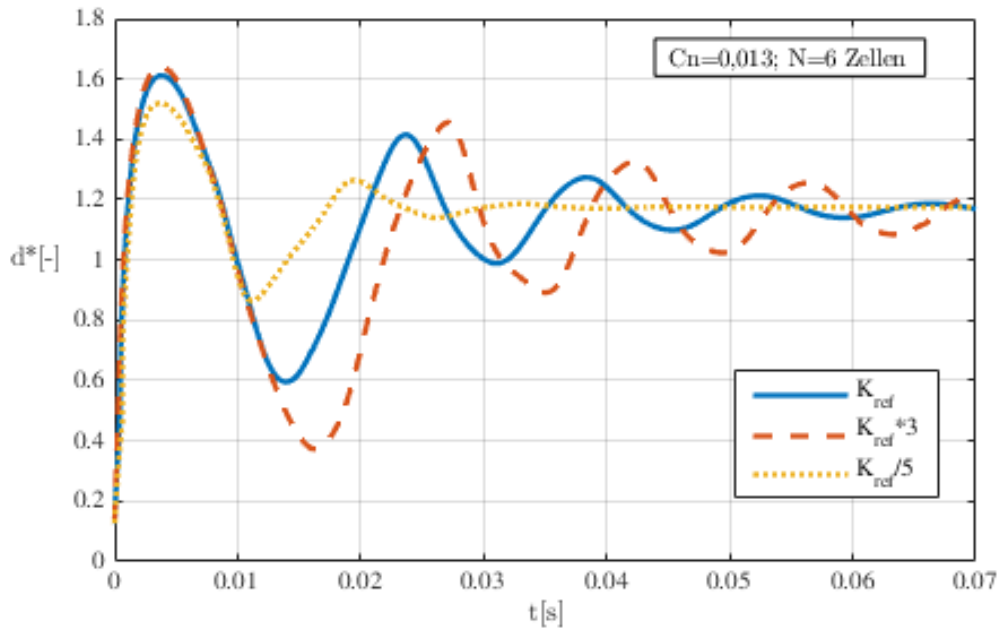


Abbildung 3.8: Verhalten des Ausbreitungsfaktors für verschiedenen Werte des Mobilitätsfaktors.

Die Amplitude der Bewegung ist stark gedämpft, wenn κ kleiner als ε^2 ist. Da er nur die Diffusion der DPKL beeinflusst, also ihre dynamische Bewegung, bleibt der Gleichgewichtszustand ungeändert. Jedoch wird er schneller erreicht. κ zu reduzieren stellt also eine Möglichkeit dar, den Rechenaufwand zu verringern, wenn nur der Gleichgewichtszustand von Interesse ist. Das gilt natürlich nur, wenn das Einschwingen keinen Einfluss auf den Gleichgewichtszustand hat, so wie es sich bei glatten Oberflächen verhält.

Im Gegenteil dazu führt ein großes κ zu schnellen und großen Bewegungen. Der Rechenaufwand ist dann viel größer: Erstens steht κ im Diffusionsterm zweiter Ordnung, was zur numerischen Empfindlichkeit führt. Zweitens muss der maximale Zeitschritt verringert werden, um numerische Instabilitäten der C-Verteilung zu vermeiden. Drittens fordert eine schnelle Bewegung eine feine Gitterauflösung der Grenzfläche (siehe Abschnitt 3.2.1.1). Große κ sind also eher zu vermeiden, außer wenn es von der Anpassung zu den realen Werten gefordert wird, da κ aus den Experimenten bestimmt wird.

3.2.2 Physikalische Parameter

Im folgenden Abschnitt wird der Einfluss verschiedenen physikalischer Parameter auf dem Ausbreitungsfaktor untersucht. Dabei werden durchgängig $Cn = 0,013$ und $\kappa = 7,56 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$ gewählt. Der Wert $Cn = 0,01$ wurde bei Cai *et al.* [5] empfohlen, als guter Kompromiss zwischen Rechenaufwand und Genauigkeit. Die Grenzfläche wird mit 6 Zellen diskretisiert.

3.2.2.1 Gleichgewichtskontaktwinkel

Der Gleichgewichtskontaktwinkel (GGKW) von PDMS liegt bei $100,3^\circ$. Im Fall einer SHO ist θ_{ggw} größer als 140° . Einige speziellen beschichteten Oberflächen besitzen diese Eigen-

schaft. Die Abbildung 3.9 vergleicht einen Fall mit $\theta_{\text{ggw}} = 140^\circ$ und mit $\theta_{\text{PDMS,ggw}} = 100,3^\circ$.

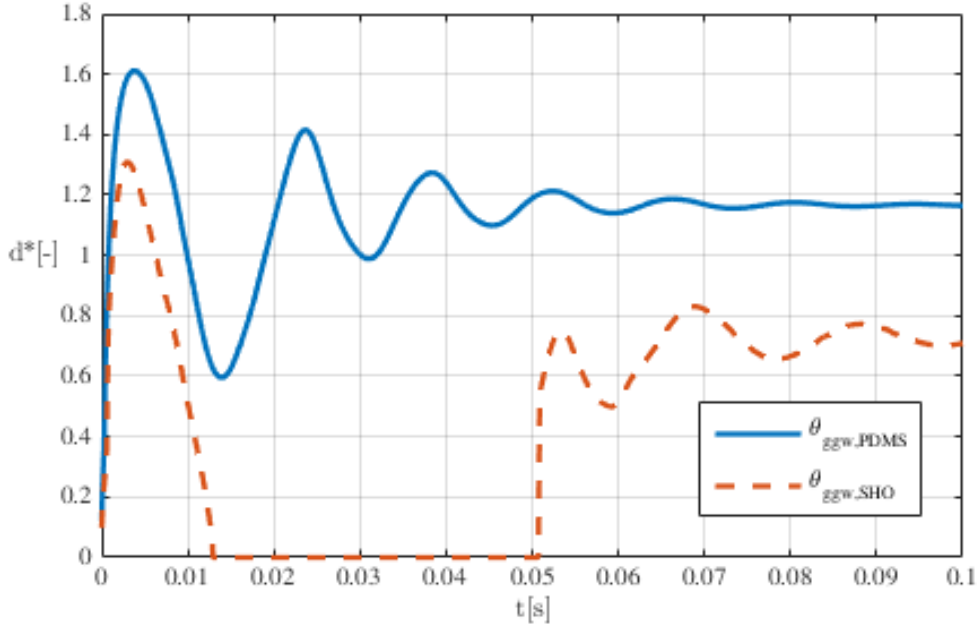


Abbildung 3.9: Verhalten des Ausbreitungsfaktors für eine PDMS Oberfläche ($\theta_{\text{PDMS,ggw}} = 100,3^\circ$) und eine SHO ($\theta_{\text{ggw}} = 140^\circ$).

Der Trend, dass ein höherer GGKW zu kleinerem Ausbreitungsfaktor führt, erscheint hier auch deutlich für d_{max}^* und d_{ggw}^* . Der Gleichgewichtsausbreitungsfaktor $d_{\text{ggw,PDMS}}^*$ liegt leicht unter der Schwelle von hydrophilem zu hydrophobem Charakter von 1.29 während $d_{\text{ggw,SHO}}^*$ kleiner als 1 ist. Die zeitlichen Entwicklungen der ersten Ausbreitungs- und Rückzugsphase sind einander ähnlich. Aber die Amplituden sind stark unterschiedlich, was einem großen Unterschied der Ausbreitungsgeschwindigkeiten entspricht. In der ersten Ausbreitungsphase sind die durchschnittlichen Geschwindigkeiten der DPKL ungefähr gleich: 0,336 m/s für die PDMS Oberfläche und 0,3 m/s für die SHO, dies entspricht einer relativen Abweichung von 10 %. Die Abweichung ist klein, da die erste Ausbreitungsphase maßgeblich durch den Impuls des Tropfens vom Aufprall angetrieben ist.

Die durchschnittlichen Geschwindigkeiten der DPKL sind auch ungefähr gleich 0,105 m/s für die PDMS Oberfläche und 0,1365 m/s für die SHO, was einem Geschwindigkeitsunterschied von ungefähr 30 % entspricht. Im Gegensatz zur Ausbreitungsphase ist die Rückzugsphase meistens von der Benetzbarkeit, die sich in θ_{ggw} ausdrückt, angetrieben.

Ob der Tropfen abprallt hängt von der Rückzugsphase ab. Bei niedriger Benetzbarkeit kann der Rückzug so stark sein, dass er zu einem totalen Abprall des Tropfens führt. Dieser Abprall passiert, wenn $d^* = 0$, wie es ist auf die Abbildung 3.9 für $\theta_{\text{ggw,SHO}}$ zu sehen ist. Der Wiederaufprall passiert mit einer niedrigeren Geschwindigkeit als beim ersten Aufprall, da ein Teil der kinetischen Energie durch Reibung dissipiert wurde. Wenn der Tropfen wieder aufprallt, kann sich unter ihm ein Lufteinschluss bilden. Dieses Verhalten ist experimentell schwierig zu beobachten. Die Abbildung 3.10 zeigt einen Schnitt des Tropfens im Gleichgewichtszustand mit Lufteinschluss nach dem Wiederaufprall; d^* liegt bei 0,729 in diesem Fall. Der Lufteinschluss ist zu klein gegenüber dem gesamten Tropfenvolumen, um einen bedeutenden Einfluss auf den Ausbreitungsfaktor erlangen zu können. Zum Vergleich wurde ein ähnlicher Tropfen auf die gleiche Oberfläche ohne Lufteinschluss aufgebracht. Er erreichte im stationären Zustand einen Ausbreitungsfaktor von $d_{\text{ggw}}^* = 0,706$. Der Un-

terschied beträgt 3%. Es ist zu beachten, dass die Größe des Lufteinschlusses mit der Zeit abnimmt. Das ist auf die hohe lokale Cahn Zahl zurückzuführen, welche zu numerischer Diffusion führt (siehe Abschnitt 3.2.1.1).

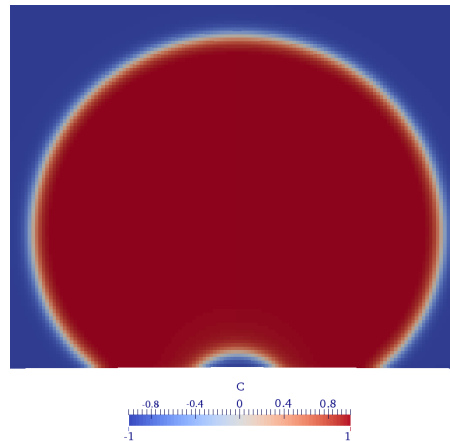


Abbildung 3.10: Lufteneneinschluss unter dem Tropfen im Gleichgewichtszustand ($t=0,14s$) auf einer SHO ($\theta_{ggw} = 140^\circ$).

3.2.2.2 Aufprallgeschwindigkeit

Der Impuls des Tropfens beim Aufprall ist abhängig von der Aufprallgeschwindigkeit. Eine Erhöhung dieser Geschwindigkeit bringt dem Tropfen mehr Energie für die Ausbreitung, d.h. eine größere Amplitude der Bewegung. Die Tropfenaufprallexperimente wurden mit Aufprallgeschwindigkeiten zwischen 0,5661 und 0,6491m/s durchgeführt, der Mittelwert beträgt 0,62m/s. Die Abbildung 3.11 zeigt den Verlauf des Ausbreitungsfaktors für die 2 Grenzwerte und den Mittelwert, um den Einfluss auf die Amplitude abzuschätzen.

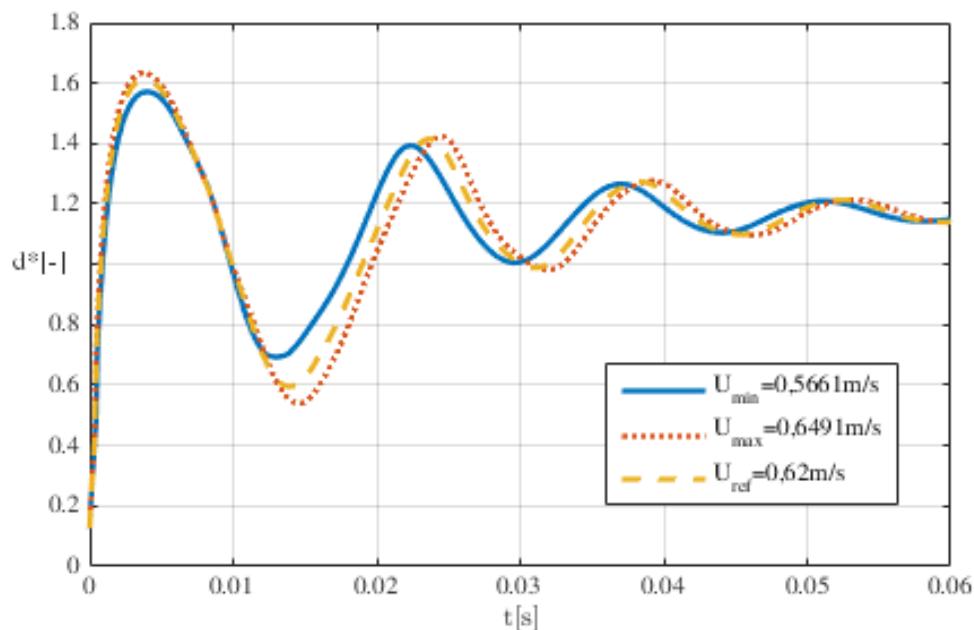


Abbildung 3.11: Einfluss der maximalen und minimalen experimentellen Aufprallgeschwindigkeiten auf den Ausbreitungsfaktor.

In dieser Geschwindigkeitsreihe ist der Einfluss auf d_{max}^* geringer als auf d_{min}^* (nach der ersten Rückzugsphase). Dieses Phänomen ist auf einen Skalierungsfaktor zurückzuführen:

der Ausbreitungsfaktor ist proportional zu d_{benetzt} , während die kinetische Energie mit der Oberfläche verbunden ist, d.h. proportional zur d_{benetzt}^2 . Die Abbildung 3.12 zeigt den Verlauf von $(d^*)^2$. Wegen der Reibungsverluste gewinnen die Kapillarkräfte an Bedeutung für die nächsten Schwingungsperioden. Die Phasenverschiebung, die während der Rückzugsphase entsteht, bleibt bis zum Gleichgewichtszustand ungefähr konstant.

Die Wahl von $V=0,62\text{m/s}$ stellt einen guten Kompromiss dar zwischen den Geschwindigkeitsgrenzwerten, die die Amplitude und das zeitliche Verhalten beeinflusst.

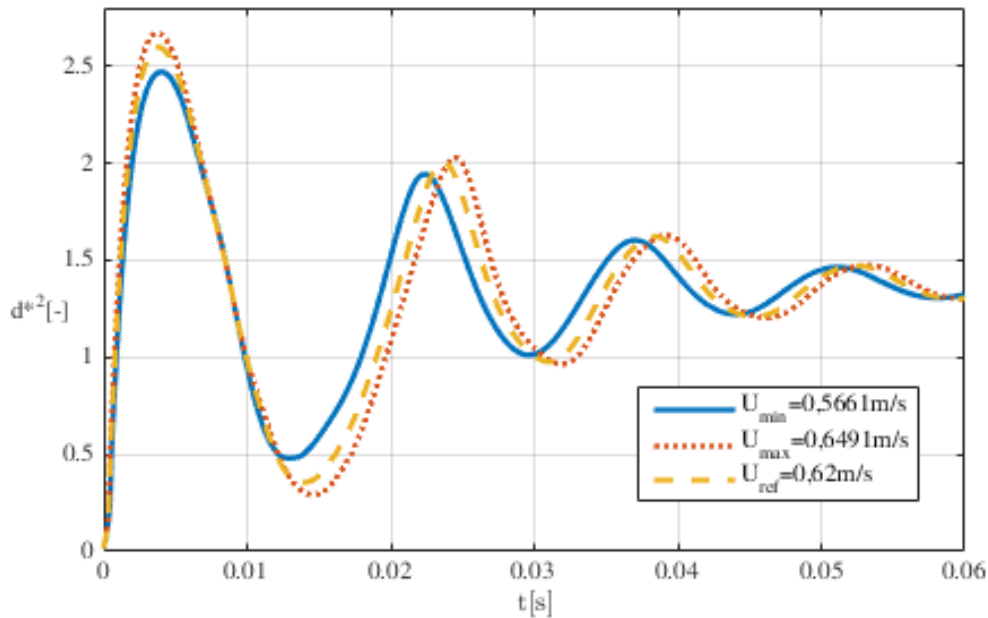


Abbildung 3.12: Vergleich der maximalen und minimalen experimentellen Aufprallgeschwindigkeiten im Bezug auf der benetzten Oberfläche.

3.2.2.3 Durchmesser

Bei den Experimenten, die hier zum Vergleich dienen, wurde der Tropfen über eine Spritze aufgebracht. Dadurch war der Durchmesser des Tropfens gut reproduzierbar. Der maximale bzw. der minimale Durchmesser wurde auf $d_0 = 2,076\text{mm}$ bzw. $d_0 = 2,094\text{mm}$ bestimmt. Die Abbildung 3.13 zeigt den zeitlichen Verlauf des Ausbreitungsfaktors d^* beim Tropfenaufprall mit den zwei oben genannten Tropfendurchmessern und den Mittelwert $d_0 = 2,1\text{mm}$. Es zeigt sich, dass der Einfluss des Durchmessers in dieser Wertereihe vernachlässigbar ist. Am deutlichsten sichtbar ist eine kleine Phasenverschiebung der transienten Schwingung. Dies erklärt sich mit der kleineren Trägheit des kleineren Tropfens, der daher schneller schwingt. Für die weiteren Simulationen wird der Wert $d_0 = 2,1\text{mm}$ genommen.

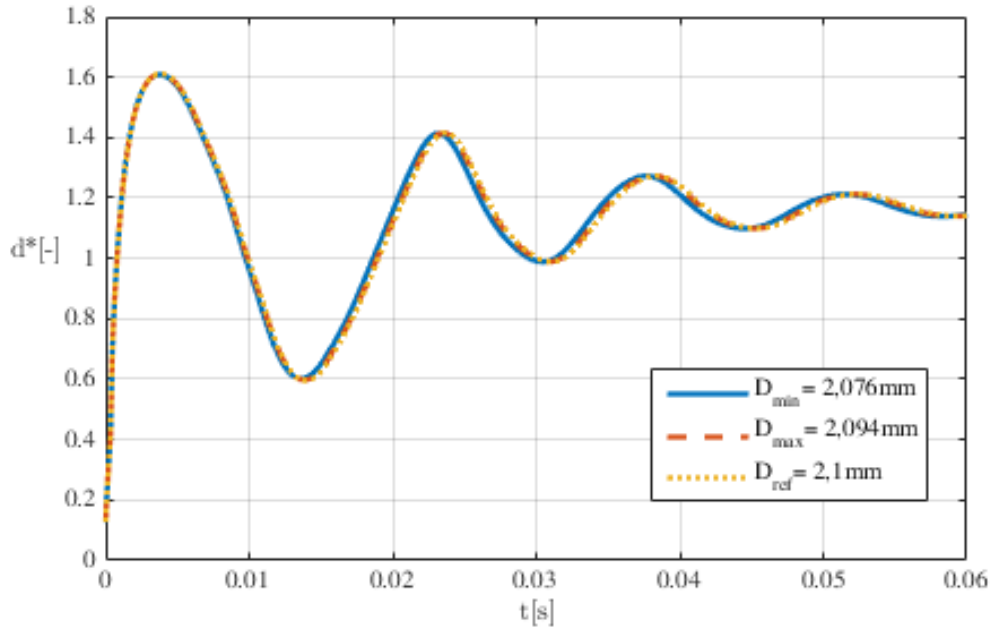


Abbildung 3.13: Vergleich der maximalen und minimalen experimentellen Durchmesser im Bezug auf den Ausbreitungsfaktor.

3.3 Vergleich mit experimentellen Daten

Die Tropfenaufprallexperimente wurden mit einer Bildbearbeitung ausgewertet, sodass Kontaktwinkel und Ausbreitungsfaktor bekannt sind. Die Abbildung 3.16 (links) zeigt den Aufprall eines Tropfens auf eine glatte PDMS Oberfläche mit einem partiellen Abprall: der Satellit bildet sich, ohne den Tropfen zu verlassen. Die folgenden Parameter wurden für die Nachbildung des Experiments gesetzt: Ausgangsdurchmesser $d_0 = 2,1$ mm und Aufprallgeschwindigkeit $V = 0,62$ m/s, nach den Ergebnissen der Sensitivitätsanalyse (siehe Abschnitt 3.2.2). Die Cahn Zahl beträgt 0,01 und es wurde $N = 6$ gewählt. Der untersuchte Parameter ist der Ausbreitungsfaktor. Der Durchmesser der benetzten Oberfläche d_{benetzt} wurde dank einer numerischen Probe, die von dem Aufprallpunkt (Zentrum der benetzten Oberfläche) bis zum letzten positiven Wert der Phasenparameter geht. Die Grenzfläche entspricht der Fläche $C = 0$. Der Fehler für diese Messmethode entspricht der Größe einer Zelle für den Radius, d.h. $14,6 \mu\text{m}$, welche ein Unterschied von $1,4 \cdot 10^{-2}$ für d^* entspricht. Die Abbildung 3.14 zeigt den Verlauf des Ausbreitungsfaktors für eine Vergleichskurve aus der Experiment und die entsprechende Simulation.

3.3.1 Ausbreitungsphase

Zunächst ist festzustellen, dass während der Ausbreitungsphase Amplitude und Phase des Ausbreitungsfaktors in Versuch und Simulation überein stimmen. Der Tropfen erreicht seinen maximalen Ausbreitungsfaktor bei $t \approx 0,004$ s mit $d_{\text{exp}}^* = 1,63$ im Experiment und $d_{\text{num}}^* = 1,61$ in der Simulation. Die relative Abweichung beträgt 1,2%. Das zeigt, dass der Mobilitätsfaktor κ mit $\kappa/\varepsilon^2 = 1 \text{ m} \cdot \text{s}/\text{kg}$ gut abgeschätzt wurde. Die Abbildung 3.15 vergleicht die Form der Tropfen zum Zeitpunkt der maximalen Ausbreitung. Die numerische Darstellung erlaubt es, das Zentrum des Tropfens zu beobachten, welches die Bildung des kommenden Satellits bedingt.

In Abbildung 3.14 ist zu beobachten, dass die Kurve des Experiments zum Zeitpunkt der maximalen Ausbreitung einen flachen Verlauf hat. D.h., dass der Tropfen länger an der

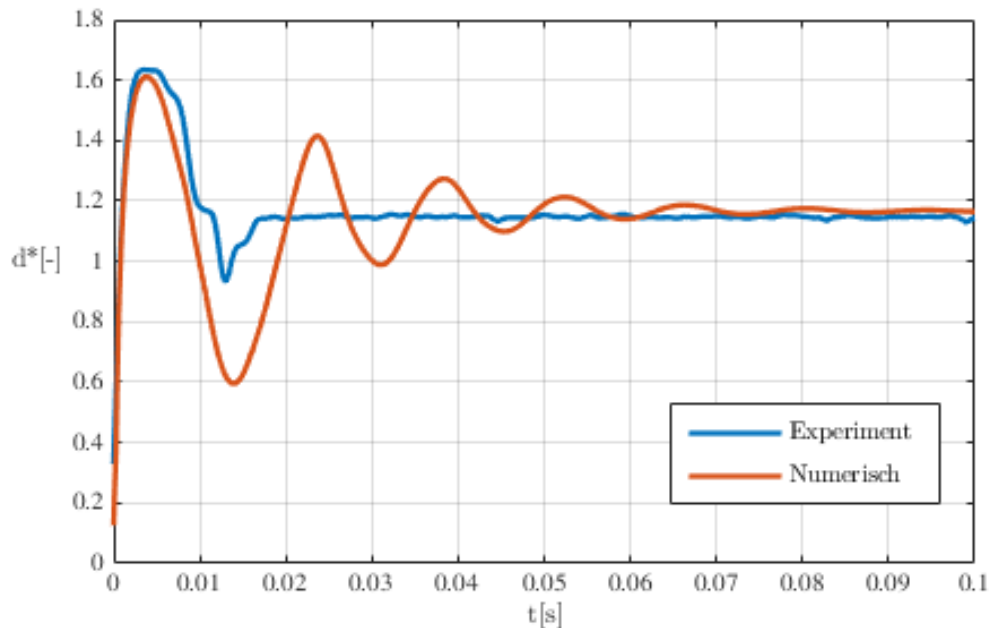


Abbildung 3.14: Zeitlicher Verlauf des Ausbreitungsfaktors eines experimentellen Tropfenaufpralls auf einer glatten PDMS Oberfläche und Simulation bei gleichen Parametern.

Oberfläche haftet. Zu diesem Zeitpunkt ändert sich der Kontaktwinkel stark, um die Rückzugsphase anzutreiben. Die Grenzwerte des Kontaktwinkels bei $d^* \approx d_{\max}^*$ im Experiment können Abbildung 3.15 entnommen werden. Die Simulation stellt dieses Verhalten nicht genau dar, da der lokale Kontaktwinkel durch eine Randbedingung fest vorgegeben wird. Dazu kommt, dass kein zusätzliches Modell hinzugefügt wurde, um die reale Änderung des Kontaktwinkels am konstanten Ausbreitungsfaktor darzustellen. Das bedeutet auch, dass in der Simulation die Rückzugsphase unverzüglich nach Ende der Ausbreitungsphase einsetzt, während in der Realität, wie beobachtet, ein kurzes Haften vorliegt. Es ist weiterhin anzumerken, dass die Oberfläche im Experiment nicht perfekt glatt ist. Die Rauigkeiten bilden Energiebarrieren gegen die Ausbreitung des Fluids. Zum Zeitpunkt, während der Ausbreitungsfaktor maximal ist, ist die Geschwindigkeit der DPKL Null. Die zur Verfügung stehende Impulsenergie ist zum Zeitpunkt der maximalen Ausbreitung klein, wodurch sich wiederum die Haftung der DPKL erhöht, und dadurch die Energiebarriere noch schwieriger zu überwinden ist.

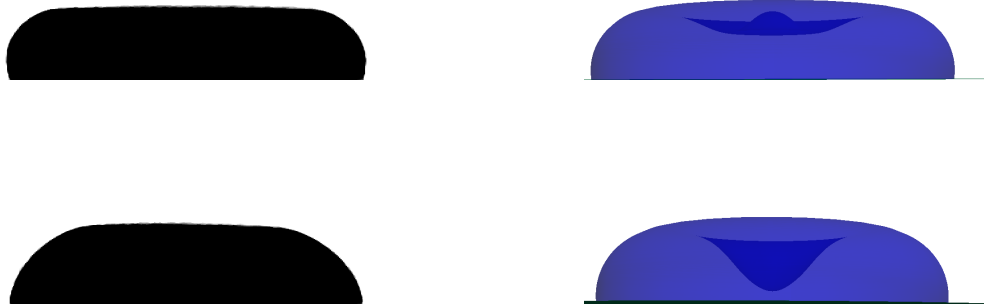


Abbildung 3.15: Tropfenaufprall auf einer glatten PDMS Oberfläche zum Zeitpunkt maximaler Ausbreitung.
 (Links): Starke Änderung des Kontaktwinkels zum Zeitpunkt maximaler Ausbreitung im Experiment. (Rechts): Simulation an der Ausbreitungszeit $t=0,004\text{s}$ (Oben) und $t=0,0052\text{s}$ (Unten).

3.3.2 Rückzugsphase und Oszillationen

Nach der Ausbreitung zieht sich der Tropfen wieder zurück. Der Tropfen im Experiment erreicht schnell seinen stationären Gleichgewichtswert des Ausbreitungsfaktors. Nur die Schwingung des Satelliten stört diese Phase und führt zu einer kurzen Abweichung vom Gleichgewicht. Sowohl im Experiment als auch in der Simulation schwingt der Satellit, aber nur in der Simulation führen diese Schwingungen zu einer Bewegung der DPKL (siehe Abbildung 3.16).



Abbildung 3.16: Tropfenaufprall auf glatter Oberfläche mit Entstehung des Satelliten.

Die Oszillationsphase resultiert aus einem Ungleichgewicht zwischen Impulskräften (bedingt durch Aufprallgeschwindigkeit und Gravitation) und Kapillarkräften. Die Dämpfung ist auf die viskosen Kräfte zurückzuführen. Die viskosen Kräfte sind meistens mit der Haftung an der Wand verbunden. Diese Haftung ist, wie oben beschrieben, im Experiment größer aufgrund von Rauigkeit, Unebenheit oder Verschmutzung der realen Oberfläche. Eine genaue Darstellung der transienten Schwingung ist schwierig, da die Reibungseffekte aufgrund der realen Oberfläche zusätzlich modelliert werden müssten.

3.3.3 Gleichgewichtszustand

Wegen den Oszillationen wird der Gleichgewichtszustand in der Simulation viel später erreicht als im Experiment. Ab $t = 0,1\text{s}$ bleibt der Ausbreitungsfaktor auch in der Simulation konstant. Der stationäre Wert des Ausbreitungsfaktors liegt im Experiment bei $d_{\text{exp}}^* = 1,15$, in der Simulation bei $d_{\text{num}}^* = 1,17$ (kleine relative Abweichung von 1,7%). Die Formen der Tropfen im Gleichgewichtszustand sind sich ähnlich, wie in Abbildung 3.17 zu sehen.



Abbildung 3.17: Gleichgewichtszustand eines Tropfens auf einer glatten PDMS Oberfläche. (Links): Experiment; (Rechts): Simulation.

Da der Durchmesser des Tropfens unter der Kapillarlänge L_c (2.1) von 2,7 mm für Wasser liegt, kann der liegende Tropfen als eine Kugelkappe angenähert werden. Diese Kappe ist in jener Ebene geschnitten, die einen Winkel von θ_{ggw} mit der Kugeloberfläche bildet. Des weiteren soll die Kugelkappe das gleiche Volumen haben wie der Tropfen vor dem Aufprall. Der Wert von d_{ggw}^* kann nun an der Kugelkappe wie folgt berechnet werden:

$$d_{\text{ggw}}^* = \sin(\theta_{\text{ggw}}) \sqrt[3]{4} (2 - 3 \cos(\theta_{\text{ggw}}) + \cos^3(\theta_{\text{ggw}}))^{-1/3} \quad (3.6)$$

Diese Formel gilt ausschließlich für $\theta_{\text{ggw}} > 90^\circ$.

Bei einem Kontaktwinkel von $\theta_{\text{ggw}} = 100,3^\circ$ findet diese Näherung einen Ausbreitungsfaktor von 1,146. Dieser liegt leicht unter dem experimentell gefundenen Wert. Die Abweichung kann auf den Einfluss der Gravitation zurück geführt werden, die den realen Tropfen leicht abplattet.

4. Tropfenaufrall auf strukturierten Oberflächen

Mithilfe der Sensitivitätsanalyse und dem Vergleich mit experimentelle Daten für Tropfenaufrälle auf glatter Oberfläche können die Einflüsse der Parameter für die Tropfenaufrälle auf strukturierten Oberfläche bestimmt werden: der Mobilitätsfaktor κ wird so gewählt, dass $\kappa/\varepsilon^2 = 1 \text{ m} \cdot \text{s}/\text{kg}$ erfüllt wird, was eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten ergeben hat. Mit dieser Bedingung für κ führen Cahn Zahlen unter 0,01 zu großem Rechenaufwand, da eine starke Erhöhung der Auflösung der Grenzflächendicke und eine Verringerung des Zeitschritts gefordert wird. Es werden die Fluideigenschaften, wie in Tabelle 3.1 angegeben, verwendet. Die Tropfenaufrallbedingungen werden mit $d_0 = 2,1 \text{ mm}$ und $V = 0,62 \text{ m/s}$ senkrecht zur Oberfläche definiert. Zuerst wird die Wahl einer gerillter Strukturierung erklärt. Dann werden die damit verbundenen Herausforderungen im Bezug auf Cahn Zahl und Auflösung erläutert. Zum Schluss werden die Ergebnisse der Tropfenaufrallsimulation auf $60 \mu\text{m}$ und $180 \mu\text{m}$ gerillter Oberfläche vorgestellt.

4.1 Charakteristik der Strukturierung

Die Benetzbarkeit glatter Oberflächen ist zur Zeit auf einen GGKW von 120° für beschichtete Oberflächen begrenzt [16]. Eine Strukturierung der Oberfläche erlaubt es die Benetzbarkeit zu verändern (siehe Abschnitt 2.1.2). Je nach gewünschten Benetzbarkeitseigenschaften ist eine Vielzahl von Strukturierungen möglich. Zunächst wird eine Erklärung für die Auswahl gerillter Oberflächen ihrer Größe erläutert. Zunächst wird die Bedeutung der Strukturierung im Bezug auf den Tropfen diskutiert.

4.1.1 Charakteristiken der Rillenstruktur

Eine geringe Benetzbarkeit kann bei internen Strömungen zu Reibungsminderung führen. Eine gerillte Oberfläche erlaubt die Benetzbarkeit einer glatter Oberfläche zu verringern. Sie führt zu einer anisotrope Benetzbarkeit, da sich die Flüssigkeit entlang und quer zu den Rillen unterschiedlich verhält: entlang der Rillen entspricht die Benetzbarkeit ungefähr der auf der entsprechenden glatten Oberfläche. Im Gegensatz dazu ist die Benetzbarkeit quer zu den Rillen viel kleiner [13].

Es wurde gezeigt, dass Rillen von $60 \mu\text{m}$ Tiefe, Breite und Abstand besonders effizient für die Anwendung im Strömungskanal sind, mit einer Reibungsminderung bis 50 % [9].

Abbildung 4.1 (links) zeigt das Aussehen dieser strukturierten Oberfläche. Bei dieser Topographie ist die Verhältniszahl $r = 2$ und der Quotient $\Phi_s = 1/4$ (siehe Abschnitt 2.1.2). Φ_s stellt das Verhältnis zwischen der benetzten Oberfläche im Cassie-Baxter Zustand (vorstehende Oberfläche der Rillenstruktur) und der, die im Wenzel Zustand auftritt (gesamte Oberfläche), dar. Das Verhältnis r ist ein Maßstab der Rauigkeit der Oberfläche.

Zusätzlich wurde beobachtet, dass ein steigender Abstand zwischen Rillen mit konstanter Verhältniszahl r zu noch größerer Reibungsminderung führt [9]: im Fall quadratischer Rillen entspricht diese Bedingung einer Skalierung der Rillen mit größeren Rillenabmessungen. Daher ist es vorteilhaft, möglichst große quadratische Rillen zu verwenden.

Diese starke Reibungsminderung tritt aber nur im Cassie-Baxter Zustand auf: der Übergang in den Wenzel Zustand lässt dieses vorteilhafte Verhalten verschwinden. Der Cassie-Baxter Zustand ist metastabil, da der GGKW von der PDMS Oberfläche ($\theta_{\text{PDMS,ggw}} = 100, 3^\circ$) unter dem kritischen Kontaktwinkel des stabilen Cassie-Baxter Zustands ($\theta_{\text{krit}} = 115, 4^\circ$ für diese Topographie, siehe Gleichung 2.4) liegt. Dazu kommt, dass die Stabilität des Cassie-Baxter Zustands umgekehrt proportional zu Rillenbreite ist [20], welche in unserem Fall der Rillenabmessung entspricht: je größer die quadratischen Rillen sind, desto instabiler ist der Cassie-Baxter Zustand. Dieser Trend ergibt eine obere Grenze für die Rillengröße mit dem Ziel der Reibungsminderung in Strömungskanälen.

In den folgenden Abschnitten werden die Tropfenaufprallsimulationen auf quadratischer Rillen von 60 und $180 \mu\text{m}$ durchgeführt. Die Topographien der Oberflächen sind in beiden Fälle $r = 2$ und $\Phi_s = 1/4$.

4.1.2 Größenbeziehung zwischen Tropfen und gerillter Oberfläche

Eine Strukturierung wird als bedeutend für einen Tropfen betrachtet, wenn die Höhe der Strukturierung größer als 100 nm (RMS) ist [17]. Je scharfkantiger die Strukturierung ist, desto größer ist auch ihre Auswirkung. Quadratische Rillen von $60 \mu\text{m}$ und $180 \mu\text{m}$ erfüllen diese Voraussetzung. Die relative Größe des Tropfens gegenüber der Strukturierung ist auch wichtig, um die Benetzbarkeitseigenschaften zuverlässig zu bestimmen. Dafür muss der Tropfen viel größer als die Strukturierung sein, d.h. mindestens um Faktor 10 der typischen Länge. In unserem Fall ist der Durchmesser des Tropfens mit $2,1 \text{ mm}$ 35-mal größer bzw 11-mal größer als die 60 bzw $180 \mu\text{m}$ Rillen. In Abbildung 4.1 sind die Tropfen vor dem Aufprall auf die beiden betrachteten gerillten Oberflächen zu sehen.

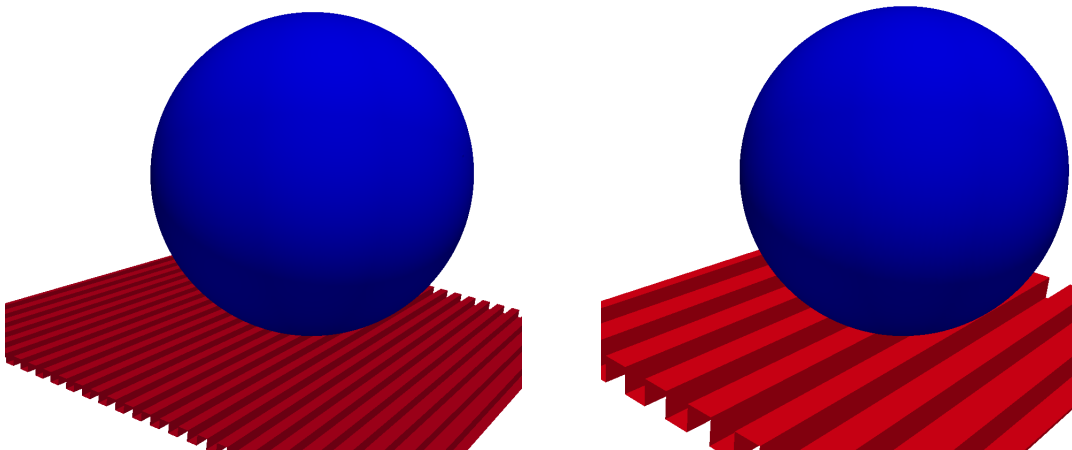


Abbildung 4.1: Tropfen vor dem Aufprall auf einer $60 \mu\text{m}$ (Links) und $180 \mu\text{m}$ (Rechts) gerillten Oberfläche.

Unter dieser Bedingung können die Formeln für den GGKW im Wenzel und im Cassie-Baxter Zustand eingesetzt werden. Mit $r = 2$ ergibt die Gleichung 2.5 im Wenzel Zustand

ein GGKW von $\theta_{W,ggw} = 110,9^\circ$. Im Cassie-Baxter Zustand (Gleichung 2.6) entspricht $\Phi_s = 1/4$ einem GGKW von $\theta_{CB,ggw} = 142,6^\circ$. Das bedeutet, dass diese gerillte Oberfläche im Cassie-Baxter Zustand als SHO betrachtet werden kann. Da die Benetzbarkeit anisotropisch ist, gelten diese Werte in Richtung kleinerer Benetzbarkeit, d.h. quer zur Rillenrichtung.

4.2 Herausforderung der Simulation

Die Simulation eines Tropenaufpralls auf einer gerillten Oberfläche kann, im Gegensatz zu glatten Oberflächen, nicht mithilfe eines 2D-rotationssymmetrischen Berechnungsgitters dargestellt werden. Die 3D-Simulation ist aufwändiger, da das Berechnungsgitter viel größer ist. Dazu kommt, dass die Auflösung an die Rillenabmessung angepasst werden muss. Zunächst wird das Verhalten des Tropfens auf den Rillen untersucht, um die nötige Auflösung zu bestimmen. Anschließend werden die Erzeugung, Anforderung und Charakteristiken des gesamten Gitters vorgestellt.

4.2.1 Voraussetzung für Cahn Zahl und Auflösung

Die Strukturierung einer Oberfläche besteht aus einer Vielzahl kleiner Rillen. Bei der Wahl der Grenzflächendicke muss analog zum Einfluss kleinerer Systeme wie Luftpneinschlüssen (siehe Abschnitt 3.2.1.1) die Größe der Rillen berücksichtigt werden. Eine zu große Grenzflächendicke L_g bezogen auf eine gegebene Rillenabmessung L_R würde zu einer numerischen Diffusion des Tropfens in die Rillen führen. Das Verhältnis zwischen der Grenzflächendicke und der Rillenabmessung muss also sorgfältig gewählt werden, um eine physikalische Benetzung von einer numerischen Benetzung der Rillen zu unterscheiden. Als Beispiel werden zwei 3D-Simulationen mit $L_R=60\ \mu\text{m}$ durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.2 dargestellt. In der ersten Simulation (linke Seite) ist die Grenzflächendicke L_g ungefähr gleich $120 \cdot 10^{-6}\ \text{m}$, was doppelt so groß wie die Rillenabmessung L_R ist. In der zweiten Simulation (rechte Seite) ist die Grenzflächendicke L_g halb so groß, d.h. $L_g = L_R$. Die Auflösung der Grenzflächendicke und die Tropfenaufprallbedingung sind in beiden Fällen gleich. Es ist in der Abbildung zu beobachten, dass der Tropfen in der ersten Simulation die Rillen benetzt, was in der zweiten Simulation nicht passiert. Die Benetzung ist also auf eine numerische Diffusion des Tropfens in die Rillen zurückzuführen.

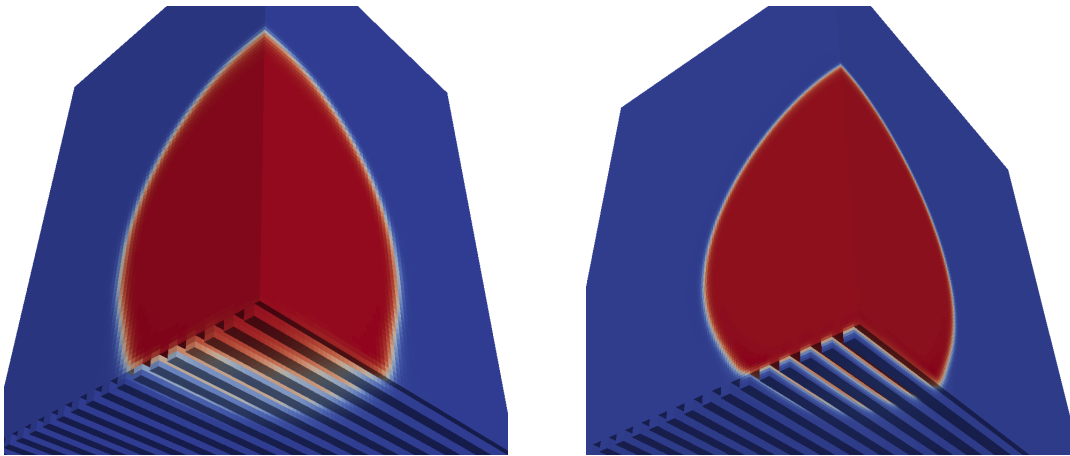


Abbildung 4.2: Tropfenaufprall mit unterschiedlichen Verhältnissen Grenzflächendicke L_g über Rillenabmessung L_R (Links: $L_g/L_R = 2$; Rechts: $L_g/L_R = 1$). Ein Viertel des Tropfens zum gleichen Zeitpunkt.

Ein Verhältnis Grenzflächendicke über Rillenabmessung L_g/L_R von 1 für die $60\ \mu\text{m}$ Rillen entspricht einer Cahn Zahl von $Cn = 0,007$, welche in 3D sehr aufwändig ist (siehe benötigte Auflösung N für $Cn=0,007$ im Abschnitt 3.2.1.1). Mit steigender Cahn Zahl sinkt der

erforderliche Rechenaufwand. Es wurde aber in Abbildung 4.2 gezeigt, dass bereits ein Verhältnis von 2 zur numerischen Diffusion in die Rillen führt. Daher wird ein Verhältnis L_g/L_R zwischen 1 und 2 untersucht. Für die $180\ \mu\text{m}$ Rillen entspricht ein Verhältnis von 1 einer Cahn Zahl von 0,02, welches einen angemessenen Rechenaufwand bedeutet, ohne die Genauigkeit für unserer Betrachtung zu verschlechtern.

Um die numerische Diffusion der Grenzfläche über den Rillen abzuschätzen, werden 2D-Simulationen durchgeführt. Die Ebene stellt einen Schnitt des Tropfens quer zu den Rillen dar und ist in Abbildung 4.3 dargestellt.

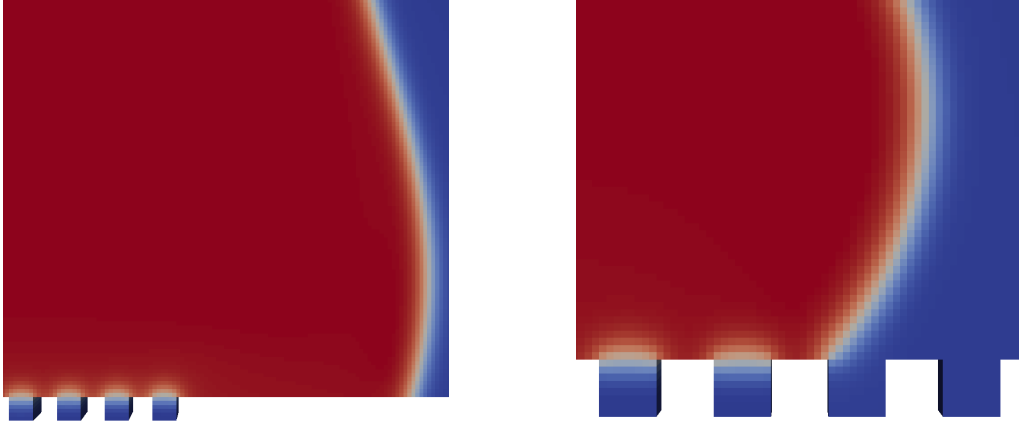


Abbildung 4.3: Lokales Verhalten der Grenzfläche in einer 2D-ebene Tropfenaufprall.
(Links): $60\ \mu\text{m}$ Rillen, $C_n=0,01$, $N=9$. (Rechts): $180\ \mu\text{m}$ Rillen, $C_n=0,02$, $N=8$.

Auf der linken Seite beträgt das Verhältnis $L_g/L_R = 1,5$ für die $60\ \mu\text{m}$ Rillen, was einer Cahn Zahl von 0,01 entspricht. Auf der rechten Seite sind die $180\ \mu\text{m}$ Rillen mit einem Verhältnis von 1 abgebildet.

Die Auflösung der Grenzfläche muss jetzt ausreichend hoch gewählt werden. Dieses Kriterium ist besonders wichtig für eine gerillte Oberfläche, da die dynamische Phase wegen der anisotropen Benetzbarkeit eine Auswirkung auf den Gleichgewichtszustand des Tropfens hat. Die Auflösung muss also hoch genug sein, um die dynamische Phase zuverlässig darzustellen. Dafür muss die mittlere Zahl der Zellen in der Grenzfläche N mindestens 6 Zellen für $C_n = 0,01$ und $\kappa = 4,41 \cdot 10^{-10}\ \text{m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$ betragen. Für $C_n = 0,02$ und $\kappa = 4,41 \cdot 10^{-10}\ \text{m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$ muss N mindestens gleich 8 sein (siehe Abschnitt 3.2.1.1).

Um die Auflösung in den Rillen darzustellen, wird der Parameter N_R eingeführt. Er entspricht der Anzahl der Zellen in der Rillenabmessung L_R :

$$N_R = \frac{L_R}{\Delta x} \quad (4.1)$$

Für $60\ \mu\text{m}$ Rillen wird die Auflösung N_R so gewählt, dass sie dem geforderten Wert von N beträgt, d.h. $N_R \geq 6$ für $C_n = 0,01$. Da das Verhältnis $L_g/L_R = N/N_R = 1,5$, beträgt die Auflösung in der Grenzflächendicke $N = 9$ Zellen. Der Vorzug dieser Wahl besteht darin, dass der Rechenaufwand wegen der Cahn Zahl 0,01 klein bleibt, ohne die Auflösung in den Rillen zu verschlechtern. Weiterhin muss die Zahl der Zellen in den Rillen genügend hoch sein, um das Verhalten der Grenzfläche analysieren zu können, insbesondere ihre Krümmung. Eine Auflösung von mindestens 6 Zellen pro Rille wird hier als genügend geschätzt, um die Krümmung der Grenzfläche in der Rille abzubilden. Für die $180\ \mu\text{m}$ Rillen ist $N = N_R = 8$, da das Verhältnis $L_g/L_R = 1$ und $C_n = 0,02$.

Die Cahn Zahl, sowie die Zellenzahl in der Grenzflächendicke N und pro Rillenabmessung N_R sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst.

Es ist zu beachten, dass die Massenerhaltung von Luft und Tropfen in dem Schnitt Abbildung 4.3 gilt, was in der 3D Simulation und der Realität nicht der Fall ist, da sich der Tropfen dort entlang der Rillen ausbreiten kann. Das führt zu einem Lufteinschluss im gesamten Bereich der Rillen, wenn der Tropfen die Rille bedeckt. Diese Lufteinschlüsse verhindern die Benetzung der Rillen aus physikalischen Gründen für $60\ \mu\text{m}$ sowie für $180\ \mu\text{m}$ Rillen. Die Benetzung der Rillen kann also nur aufgrund numerischer Diffusion erfolgen. Es wurde nach ausreichender Zeit (für diese Simulation $0,03\ \text{s}$) keine Benetzung der Rillen beobachtet.

Daraus kann man schließen, dass ein Verhältnis Grenzflächendicke über Rillenabmessung L_g/L_R bis $1,5$ für $60\ \mu\text{m}$ Rillen das Verhalten des Tropfens über den Rillen nicht beeinflusst, wenn die Auflösung in den Rillen N_R den minimalen Wert der Auflösung N beträgt. Für $180\ \mu\text{m}$ Rillen ist auch $L_g/L_R = 1$ noch akzeptabel.

	Cn	N	N_R
$60\ \mu\text{m}$ Rillen	0,01	9	6
$180\ \mu\text{m}$ Rillen	0,02	8	8

Tabelle 4.1: Details des verwendeten Gitters für die Auflösung in den Rillen.

4.2.2 Erzeugung des gesamten Gitters

Die Anforderungen an die Auflösung (siehe Abschnitt 4.2.1) bedingt eine Rillenabmessung der quadratischen Zellen von $1 \cdot 10^{-5}\ \text{m}$ für $60\ \mu\text{m}$ und $2,25 \cdot 10^{-5}\ \text{m}$ für $180\ \mu\text{m}$ Rillen. Die lokale Auflösung in den Rillen ist in Abbildung 4.4 dargestellt.

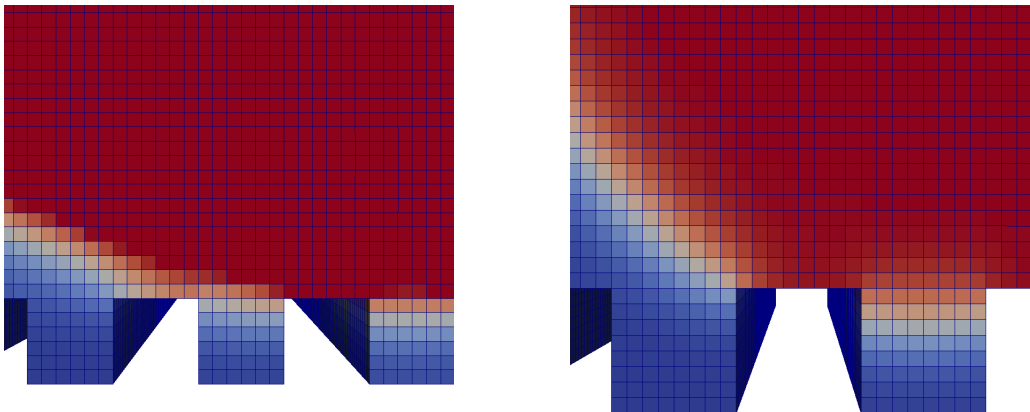


Abbildung 4.4: Auflösung in der Rillen für die Rillenabmessung $60\ \mu\text{m}$ (Links) und $180\ \mu\text{m}$ (Rechts).

Diese Auflösung muss im gesamten Berechnungsgitter beibehalten werden: eine Variation der Kantenlänge (*grading*) ist nicht möglich. Eine Variation des Gitters würde zur lokalen Minderung der Auflösung in der Grenzfläche führen. Da die Auflösung schon möglichst klein ist, um Rechenaufwand zu sparen, ist dies zu vermeiden. Zusätzlich beträgt der Tropfenauflauf keine Hauptströmungsrichtung. Daher sind gleiche Kantenlängen der Zellen zu bevorzugen, um den Tropfenauflauf nicht zu beeinflussen.

Da die Zellen klein sind und es sich um eine 3D Simulation handelt, steigt die gesamte Zahl der Zellen mit der Größe des Berechnungsgitters schnell an. Das Berechnungsgitter muss

den gesamten Raum des Tropfenaufpralls abdecken. Die Ausbreitungslänge entlang und quer zu den Rillen kann mit Hilfe der Ergebnisse der Tropfenaufprälle abgeschätzt werden. Die maximale Ausbreitung entlang der Rillen entspricht ungefähr dem Ausbreitungswert von glatten Oberflächen [13]. Der Wert quer zu den Rillen liegt leicht darunter, da die Benetzbarkeit kleiner ist [16]. Der Tropfen zieht sich dazu stärker auf strukturierten Oberflächen zurück, was einen höheren Bereich erfordert. Es wird auch angenommen, dass der Tropfenaufprall viertelsymmetrisch ist, was das Berechnungsgitter um den Faktor 4 reduziert. Das gesamte Berechnungsgitter ist Abbildung 4.6 dargestellt. Das Berechnungsgebiet wurde im Randbereich zusätzlich abgeschnitten, um den Rechenaufwand zu reduzieren. Der Abstand zwischen dem Tropfen und den Rändern des Bereichs muss groß genug sein, um Randeffekte zu vermeiden. In unserem Fall haben nahe Ränder auf das Verhalten des Tropfenaufpralls keinen Einfluss, solange die Freistromränder immer in der reinen Gasphase (d.h. Phasenparameter $C = -1$) liegen. Das ist auf die kleinere Dichte und Viskosität der Luft im Vergleich mit Wasser zurückzuführen. Eine Abrundung des Gitters mit dem Ziel Zellen einzusparen lohnt sich nicht, da es zur lokalen Minderung der Zellengröße am Rand und folglich einem sehr kleinen Zeitschritt (siehe Abschnitt 3.2.1.2) führen würde. Die Untersuchung wurde für eine Tropfenaufprallgeschwindigkeit von 0,62 m/s und einen abgesetzten Tropfen durchgeführt. Letzterer erlaubt ein kleineres Berechnungsgitter, da die Amplitude der Ausbreitung kleiner ist. Die Größe und Anzahl der Zellen für jedes Gitter ist in Tabelle 4.2 zusammengefasst.

	Zellengröße	Zellenzahl im gesamten Gitter
60 μm Rillen, Absetzung	$1 \cdot 10^{-5}$ m	$5,5 \cdot 10^6$
60 μm Rillen, Aufprall	$1 \cdot 10^{-5}$ m	$7,9 \cdot 10^6$
180 μm Rillen Absetzung	$2,25 \cdot 10^{-5}$ m	$5,1 \cdot 10^5$
180 μm Rillen Aufprall	$2,25 \cdot 10^{-5}$ m	$4,3 \cdot 10^5$

Tabelle 4.2: Charakteristiken des verwendeten Gitters.

4.3 Ergebnisse

Die Simulationen des Tropfenaufpralls wurden auf quadratischen Rillen von 180 μm und 60 μm Kantenlänge untersucht. Da der Rechenaufwand für 180 μm Rillen kleiner ist (siehe Abschnitt 4.2), sind die Ergebnisse umfassender: das komplette Verhalten des Ausbreitungsfaktors mit und ohne Aufprallgeschwindigkeit ist für die 180 μm Rillen simuliert. Für die 60 μm Geometrie sind die Ergebnisse nur für Ausbreitungsphase unter ähnlichen Bedingungen vorhanden. Das Verhalten des Ausbreitungsfaktors für die 180 μm Rillen ohne Aufprallgeschwindigkeit ist in Abbildung 4.5 dargestellt.

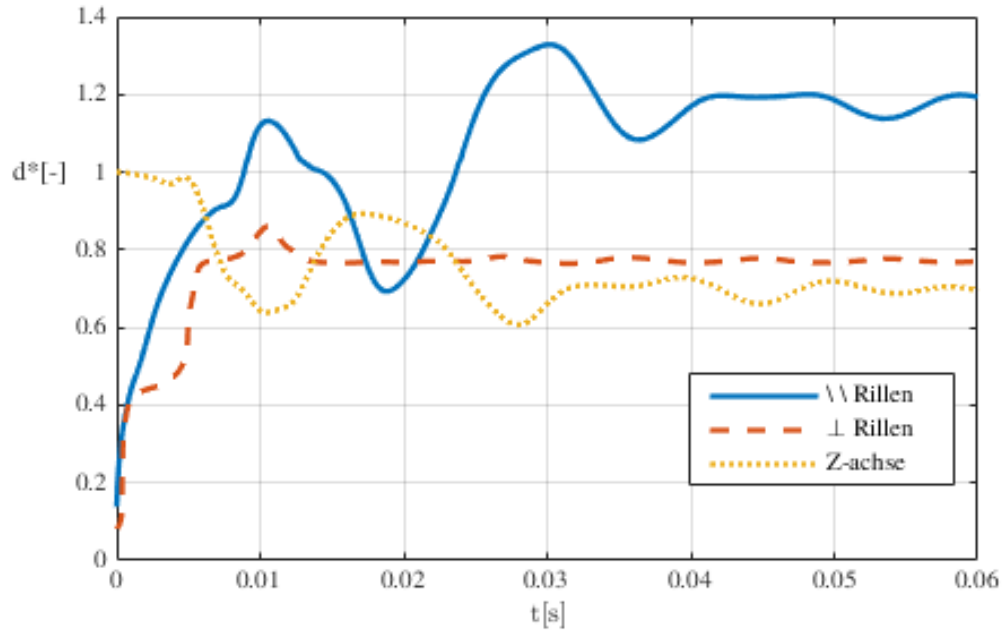


Abbildung 4.5: Verhalten der Ausbreitungsfaktoren eines abgesetzten Tropfens auf einer $180\ \mu\text{m}$ gerillten Oberfläche ($C_n=0,02$ und $\kappa = 1,764 \cdot 10^{-9}\ \text{m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$; $N=8$).

Abbildung 4.6 zeigt einen Tropfen mit 3 markierten Positionen: diese wurden genutzt, um den Ausbreitungsfaktor in unterschiedliche Richtungen zu messen. Der Ausgangspunkt jeder Probe liegt im Aufprallpunkt, in der Mitte der benetzten Oberfläche und auf der hervorgehobenen Oberfläche der Rillen. Die erste Probe misst den Ausbreitungsfaktor entlang der Rillen, die zweite quer zu den Rillen und parallel zur Oberfläche. Die letzte misst die Höhe des Tropfens während des Aufpralls. Ähnlich zum Ausbreitungsfaktor ist die Höhe mit dem Ausgangsdurchmesser entdimensioniert.

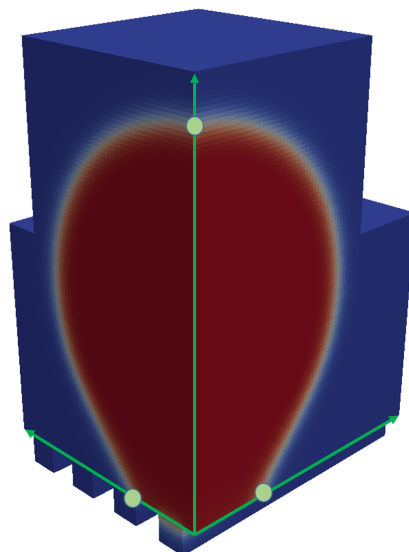


Abbildung 4.6: Positionen für die Messung des Ausbreitungsfaktors entlang, quer und vertikal zu den Rillen.

In der Ausbreitungs- und Rückzugsphase tritt der Cassie-Baxter Zustand auf. Zum Zeitpunkt $t=0,02\ \text{s}$ wird die gesamte Oberfläche vom Tropfen benetzt. Im Gleichgewichtszu-

stand tritt der Wenzel Zustand auf. Zunächst wird das Verhalten des Ausbreitungsfaktors in beiden Zuständen vorgestellt. Anschließend wird der Übergang vom Cassie-Baxter in den Wenzel Zustand gesondert analysiert.

4.3.1 Verhalten der Ausbreitungsfaktor

Die Ausbreitung- und Rückzugsphase treten bis 0,011 bzw 0,018 s auf. In dieser Phasen liegt der Tropfen im Cassie-Baxter Zustand vor. Es handelt sich um den sogenannten gemischten Benetzungszustand (aus dem Englischen *composite wetting state*), wie er in Abbildung 4.7 dargestellt ist [4].

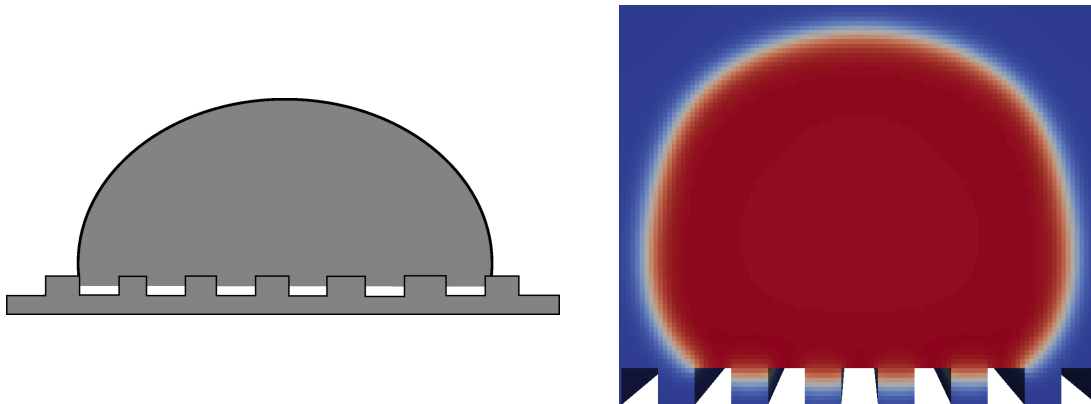


Abbildung 4.7: Cassie-Baxter Zustand (gemischter Benetzungszustand) als Darstellung von Rothstein *et al.*[2010] [4] (Links) und zum Zeitpunkt $t=0,007$ s der Tropfenaufprallsimulation (Rechts).

Um den Einfluss der Rillen auf die Ausbreitung zu verstehen, muss das Verhalten quer zu den Rillen vom Verhalten entlang und vertikal zu den Rillen unterscheiden werden.

4.3.1.1 Ausbreitung entlang und vertikal zu den Rillen

Die Abbildung 4.8 zeigt den Ausbreitungsfaktor entlang und vertikal zu den Rillen für eine Absetzung des Tropfens ohne Aufprallgeschwindigkeit auf die gerillte (durchgezogene Linie) und auf die glatte Oberfläche (gestrichelte Linie).

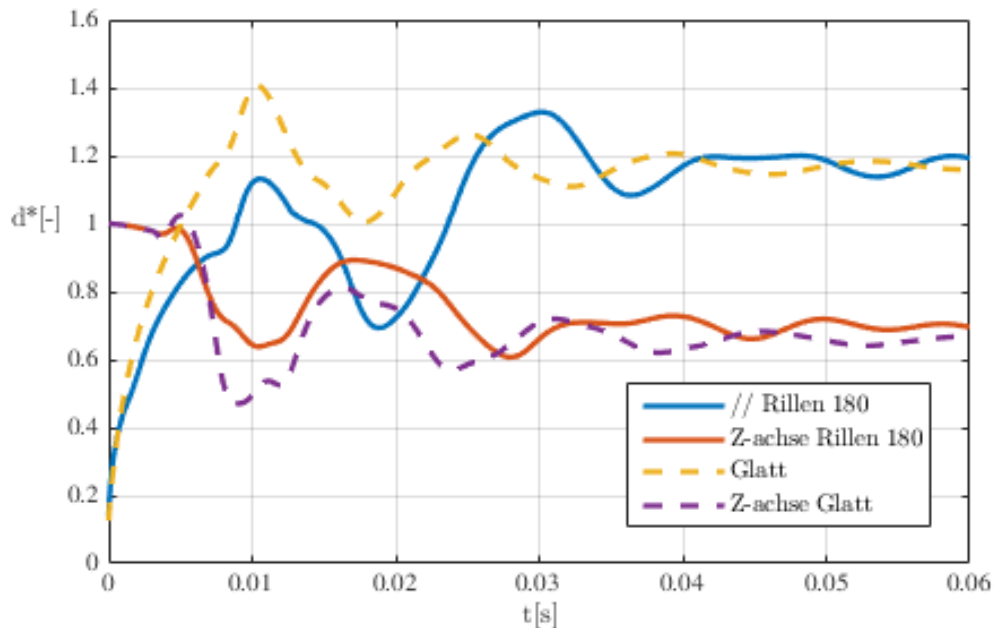


Abbildung 4.8: Vergleich der Ausbreitungsfaktoren entlang und vertikal zur den $180 \mu\text{m}$ Rillen mit glatter Oberfläche ($C_n = 0,02$ und $\kappa = 1,764 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$; $N=8$).

Der Ausbreitungsfaktor verhält sich für die gerillte und glatte Geometrie entlang und vertikal zu den Rillen ähnlich. Diese Ähnlichkeit wurde auch experimentell beobachtet [13].

Zeitraum vor der Benetzung

Bis zum Zeitpunkt $0,02 \text{ s}$, der den Cassie-Baxter Zustand vom Wenzel Zustand abgrenzt, breitet sich der Tropfen weniger auf der gerillten als auf der glatten Oberfläche aus, ersichtlich im geringeren Ausbreitungsfaktor der gerillten Geometrie in Abbildung 4.8. Dazu kommt, dass der Tropfen höher bleibt, erkennbar an einem höheren Ausbreitungsfaktor in z-Richtung für die gerillte Oberfläche (rote Linie). Wegen des gleichen Tropfenvolumens in beiden Fällen führt die größere Höhe des Tropfens zu einer geringeren Ausbreitung. Diese kleinere Ausbreitung des Tropfens im Cassie-Baxter Zustand zeigt, dass der gemischte Benetzungszustand zu einer Verminderung der Benetzbarkeit führt.

Zeitraum nach der Benetzung

Im Gleichgewichtszustand tritt der Wenzel Zustand auf. Das heißt, dass der Tropfen die gesamte gerillte Oberfläche benetzt hat. Im Gegensatz zum Cassie-Baxter Zustand sind hier die Werte der Ausbreitungsfaktoren gleich denen auf einer glatten Oberfläche. Im Wenzel Zustand wird die Benetzbarkeit entlang und vertikal zu den Rillen nicht reduziert.

4.3.1.2 Ausbreitung quer zu den Rillen

In Abbildung 4.5 kann man erkennen, dass der Ausbreitungsfaktor quer zu den Rillen einen gezackten Verlauf hat. Die DPKL breitet sich stufenweise aus, und bleibt ab $0,015 \text{ s}$ konstant. Die erste Stufe liegt bei $d^* \approx 0,43$, d.h. $0,45 \text{ mm}$ vom Aufprallpunkt entfernt. Bei dieser Entfernung wird die DPKL an der Kante zur zweiten Rille zunächst aufgehalten (siehe Abbildung 4.9 – Links). Der zweite und letzte flache Bereich liegt bei $d^* \approx 0,77$, was einem Abstand von $0,81 \text{ mm}$ entspricht. Die DPKL hat sich jetzt bis zur Kante der dritten Rille ausgebreitet (siehe Abbildung 4.9 – Rechts). Der kleine Anstieg des quergerichteten

Ausbreitungsfaktors zum Zeitpunkt $t=0,0012\text{ s}$ stellt keine wirkliche weitere Ausbreitung des Tropfens dar, sondern ist auf eine starke Krümmung des Tropfens zurückzuführen, wodurch die Grenzfläche unterhalb der Linienprobe liegt.

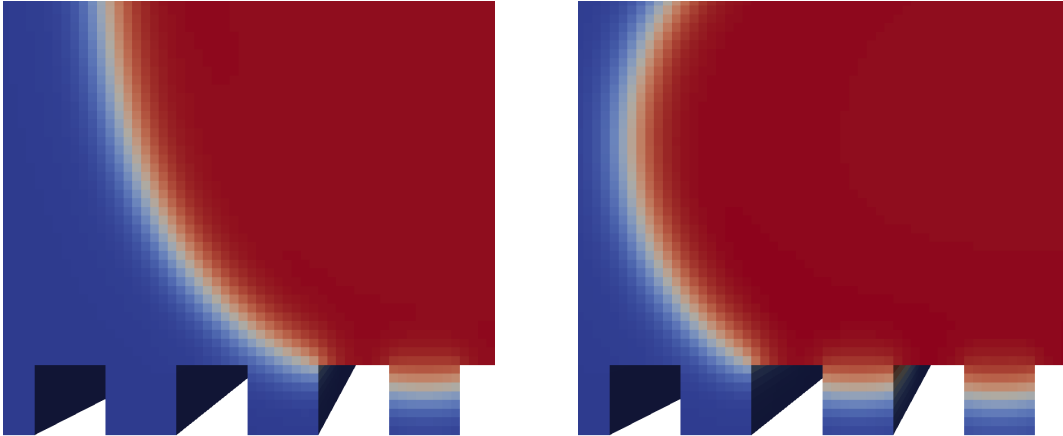


Abbildung 4.9: *Pinning* Effekt: die Ausbreitung der DPKL wird an der zweiten (Links, $t=0,003\text{ s}$) und dritten (rechts, $t=0,008\text{ s}$) Kantenrinne aufgehalten.

Ein ähnliches Verhalten kann auf kleineren Rillen beobachtet werden. Abbildung 4.10 vergleicht den Anfang der Ausbreitungsphase für einen abgesetzten Tropfen auf gerillter Oberfläche von $60\ \mu\text{m}$ und $180\ \mu\text{m}$.

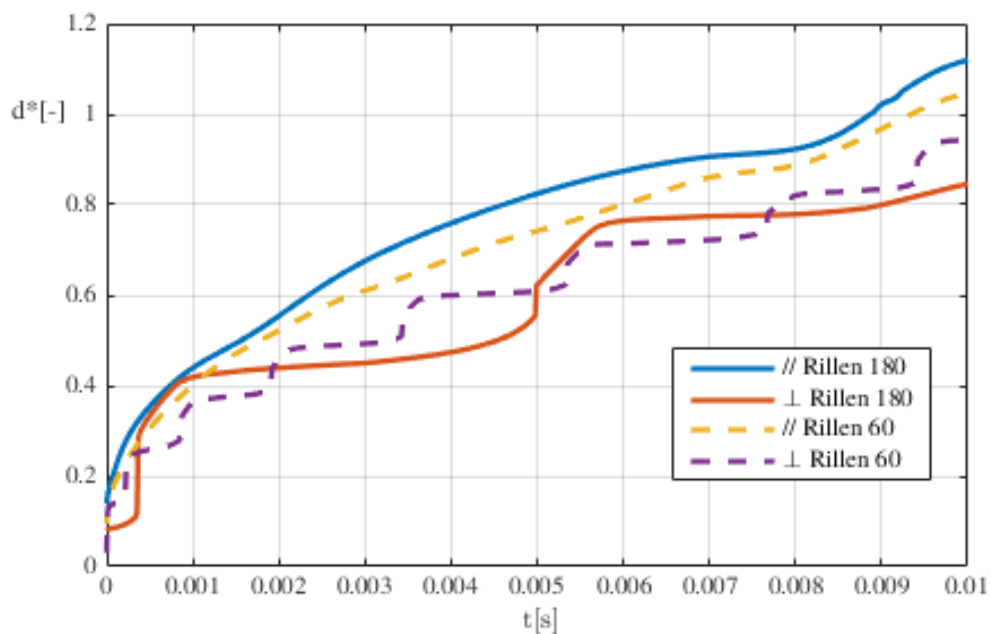


Abbildung 4.10: Vergleich des quergerichteten Ausbreitungsfaktors für $60\ \mu\text{m}$ ($C_n=0,01$ und $\kappa = 4,41 \cdot 10^{-10}\ \text{m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$; $N=9$) und $180\ \mu\text{m}$ Rillen ($C_n=0,02$ und $\kappa = 1,764 \cdot 10^{-9}\ \text{m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$; $N=8$).

Die Stufen im Verlauf des Ausbreitungsfaktors sind bei kleinen Rillenabmessungen kleiner und zahlreicher als bei großen Rillenabmessungen.

Damit wird der sogenannte *pinning* Effekt erklärt: die DPKL wird an der Rillenkante aufgehalten. Die Rillen stellen eine Art Energie Barriere dar, die der Tropfen mithilfe

Impuls oder Verformung überwinden muss, um die Ausbreitung fortzusetzen. Diese Energie Barriere ist größer bei scharfen Kanten und größerer Steigung der Oberfläche (im Fall von der Rillen ist dieser Winkel 90°) [17]. Es handelt sich um einen metastabilen Zustand: die Energie wird an der Kante gespeichert und plötzlich freigesetzt, was zu einer stoßartigen Ausbreitung führt.

Wegen des *pinning* Effekts wird die Ausbreitung quer zu den Rillen verlangsamt und verringert. Die Werte des quergerichteten Ausbreitungsfaktors sind kleiner als entlang der Rillen (siehe Abbildung 4.5). Dieses Phänomen führt also zu einer hydrophoberen Eigenschaft quer zu den Rillen, was die anisotropische Eigenschaft der Rillen erzeugt.

Auch beim Tropfenaufprall wird der *pinning* Effekt beobachtet. Abbildung 4.11 vergleicht die Ausbreitungsphase auf $60\ \mu\text{m}$ Rillen zwischen einem Absetzen des Tropfens und einem Tropfenaufprall mit der Geschwindigkeit $0,62\ \text{m/s}$.

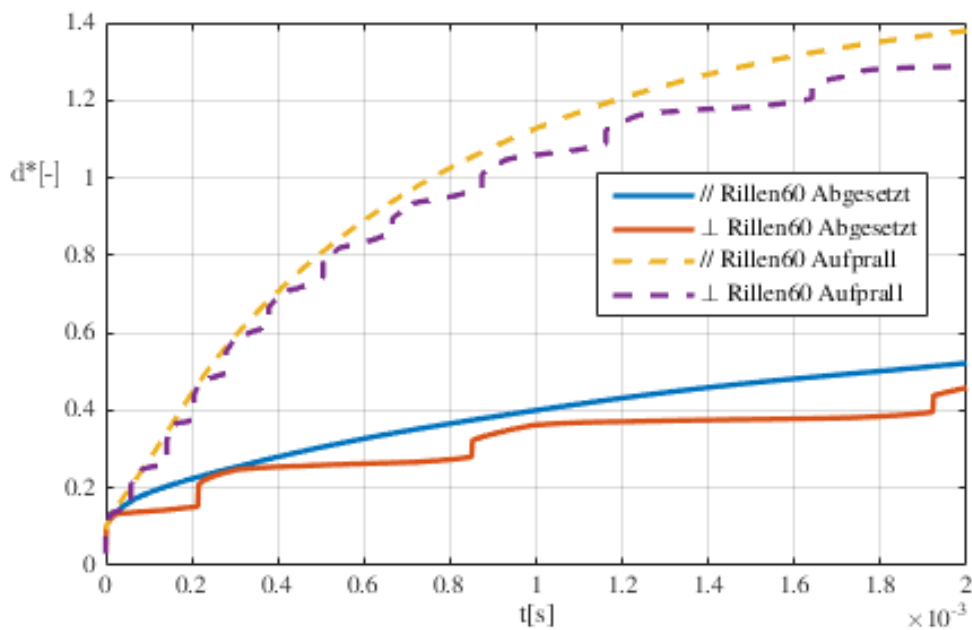


Abbildung 4.11: Vergleich der Ausbreitungsphase entlang und quer zu den Rillen mit $L_R = 60\ \mu\text{m}$ mit Aufprallgeschwindigkeit 0 und $0,62\ \text{m/s}$ ($Cn = 0,01$ und $\kappa = 4,41 \cdot 10^{-10}\ \text{m}^3 \cdot \text{s/kg}$; $N = 9$).

Da der Impuls des Tropfens beim Aufprall größer ist als beim Absetzen, dauert das *pinning* beim Tropfenaufprall weniger lang als bei der Absetzung. Die Dauer des *pinning*s verlängert sich, wenn die Geschwindigkeit der DPKL kleiner wird. Allerdings bleibt das Ausbreitungsverhalten längs und quer zu den Rillen mit und ohne Aufprallgeschwindigkeit ähnlich.

4.3.2 Übergang vom Cassie-Baxter zum Wenzel Zustand

Beim Absetzen des Tropfens auf die $180\ \mu\text{m}$ Rillen, liegt der Cassie-Baxter Zustand vor: der Tropfen benetzt nicht das Innere der Rillen, wie es in Abbildung 4.7 zu sehen ist. Ab $t = 0,02\ \text{s}$ geht der Cassie-Baxter in den Wenzel Zustand über. Der Cassie-Baxter Zustand entspricht einem höheren lokalen Energieminimum, wenn ein Tropfen auf einer strukturierten Oberfläche abgesetzt wird [4]. Dennoch ist der Cassie-Baxter Zustand metastabil, laut der Formel 2.4 abhängig vom GGKW auf glatter Oberfläche $\theta_{\text{ggw,glatt}}$ und den Oberflächentopographieparametern Φ_s und r . Das bedeutet, dass der Wenzel Zustand ein

niedrigeres Energie Niveau hat, und damit stabiler ist. Beim Übergang vom Cassie-Baxter zum Wenzel Zustand ist die Überwindung einer Energiebarriere erforderlich. Im Fall eines gemischten Benetzungszustands (siehe Abbildung 4.7) auf einer gerillten Oberfläche kann die Energiebarriere $E_{CB \rightarrow W}$ wie folgt berechnet werden [4]:

$$E_{CB \rightarrow W} = \frac{-2\pi d_{\text{benetzt}}^2 \gamma_{F1/G} h \cos(\theta_{\text{ggw}})}{4p} \quad (4.2)$$

In dieser Gleichung ist p die Periodenlänge der Rillenstrukturierung und h die Höhe der Rillen. In unserem Fall ist $\frac{h}{p} = 0,5$. Der Durchmesser der benetzten Oberfläche entspricht d_{benetzt} . Das bedeutet, dass der Übergang vom Cassie-Baxter zum Wenzel Zustand empfindlicher ist, wenn die benetzte Oberfläche während des Aufpralls klein ist, da die Energiebarriere zu diesem Zeitpunkt einen kleineren Wert hat (siehe d_{benetzt} in der Gleichung (4.2)). In unserem Fall beginnt die Benetzung der Rillen im Anschluss an die Rückzugsphase zum Zeitpunkt $t = 0,02 \text{ s}$ (siehe Abbildung 4.5). Zu diesem Zeitpunkt ist der Durchmesser des Tropfens klein und wegen des Wiederaufpralls besitzt der Tropfen in Richtung der Oberfläche einen erhöhten Impuls. In Abbildung 4.12 ist die Grenzfläche des Tropfens (grüne Fläche) dargestellt, sowie die Druckisolinien von 20 bis 180 Pa mit einer Schrittweite von 20 Pa. Der relative Umgebungsdruck ist Null. Auf der linken Seite ist der Ausbreitungsfaktor maximal und damit hat die Energiebarriere ihren höchsten Wert erreicht. Die Krümmung des Tropfens in den Rillen ist klein, damit ist der Abstand zum Rillenboden relativ groß. Der Abstand spielt eine wichtige Rolle, da der Kontakt zwischen Grenzfläche und Rillenboden das Verlassen des Cassie-Baxter Zustandes bedeutet. Der relativ große Abstand zwischen den Isolinien deutet auf einen kleinen Druckgradienten hin. Auf der rechten Seite ist der Tropfen kurz vor dem Übergang in den Wenzel Zustand abgebildet. Der benetzte Durchmesser und damit auch die Energiebarriere sind hier viel kleiner. Die Krümmung der Grenzfläche in den Rillen ist größer als im Cassie-Baxter Zustand, und der Abstand zum Rillenboden somit kleiner. Die Druckgradienten sind in diesem Fall viel größer. Es ist zu beobachten, dass sich unter dem Tropfen ein starker Überdruck (in der Größenordnung des höchsten Laplace-Drucks) bildet (siehe Abbildung 4.12 - Rechts). Dieser entsteht, da die sich ausbreitende Grenzfläche die Luft unter dem Tropfen nicht vollständig verdrängt hat. Die Grenzfläche in der zentralen Rille wird von der verbleibenden Luft nach oben verformt (siehe Abbildung 4.12 - Rechts). Die Form dieses Verlaufs ist Voraussetzung für einen Lufteinschluss, der bei der Benetzung in der zentralen Rille entsteht.

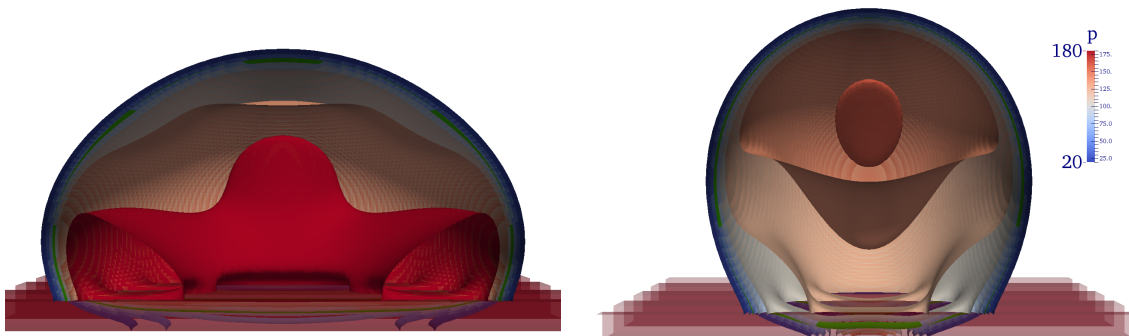


Abbildung 4.12: Schnitt in der Mitte des Tropfens in Rillenrichtung bei maximaler seitlicher Ausbreitung des Tropfens (Links) und kurz vor dem Verlassen des Cassie-Baxter Zustands. Die grüne Oberfläche entspricht der Grenzfläche des Tropfens, andere Farben zeigen isodruck Flächen.

Die Etappen der Benetzung in den Rillen sind in Abbildung 4.13 zu sehen. Es kann beobachtet werden, dass die Grenzfläche in der äußeren Rille zuerst den Rillenboden berührt. Berücksichtigt man nur die Krümmung und den Impuls, sollte der Tropfen zuerst die zentrale Rille benetzen [4]. Im vorliegenden Fall bildet sich unter dem Tropfen ein Lufteinschluss, der die Benetzung in der zentralen Rille verzögert.

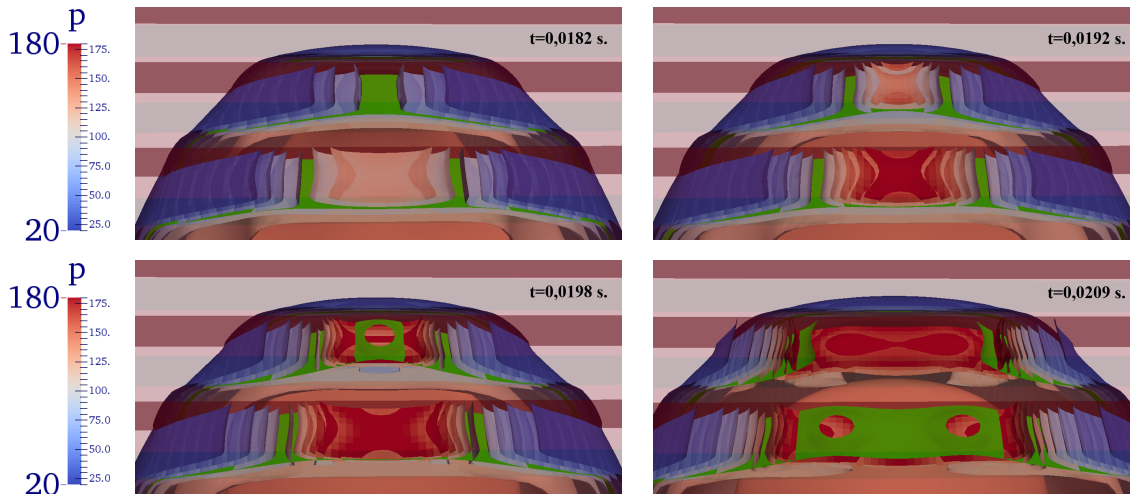


Abbildung 4.13: Etappen des Übergangs zum Wenzel Zustand. Sicht von unten.

Dieser Übergang vom Cassie-Baxter zum Wenzel Zustand tritt für die Oberfläche mit $180 \mu\text{m}$ Rillen schon dann auf, wenn der Tropfen nur auf der Oberfläche abgesetzt wird. Der Cassie-Baxter Zustand ist in diesem Fall also sehr empfindlich. Da dieser Übergang mit einer Energiebarriere verbunden ist, hat die Aufprallgeschwindigkeit einen starken Einfluss auf die Stabilität des Cassie-Baxter Zustands. Mit einer Aufprallgeschwindigkeit, die größer als ein bestimmter kritischer Wert ist, kann der Tropfen einen Cassie-Baxter Zustand nicht einnehmen, da durch die Aufprallgeschwindigkeit genügend Impuls vorhanden ist, um einen Kontakt zwischen Grenzfläche und Rillenboden herzustellen [1]. Die Abbildung 4.14 stellt ein Viertel des Tropfens dar, der mit einer Aufprallgeschwindigkeit von $0,62 \text{ m/s}$ die $180 \mu\text{m}$ gerillte Oberfläche benetzt. Im Gegensatz zum Absetzungsfall tritt die Benetzung genau darauf, wenn die Ausbreitung des Tropfens groß ist und somit auch die Energiebarriere. Der auftretende Wenzel Zustand ist aber nicht vollständig: die Benetzung entsteht dezentral unter Bildung von Lufteinschlüssen im Zentrum der Rillen. Diese Lufteinschlüsse sind experimentell schwer zu beobachten, was einen Vorteil der Tropfenaufprallsimulationen darstellt.

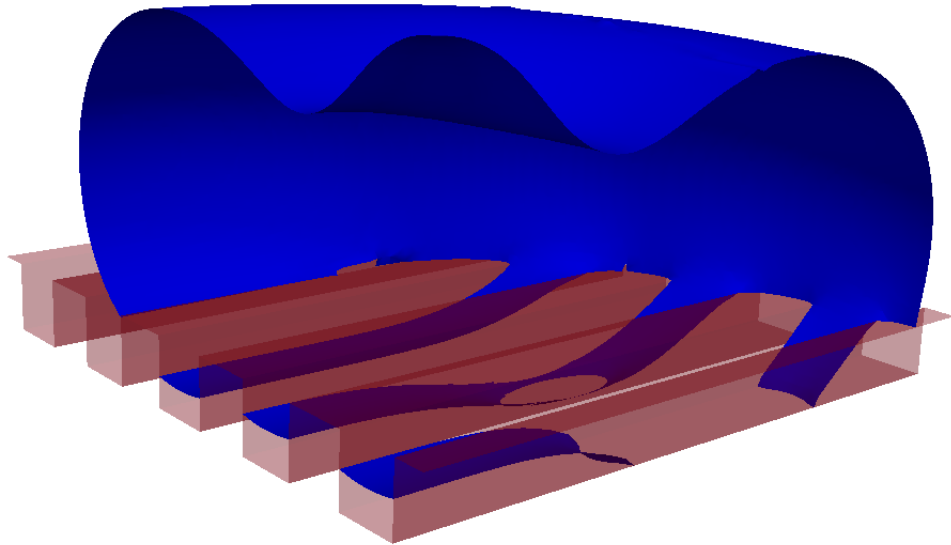


Abbildung 4.14: Benetzung des Rillenbodens bei einem Tropfenaufprall von $0,62 \text{ m/s}$ auf $180 \mu\text{m}$ Rillen.

5. Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde anhand von Tropfenaufrallsimulationen das Benetzungsverhalten gerillter, hydrophober Oberflächen untersucht. Der Ziel bestand darin, die Kenntnisse des Tropfenaufralls, der schon am ISTM experimentell untersucht wurde durch die Numerik zu ergänzen. Im Zuge dessen wurden die Parameter der Phasenfeld Methode für diesen Anwendungsfall bestimmt. Die Phasenfeld Methode, die auf der Koppelung der Navier-Stokes Gleichungen mit der Cahn-Hilliard Gleichung beruht, ist für den Tropfenaufrall besonders geeignet, da sie die Bewegung der Kontaklinie auf der festen Oberfläche trotz der Haftbedingung erlaubt. Die Untersuchung konzentrierte sich auf den Ausbreitungsfaktor, der einen einfachen Vergleich der Numerik mit der Simulation ermöglicht.

Eine Sensitivitätsanalyse der Simulationsparameter wurde auf glatter Oberflächen durchgeführt, da sie wenig rechenaufwändige 2D-achsensymmetrische Simulationen erlauben. Zuerst wurde die Beziehung zwischen die Cahn Zahl C_n und die räumliche Auflösung hervorgehoben. Es wurde gezeigt, dass die Reduktion der Cahn Zahl, bei Erhaltung des Quotients $\kappa/\varepsilon^2 = 1 \text{ m}\cdot\text{s}/\text{kg}$, einen doppelten Aufwand darstellt: erstens erfordert die Abnahme der Grenzflächendicke kleinere Zellen, zweitens müssen diese zahlreicher in der Grenzfläche enthalten sein, um gitterunabhängige Lösungen zu erhalten. Werte von $C_n = 0,007$ bis $0,02$ wurden untersucht, je nach C_n mit einer Auflösung von 4 bis 12 Zellen. Es wurde gezeigt, dass die Auflösung höher gewählt werden muss, wenn der Tropfen sich schneller bewegt. Auch auf die zeitliche Auflösung der Advektions- und Diffusionsprozesse wurde berücksichtigt. Rechnerische Instabilitäten können durch auffällig hohe Werte im Geschwindigkeitsfeld erkannt werden. Schließlich wurde der Mobilitätsfaktor κ untersucht. Der Vergleich mit experimentellen Daten hat gezeigt, dass der oft verwendete Wert ε^2 für den Mobilitätsfaktor κ auch in unserem Fall geeignet ist. Dies gilt insbesondere für den maximalen Wert des Ausbreitungsfaktors. Der Einfluss der Tropfenaufrallparameter Ausgangsdurchmesser und Aufprallgeschwindigkeit wurde in dem Wertebereich untersucht, zu dem experimentellen Daten vorlagen. Anschließend wurde ein Ausgangsdurchmesser von $2,1 \text{ mm}$ und eine Aufprallgeschwindigkeit von $0,62 \text{ m/s}$ gewählt. Das Verhalten des Tropfens wurde auch im Fall einer superhydrophoben Oberfläche simuliert. Dabei wurde ein Sprung des Tropfens und ein Lufteinschluss beobachtet. Lufteinschlüsse treten auch beim simulierten Tropfenaufrall auf strukturierten Oberfläche auf. Deren Volumenerhaltung ist bei schlechter Wahl der Cahn Zahl problematisch. Simulationen und Experiment des Tropfenaufralls auf glatter Oberfläche stimmen bezüglich des Maximal- und Gleichgewichtsausbreitungsfaktors gut überein. Die dynamische Phase hat aber Unterschiede gezeigt: die Rückzugs- und Oszillationsphase des Ausbreitungsfaktors wurde auf der realen Oberfläche

stärker gedämpft. Im Gegensatz zur Experiment erlaubt die Simulation, die Bildung des partiellen Abpralls während der Rückzugsphase zu beobachten.

Mithilfe der Sensitivitätsanalyse konnten die Parameter des numerischen Tropfenaufralls auf gerillten Oberflächen bestimmt werden. Zuerst wurde das Problem des Rechenaufwands für die kleinste Rillen von $60\ \mu\text{m}$ untersucht. Die Grenzflächendicke muss an die Rillenabmessung angepasst werden, um eine Benetzung der Rillen durch numerische Diffusion zu vermeiden. Diese falsche Benetzung tritt bei zu großer Cahn Zahl auf. Dieses Verhalten wurde mithilfe von 2D-ebenen Simulationen untersucht. Es wurde gezeigt, dass die numerische Diffusion in unserem Fall vernachlässigbar ist, wenn die Grenzflächendicke 1,5 mal so groß wie die Rillenbreite gewählt wird. Das entspricht einer Cahn Zahl von 0,01; der Rechenaufwand bleibt dabei vertretbar. Die Auflösung der Grenzfläche und die Zahl der Zellen pro Rille können dementsprechend bestimmt werden. Für die $180\ \mu\text{m}$ Rillen wurde die Grenzflächendicke so groß wie die Rillenbreite gewählt, was eine Cahn Zahl von 0,02 entspricht. Der Rechenaufwand ist damit wesentlich geringer und die Genauigkeit in unserem Fall genügend, sodass eine umfassende Untersuchung möglich war. Weiterhin ist der Cassie-Baxter Zustand bei $180\ \mu\text{m}$ Rillen metastabil und empfindlich. Somit konnte der Übergang vom Cassie-Baxter- zum Wenzel-Zustand mit einer Absetzung des Tropfens beobachtet werden. Die Benetzung von glatter sowie gerillter Oberfläche ist bezüglich Längs- und Vertikalausbreitungsfaktor ähnlich, die Werte sind im Cassie-Baxter Zustand jedoch kleiner. Quer zu den Rillen, wo der *pinning* Effekt deutlich auftritt, sind die Werte des Ausbreitungsfaktors noch kleiner. Der Gleichgewichtszustand, der im Wenzel-Zustand vorliegt, hat längs und vertikal zu den Rillen keine Verringerung der Benetzbarkeit gezeigt. Schließlich wurde der Übergang vom Cassie-Baxter- zum Wenzel-Zustand analysiert. Die Benetzung des Rillenbodens tritt im Anschluss an die Rückzugsphase auf, wenn der Tropfen eine kleine Oberfläche benetzt. Das entspricht dem Zeitpunkt, zu dem die Energiebarriere – die proportional zur benetzten Oberfläche ist – für den Übergang vom Cassie-Baxter- zum Wenzel-Zustand am kleinsten ist. Das lokale Benetzungsverhalten des Tropfens in Verbindung mit Lufteinschlüssen in den Rillen konnte mithilfe des Druckfelds detailliert dargestellt werden. Insbesondere wurde die Verzögerung der Benetzung aufgrund von Lufteinschlüssen hervorgehoben.

Es wurde gezeigt, dass die Phasenfeld Methode für Tropfenaufrallsimulationen generell geeignet ist, aber der Rechenaufwand kann für dünne Grenzfläche sehr groß werden. Insbesondere für strukturierte Oberflächen ist eine starke Reduktion des Rechenaufwands durch lokale Gitterverfeinerung und Parallelisierung zu erwarten. Es würde sich besonders für große Tropfen und Aufprallgeschwindigkeit lohnen, da das Rechengelände groß ist. Es gibt Verbesserungspotential bei der Wahl der Anzahl von Zellen pro Rille: die Beziehung zwischen dem Verhältnis Grenzflächendicke über Rillenabmessung (L_g/L_R) und der Anzahl der Zellen in den Rillen ist noch nicht vollständig verstanden. Für $60\ \mu\text{m}$ Rillen könnten 5 Zellen in den Rillen mit einer Cahn Zahl von 0,01 und $\kappa/\varepsilon^2 = 1\ \text{m} \cdot \text{s}/\text{kg}$ ausreichend sein. Der Einfluss der Auflösung und dem Verhältnis L_g/L_R auf die Grenzfläche in der Rille und den Ausbreitungsfaktor (insbesondere für den *pinning* Effekt) muss beachtet werden. Interessant wäre auch anstelle von κ/ε^2 die Peclet Zahl konstant zu halten, was keine Erhöhung der Zahl der Zellen in der Grenzflächendicke bei Reduktion der Cahn Zahl fordert [7]. Die Anpassung der Peclet Zahl kann mit den am ISTM verfügbaren, experimentellen Daten erfolgen.

Die Tropfenaufrallsimulationen zeigen insgesamt eine gute Übereinstimmung mit den Experimenten, die am ISTM durchgeführt wurden, und in der Literatur zu findenden Ergebnissen. In der Zukunft ist es zu erwarten, dass weitere Berechnungen ein noch detaillierteres Verständnis der Benetzung gerillter und anderer, strukturierter Oberflächen liefern.

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

Lateinische Formelzeichen

Zeichen	Einheit	Bedeutung
L_c	$[m]$	Kapillarlänge
g	$[m/s^2]$	Erdbeschleunigung
We	$[-]$	Weber Zahl
Re	$[-]$	Reynolds Zahl
Ca	$[-]$	Kapillar Zahl
Cn	$[-]$	Cahn Zahl
V	$[m/s]$	Aufprallgeschwindigkeit
d_0	$[m]$	Durchmesser des Tropfens
d^*	$[-]$	Ausbreitungsfaktor
d_{ggw}^*	$[-]$	Gleichgewichtsausbreitungsfaktor
d_{benetzt}	$[-]$	Durchmesser der benetzten Oberfläche
r	$[-]$	Quotient der gesamten Oberfläche über die horizontal projizierte Oberfläche
C	$[-]$	Phasenparameter
L_g	$[m]$	Grenzflächendicke
L_{ref}	$[m]$	Referenzlänge des Systems
\mathbf{u}	$[m/s]$	Geschwindigkeitsvektor
\mathbf{n}_s	$[-]$	Normalenvektor
∇p	$[Pa/m]$	Druckgradient
f_{OS}	$[N]$	Oberflächenspannungskraft
N	$[-]$	Anzahl von Zellen in der Grenzfläche
N_d	$[-]$	Anzahl von Zellen in dem Tropfendurchmesser
N_R	$[-]$	Anzahl von Zellen in der Rillenabmessung
Δx	$[m]$	Kantenlänge einer kubischen Zelle
Co	$[-]$	Courant Zahl
Δt_{Co}	$[s]$	Maximaler Zeitschritt berechnet mit der Courant Zahl
Δt_{max}	$[s]$	Maximaler Zeitschritt für die Diffusionsprozesse
L_R	$[m]$	Rillenabmessung
$E_{\text{CB} \rightarrow \text{W}}$	$[kg \cdot m^2/s^2]$	Energiebarriere vom Cassie-Baxter zum Wenzel Zustand

Griechische Formelzeichen

Zeichen	Einheit	Bedeutung
γ	$[kg/s^2]$	Oberflächenspannung flüssig-gasförmig
γ_{f-g}	$[kg/s^2]$	Grenzflächenspannung fest-gasförmig
γ_{fl-f}	$[kg/s^2]$	Grenzflächenspannung flüssig-fest
ρ	$[kg/m^3]$	Dichte
ρ_C	$[kg/m^3]$	Dichte abhängig vom Phasenparameter
ν	$[m^2/s]$	kinematische Viskosität
μ_C	$[kg/(m \cdot s)]$	dynamische Viskosität abhängig vom Phasenparameter
θ_{ggw}	$[\circ]$	Gleichgewichtskontaktwinkel
$\theta_{ggw,glatt}$	$[\circ]$	Gleichgewichtskontaktwinkel auf einer glatten Oberfläche
$\theta_{ggw,krit}$	$[\circ]$	kritischer Gleichgewichtskontaktwinkel des metastabilen Cassie-Baxter Zustands
θ_W	$[\circ]$	Gleichgewichtskontaktwinkel im Wenzel Zustand
θ_{CB}	$[\circ]$	Gleichgewichtskontaktwinkel im Cassie-Baxter Zustand
θ_L	$[\circ]$	lokaler Gleichgewichtskontaktwinkel für die Randbedingungen an der Wand
Φ_s	$[-]$	Quotient der hervorstehenden Oberfläche über der gesamte Oberfläche
α	$[-]$	Phasenvolumenanteil
ε	$[m]$	skalierte Grenzflächendicke: $L_g = 4,164 \varepsilon$
κ	$[m^3 \cdot s/kg]$	Mobilitätsfaktor
Φ	$[kg/(m \cdot s^2)]$	chemisches Potential

Abkürzungen

Abkürzung	Bedeutung
ISTM	Institut für Strömungsmechanik
3D	dreidimensional
2D	zweidimensional
SHO	superhydrophobe Oberfläche
GGKW	Gleichgewichtskontaktwinkel
DPKL	Dreiphasenkontaktlinie
NSG	Navier-Stokes Gleichungen
CHG	Cahn-Hilliard Gleichung
PDMS	Polydimethylsiloxan (Silikonkautschuk)
RMS	Root Mean Square

Abbildungsverzeichnis

1.1	Abperlender Tropfen auf einem Lotusblatt. [15]	1
2.1	Unterschiedliche Tropfenaufprallszenarien aus Rioboo <i>et al.</i> [19].	4
2.2	Der Kontaktwinkel bei verschiedenen Benetzbarkeiten.	5
2.3	Berechnung des Ausbreitungsfaktors $d^* = \frac{d_{\text{benetz}}}{d_0}$.	6
2.4	Verlauf des Ausbreitungsfaktors über die Zeit.	6
2.5	Darstellung des Wenzel- und Cassie-Baxter Zustand auf einer gerillten Oberfläche.	7
2.6	Verteilung des Phasenparameters am Beispiel eines Tropfens.	8
2.7	Verlauf des Phasenparameters in der Grenzflächendicke	9
3.1	Darstellung des Berechnungsbereich im Fall einer 2D-achsensymmetrischen Simulation.	13
3.2	Abnahme des Lufteinschlusses unter dem Tropfen mit der Zeit.	15
3.3	Untersuchung der Gitterabhängigkeit der Lösung für dem Ausbreitungsfaktor ($Cn = 0,02$ und $\kappa = 1,764 \cdot 10^{-9} m^3 \cdot s/kg$).	16
3.4	Untersuchung der Gitterabhängigkeit der Lösung für dem Ausbreitungsfaktor ($Cn = 0,007$ und $\kappa = 2,16 \cdot 10^{-10} m^3 \cdot s/kg$).	17
3.5	Untersuchung der Gitterabhängigkeit der Lösung für dem Ausbreitungsfaktor bei langsamerer Bewegung der DPKL ($Cn = 0,02$ und $\kappa = 1,76 \cdot 10^{-9} m^3 \cdot s/kg$).	18
3.6	Benetze Oberfläche mit sichtbarem Gitter bei nicht genügender Auflösung.	18
3.7	„Explosion“ eines Tropfens: Das Rechenverfahren wird instabil durch unzureichende Zeitschrittbegrenzung.	19
3.8	Verhalten des Ausbreitungsfaktors für verschiedenen Werte des Mobilitätsfaktors.	20
3.9	Verhalten des Ausbreitungsfaktors für eine PDMS Oberfläche ($\theta_{\text{PDMS,ggw}} = 100,3^\circ$) und eine SHO ($\theta_{\text{ggw}} = 140^\circ$).	21
3.10	Lufteneinschluss unter dem Tropfen im Gleichgewichtszustand auf einer SHO ($\theta_{\text{ggw}} = 140^\circ$).	22
3.11	Einfluss der maximalen und minimalen experimentellen Aufprallgeschwindigkeiten auf den Ausbreitungsfaktor.	22
3.12	Vergleich der maximalen und minimalen experimentellen Aufprallgeschwindigkeiten im Bezug auf der benetzten Oberfläche.	23
3.13	Vergleich der maximalen und minimalen experimentellen Durchmesser im Bezug auf den Ausbreitungsfaktor.	24
3.14	Zeitlicher Verlauf des Ausbreitungsfaktors eines experimentellen Tropfenaufpralls auf einer glatten PDMS Oberfläche und Simulation bei gleichen Parametern.	25
3.15	Tropfenaufprall auf einer glatten PDMS Oberfläche zum Zeitpunkt maximaler Ausbreitung.	26
3.16	Tropfenaufprall auf glatter Oberfläche mit Entstehung des Satellits.	26

3.17	Gleichgewichtszustand eines Tropfens auf einer glatten PDMS Oberfläche.	27
4.1	Tropfen vor dem Aufprall auf einer $60 \mu\text{m}$ und $180 \mu\text{m}$ gerillten Oberfläche.	29
4.2	Tropfenaufprall mit unterschiedlichen Verhältnissen Grenzflächendicke L_g über Rillenabmessung L_R	30
4.3	Lokales Verhalten der Grenzfläche in einer 2D-ebene Tropfenaufprall für $60 \mu\text{m}$ und $180 \mu\text{m}$ Rillen.	31
4.4	Auflösung in der Rillen für die Rillenabmessung $60 \mu\text{m}$ und $180 \mu\text{m}$	32
4.5	Verhalten der Ausbreitungsfaktoren eines abgesetzten Tropfens auf einer $180 \mu\text{m}$ gerillten Oberfläche ($Cn = 0,02$ und $\kappa = 1,764 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$; $N=8$).	34
4.6	Positionen für die Messung des Ausbreitungsfaktors entlang, quer und vertikal zu den Rillen.	34
4.7	Cassie-Baxter Zustand (gemischter Benetzungszustand) als Darstellung von Rothstein et al. (2010) und zum Zeitpunkt $t=0,007\text{s}$ der Tropfenaufprallsimulation.	35
4.8	Vergleich der Ausbreitungsfaktoren entlang und vertikal zur den $180 \mu\text{m}$ Rillen mit glatter Oberfläche.	36
4.9	Pinning Effekt: die Ausbreitung der DPKL wird an der zweiten und dritten Kantenrinne aufgehalten.	37
4.10	Vergleich des querverrichteten Ausbreitungsfaktors für $60\mu\text{m}$ und $180\mu\text{m}$ Rillen.	37
4.11	Vergleich der Ausbreitungsphase entlang und quer zu den Rillen mit $L_R = 60 \mu\text{m}$ mit Aufprallgeschwindigkeit 0 und $0,62 \text{ m/s}$ ($Cn = 0,01$ und $\kappa = 4,41 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$; $N = 9$).	38
4.12	Schnitt in der Mitte des Tropfens in Rillenrichtung bei maximaler seitlicher Ausbreitung des Tropfens.	39
4.13	Etappen des Übergangs zum Wenzel Zustand.	40
4.14	Benetzung des Rillenbodens bei einem Tropfenaufprall von $0,62 \text{ m/s}$ auf $180 \mu\text{m}$ Rillen.	41

Tabellenverzeichnis

3.1	Dichte, kinematische Viskosität und Oberflächenspannung der Fluide. . . .	12
4.1	Details des verwendeten Gitters für die Auflösung in den Rillen.	32
4.2	Charakteristiken des verwendeten Gitters.	33

Literaturverzeichnis

- [1] D. Bartolo, F. Bouamrirene, É. Verneuil, A. Buguin, P. Silberzan, and S. Moulinet. Bouncing or sticky droplets: Impalement transitions on superhydrophobic micropatterned surfaces. *EPL (Europhysics Letters)*, 74(2):299, 2006.
- [2] E. Berberović, N. van Hinsberg, S. Jakirlić, I. Roisman, and C. Tropea. Drop impact onto a liquid layer of finite thickness: Dynamics of the cavity evolution. *Physical Review E*, 79(3):036306, 2009.
- [3] J. Bico, U. Thiele, and D. Quéré. Wetting of textured surfaces. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 206(1):41–46, 2002.
- [4] E. Bormashenko. Wetting transitions on biomimetic surfaces. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 368(1929):4695–4711, 2010.
- [5] X. Cai, H. Marschall, M. Wörner, and O. Deutschmann. Numerical simulation of wetting phenomena with a phase-field method using openfoam®. *Chemical Engineering & Technology*, 38(11):1985–1992, 2015.
- [6] X. Cai, M. Wörner, and O. Deutschmann. Implementation of a phase field method in openfoam® for simulation of spreading droplets and verification by test problems. In *Proceedings of 7th Open Source CFD International Conference, Hamburg*, 2013.
- [7] X. Cai, M. Wörner, H. Marschall, and O. Deutschmann. Numerical study on the wettability dependent interaction of a rising bubble with a periodic open cellular structure. 2016. [accepted].
- [8] Z. Cerman, W. Barthlott, and J. Nieder. *Erfindungen der Natur: Bionik-was wir von Pflanzen und Tieren lernen können*. Rowohlt Taschenbuch Verlag, 2005.
- [9] R. J Daniello, N. E Waterhouse, and J. Rothstein. Drag reduction in turbulent flows over superhydrophobic surfaces. *Physics of Fluids*, 21(8):085103, 2009.
- [10] M. Gleiche, Li. Chi, and H. Fuchs. Nanoscopic channel lattices with controlled anisotropic wetting. *Nature*, 403(6766):173–175, 2000.
- [11] B. He, J. Lee, and N. Patankar. Contact angle hysteresis on rough hydrophobic surfaces. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 248(1):101–104, 2004.
- [12] D. Jacqmin. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface. *Journal of Fluid Mechanics*, 402:57–88, 2000.
- [13] R. Kannan and D. Sivakumar. Drop impact process on a hydrophobic grooved surface. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 317(1):694–704, 2008. doi:10.1016/j.colsurfa.2007.12.005.
- [14] H. Kusumaatmaja, R.J. Vrancken, C.W.M. Bastiaansen, and J.M. Yeomans. Anisotropic drop morphologies on corrugated surfaces. *Langmuir*, 24(14):7299–7308, 2008.

- [15] Botanischer Garten München-Nymphenburg. Highlightexponat: Lotusblatt. <http://www.deutsches-museum.de/ausstellungen/naturwissenschaft/nano-u-biotechnologie/nanokosmos/lotuseffekt>, 2009 (Zugang 05.04.2016).
- [16] D. Quéré. Wetting and roughness. *Annu. Rev. Mater. Res.*, 38:71–99, 2008. DOI: 10.1146/annurev.matsci.38.060407.132434.
- [17] M. Ramiasa, J. Ralston, R. Fetzer, and R. Sedev. The influence of topography on dynamic wetting. *Advances in colloid and interface science*, 206:275–293, 2014.
- [18] M. Rein. Phenomena of liquid drop impact on solid and liquid surfaces. *Fluid Dynamics Research*, 12(2):61, 1993.
- [19] R. Rioboo, C. Tropea, and M. Marengo. Outcomes from a drop impact on solid surfaces. *Atomization and Sprays*, 11(2), 2001. DOI: 10.1615/AtomizSpr.v11.i2.40.
- [20] J. Rothstein. Slip on superhydrophobic surfaces. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 42:89–109, 2010.
- [21] M. Weinbuch. Benetzbarkeitsuntersuchungen hydrophober Oberflächen durch Tropfenauflageexperimente. Bachelorarbeit, Karlsruher Institut für Technologie, 2015.
- [22] A.M. Worthington. On the forms assumed by drops of liquids falling vertically on a horizontal plate. *Proceedings of the royal society of London*, 25(171-178):261–272, 1876.
- [23] A.L. Yarin. Drop impact dynamics: splashing, spreading, receding, bouncing... *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 38:159–192, 2006. DOI: 10.1146/annurev.fluid.38.050304.092144.
- [24] P. Yue, C. Zhou, and J.J. Feng. Spontaneous shrinkage of drops and mass conservation in phase-field simulations. *Journal of Computational Physics*, 223(1):1–9, 2007.