КОЛЛОИДНЫЙ ЖУРНАЛ, 2025, том 87, № 4, с. 278–281

Редакторская колонка

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ И ПОВЕРХНОСТНЫХ СИЛ

Возрастающая значимость теоретических и численных исследований поверхностных явлений и поверхностных сил связана с их большим влиянием на развитие новых технологий, в том числе нанотехнологий. Применение таких исследований позволяет значительно сократить трудоемкость и стоимость получения новых закономерностей и новых данных, описывающих поведение природных и технологических систем. Именно поэтому теоретические и численные методы исследований поверхностных явлений так широко используются в современных фундаментальных и прикладных научных исследованиях. В четвертом, специальном выпуске «Коллоидного журнала» за 2025 год мы представляем оригинальные научные статьи, посвященные теоретическим и численным методам исследования поверхностных явлений для самых разных областей физической химии и технических приложений.

Коллектив авторов (Г.С. Ганченко, В.С. Шелистов, И.И. Ольберг, И.В. Моршнева, Е.А. Демехин) представил две работы [1, 2], посвященные исследованию явлений, возникающих при течении раствора электролита через ионоселективную область. В первой из работ [1] даны результаты теоретического исследования возникновения и развития электроконвекции около идеально ионоселективной области при однородном течении раствора электролита через эту область. Обнаружено, что зависимость критической разности потенциалов, при которой начинается электроконвекция, практически линейно зависит от скорости потока. Показано, что более высокая скорость течения электролита усиливает рост коротковолновых возмущений и при наличии дополнительного потока жидкости режимы развитой электроконвекции становятся более стохастическими.

Во второй работе [2] предложена математическая модель ячейки с ионоселективной областью, учитывающая неидеальную селективность этой области и наличие конвективного течения раствора электролита через нее. Результаты численного моделирования процессов в такой ячейке показали, что если поток жидкости сонаправлен с потоком противоионов, то степень селективности области значительно повышается. Авторы обнаружили, что влияние конвективного потока на вольтамперную характеристику ячейки для случая предельных токовых режимов является немонотонным. Полученные в работе результаты будут полезны для повышения эффективности процессов в таких практических приложениях, как предварительное концентрирование аналита для химического анализа биологических жидкостей или в электробаромембранных системах разделения жидкостей.

При анализе многих природных явлений, таких например, как грозовое электричество, а также при разработке современных технологий каплеструйной печати и при создании жидкометаллических источников, важно учитывать капиллярные осцилляции заряженных капель. Для капель микронных и субмикронных размеров на характер осцилляций могут влиять релаксационные явления в жидкости. Работа А.И. Григорьева, Н.Ю. Колбневой и С.О. Ширяевой [3] посвящена теоретическому анализу влияния релаксационных процессов на интенсивность электромагнитного излучения осциллирующей заряженной капли воды. В результате выполненного анализа показано, что интенсивность электромагнитного излучения определяется эффектами релаксации заряда в водной капле и релаксации межфазных взаимодействий в поверхностном слое. Кроме того, эти же эффекты приводят к возникновению апериодического течения и затухающих капиллярных осцилляций вязкой жидкости. В то же время релаксация вязкости воды не оказывает заметного влияния на затухающие капиллярные осцилляции и электромагнитное излучение облачных капель, приводя лишь к появлению релаксационного апериодического упругого течения жидкости и затухающих вязко-упругих осцилляций капель.

Многочисленные литературные данные указывают на то, что нелинейные эффекты при электрофорезе могут проявляться даже при отсутствии прямого переноса ионов через диэлектрическую поверхность. Рассмотрение нелинейных эффектов в таких системах необходимо, например, для оценки применимости различных приближений теории электрофореза [4] или управления переносом вещества в микрофлюидных устройствах. В работе Е.А. Франц, А.А. Крылова и Е.А. Демехина [5] показано, что важный для проявления нелинейных эффектов механизм формирования расширенной области пространственного заряда возникает в условиях сильной поляризации электрического двойного слоя, высокого поверхностного заряда и сильного электрического поля, вблизи как диэлектрической, так и ионоселективной частиц. В то же время в работе обнаружены и обсуждены качественные различия в механизме формирования расширенного пространственного заряда для указанных типов частиц.

В последние годы возрос интерес к использованию фазового перехода вода-лед, индуцируемого большими электрическими полями. В работе Ю.К. Левина [6] идея электроиндуцированного формирования ледяной оболочки была применена для объяснения стабильности нанопузырьков в объемной воде. Проанализировано два механизма долговременной стабильности нанопузырей в воде. Первый механизм объясняет стабильность нанопузыря компенсацией капиллярного давления в пузыре противонаправленным электростатическим давлением, связанным с заряжением границы нанопузырь/вода, на которой формируется гидратный слой воды. Второй механизм устойчивости определяется формированием ледяной оболочки пузыря в электрическом поле зарядов на межфазной границе. В работе показано, что в воде без солей механизм стабилизации за счет ледяной оболочки требует меньшего по величине заряжения нанопузыря, чем за счет электростатической стабилизации, тогда как в солевом растворе электростатическая стабилизация оказывается более эффективной.

Работа Ю.А. Ерошкина, Л.Ц. Аджемяна и А.К. Щекина [7] расширяет понимание полиморфизма мицелл ПАВ в безводных неполярных средах и демонстрирует эффективность термодинамического подхода к моделированию их самоорганизации. С использованием построенной авторами молекулярно-термодинамической модели образования и роста агрегатов, учитывающей флуктуационное сосуществование мицелл различной формы, показано, что минимальная работа агрегации зависит не только от числа агрегации и концентрации мономеров, но и от параметров формы, характеризующих отклонение от сферической геометрии мицеллы. В работе для дисковых и цилиндрических мицелл найдены критические концентрации мицеллообразования и соотношение малых и крупных мицелл в зависимости от равновесной концентрации мономеров.

Исследование Е.Е. Перевощикова и Д.И. Жуховицкого [8] демонстрирует важность учета тепловых эффектов, включая распределение температуры в кластерах и неидеальность пара, для корректного предсказания скорости процесса нуклеации пар-жидкость. Стационарная нуклеация пар–жидкость в работе [8] в изотермическом и неизотермическом режимах в широком диапазоне пересыщений исследована методом молекулярной динамики на основе потенциала Леннард-Джонса. Для неизотермической нуклеации обнаружено немонотонное распределение температуры по размерам кластеров и показано, что неизотермичность существенно влияет на неидеальность пара. Определенные в работе [8] критические размеры кластеров для изотермического случая показали удовлетворительное согласие с теоретической моделью, ранее разработанной одним из авторов. В неизотермическом случае теория предсказывает завышенные значения, по сравнению с полученными в [8] расчетными величинами критических размеров, что говорит о необходимости дальнейшей разработки теории для этого случая.

Результаты теоретического и экспериментального исследования испарительного охлаждения для сидящих капель водных сред, которые являются моделью атмосферных осадков на поверхностях, эксплуатирующихся в открытой атмосфере, представлены в работе К.А. Емельяненко, А.М. Емельяненко, Л.Б. Бойнович [9]. Авторы предложили дополняющие друг друга экспериментальный и теоретический подходы для оценки температуры испаряющейся капли при различных термодинамических параметрах окружающей атмосферы. Теоретический подход, основанный на рассмотрении тепловых потоков, связанных с каплей, дает оценку испарительного охлаждения сферической капли, что позволяет корректно учитывать испарительное охлаждение для малых жидких капель, форма которых хорошо описывается сферическим приближением. Напротив, экспериментальный невозмущающий подход позволяет обеспечивать высокую точность определения реальной температуры испаряющейся капли лишь для достаточно больших капель. Одним из наиболее важных результатов работы [9] является объяснение эффекта повышения задержки кристаллизации переохлажденных водных капель при высокой влажности атмосферы.

Изучение тепломассопереноса в каплях дисперсий, сидящих на твердых подложках, актуально в связи с многочисленными практическими применениями для струйной печати, испарительной литографии, медицинской диагностики и т.п. В работе П.В. Лебедева-Степанова [11] на основе аналитического решения линеаризованных уравнений Навье-Стокса и уравнения диффузии исследованы процессы массопереноса и самоорганизации частиц в многокомпонентных каплях дисперсий с микрочастицами на твердых подложках. Особое внимание уделено обсуждению механизмов переноса вещества в системах с различной летучестью компонентов и градиентом поверхностного натяжения, приводящего к возникновению конвективных потоков Марангони. Полученные в [11] результаты могут быть использованы для оценки скорости и структуры конвективного течения для управления процессом самосборки и кристаллизации растворенного вещества в испаряющейся капле путем выбора оптимального состава бинарного растворителя.

Подход, направленный на оценку адгезии в микросистемах и интерпретацию экспериментально определяемого взаимодействия между поверхностями, где ключевыми факторами являются шероховатость, влажность и площадь контакта, предложен в работе И.В. Уварова и В.Б. Светового [12]. Ими разработан теоретический подход для оценки адгезии, связанной с капиллярными силами жидких мостиков между гидрофильными шероховатыми поверхностями, полученными методами микротехнологии.

Разработанный подход основан на определении методом атомно-силовой микроскопии числа пиков шероховатости, между которыми спонтанно формируются капиллярные мостики. Проведенный в [12] анализ показал, что капиллярная составляющая адгезии убывает с ростом среднеквадратичной шероховатости и увеличивается с влажностью атмосферы. При этом увеличение площади контакта между поверхностями сопровождается снижением вклада в адгезию капиллярных сил и доминированию дисперсионных сил.

Методы атомистического моделирования были применены для исследования спонтанной сегрегации [13] и термоиндуцированных структурных превращений [14] в многокомпонентных наночастицах типа ядро–оболочка. В работе В.М. Самсонова и др. [13] методом изотермической молекулярной динамики в тернарных наночастицах ядро-оболочка, содержащих никель, платину и палладий в различных комбинациях, показано, что несмотря на взаимную диффузию компонентов, при нагревании до температуры плавления наночастицы сохраняют свою морфологию. Обнаружена повышенная стабильность наночастиц PtNi@Pd, которую авторы объяснили спонтанной сегрегацией Pd в оболочке из-за минимальной удельной поверхностной энергии Pd. Результаты работы [13] подтверждают гипотезу о том, что стабильность структур типа AB@C определяется сегрегационным поведением элемента оболочки, что найдет применение при разработке термостабильных нанокатализаторов. В работе Н.Ю. Сдобнякова и др. [14] методом молекулярной динамики с потенциалом сильной связи исследованы термоиндуцированные структурные превращения в четырехкомпонентных наносплавах Cu–Au–Pt–Pd с морфологиями типа ядро–оболочка, Янус-структуры, луковичные агрегаты, или агрегаты с равномерным распределением компонентов. Проанализировано влияние начальной конфигурации и скорости термического воздействия на фазовый переход плавление–кристаллизация, температурный гистерезис, сегрегацию и структурообразование. Результаты работы демонстрируют возможность прогнозирования свойств многокомпонентных наночастиц для задач нанотехнологии.

Многочисленные экспериментальные данные, имеющиеся в литературе, указывают на зависимость макроскопических свойств магнитных эластомеров от структур, образуемых в таких эластомерах частицами магнитного наполнителя. В частности, в недавней работе [15] было показано, что при полимеризации полидиметилсилоксана с частицами карбонила железа в отсутствии поля получается макроскопически изотропный композит. Однако если полимеризация в той же системе происходит в присутствии магнитного поля, образующийся анизоторопный композит проявляет сильный магнитореологический эффект и в разы большую жесткость. Для объяснения экспериментально обнаруженных в литературе эффектов А.Ю. Мусихиным и А.Ю. Зубаревым [16] предложена теоретическая модель, предполагающая образование плотных агрегатов частиц на стадии синтеза. В модели агрегаты магнитомягких частиц, не обладающих остаточной намагниченностью, под действием поля формируют цепочечные структуры, длина которых определяется балансом магнитных сил между агрегатами и упругих сил сопротивления полимера смещению агрегатов. Несмотря на упрощенный характер диполь-дипольного приближения, модель успешно описывает различие модулей упругости анизотропных и изотропных композитов с магнитомягкими частицами и качественно согласуется с экспериментальными данными при умеренных концентрациях частиц. Представленный теоретический анализ предлагает подход к управлению макроскопическими свойствами магнитных эластомеров.

Мы надеемся, что представленные в этом спецвыпуске работы вызовут интерес читателей и найдут применение в современных технологических решениях.

Л.Б. Бойнович, А.М. Емельяненко

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ганченко Г.С., Шелистов В.С., Ольберг И.И., Моршнева И.В., Демехин Е.А.* Исследование электроконвекции при однородном течении раствора электролита через ионоселективную область // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 290–299.
2. *Ганченко Г.С., Шелистов В.С., Ольберг И.И., Моршнева И.В., Демехин Е.А.* Моделирование влияния конвективных течений через ионоселективную область на токовые режимы в бинарных растворах электролитов // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 282–289.
3. *Григорьев А.И., Колбнева Н.Ю., Ширяева С.О.* Релаксационные явления и электромагнитное излучение осциллирующих облачных капель // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 300–320.
4. *Ермакова Л.Э., Чуйков Н.С., Волкова А.В.* О расчете электрокинетического потенциала частиц в дисперсиях детонационного наноалмаза // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 2. С. 118–127.
5. *Франц Е.А., Крылов А.А., Демехин Е.А.* Электрофорез проводящей и непроводящей микрочастицы в полярном электролите в сильном электрическом поле // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 455–468.
6. *Левин Ю.К.* Роль гидратного слоя в обеспечении стабильности нанопузыря // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 362–369.
7. *Ерошкин Ю.А., Аджемян Л.Ц., Щекин А.К.* Распространение модели обратных «сухих» мицелл на агрегаты дисковой формы // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 333–346.
8. *Перевощиков Е.Е., Жуховицкий Д.И.* Численное моделирование стационарной нуклеации с учетом

тепловых эффектов в широком диапазоне пересыщений // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 388–398.

9. *Емельяненко К.А., Емельяненко А.М., Бойнович Л.Б.* Переохлаждение испаряющихся капель воды на супергидрофобных поверхностях при низких температурах // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 321–332.
10. *Фомин Ю.Д., Циок Е.Н., Рыжов В.Н.* Влияние проницаемой мембраны на кристаллизацию простой жидкости // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 444–453.
11. *Лебедев-Степанов П.В.* Конвекция в малой полусферической капле бинарного растворителя: аналитическое решение и приложения // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 347–361.
12. *Уваров И.В., Световой В.Б.* Капиллярные силы между шероховатыми поверхностями, полученными методами микро/нанотехнологии // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 429–443.
13. *Самсонов В.М., Талызин И.В., Романов А.А., Пуйтов В.В., Жигунов Д.В., Луцай А.В., Васильев С.А., Непша Н.И., Сдобняков Н.Ю.* О взаимосвязи между спонтанной сегрегацией компонентов в тернарных наночастицах Pt–Pd–Ni и стабильностью наноструктур ядро–оболочка: молекулярно-динамическое исследование // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 399–414.
14. *Сдобняков Н.Ю., Самсонов В.М., Серов С.В., Непша Н.И., Соколов Д.Н., Савина К.Г., Вересов С.А., Колосов А.Ю.* Атомистическое моделирование термоиндуцированных структурных превращений в четырехкомпонентных наносплавах Cu–Au–Pt–Pd с различной морфологией // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 415–428.
15. *Kostrov S.A., Gorodov V.V., Muzafarov A.M., Kramarenko, E.Y.* Comparative analysis of magnetorheological effect in soft isotropic and anisotropic magnetoactive elastomers // Polymer Science, Series B. 2022. Vol. 64. No. 6. P. 888–896. DOI: 10.1134/S1560090422700579
16. *Мусихин А.Ю., Зубарев А.Ю.* Микроскопическое моделирование магнитореологических свойств магнитных эластомеров // Коллоидн. журн. 2025. Т. 87. № 4. С. 370–387.