



**Politecnico di Milano**

---

FACOLTÀ DI INGEGNERIA DEI SISTEMI  
Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Matematica

TESI DI LAUREA MAGISTRALE

**Modelli semplificati e ad elementi finiti  
per la simulazione di fenomeni di adesione in microsistemi**

Relatori:

**Prof. Alberto Corigliano**  
**Prof. Attilio Frangi**  
**Dott. Ing. Raffaele Ardito**

Candidato:

**Francesco Rizzini**  
Matricola 750274



# Indice

<b>Sommario</b>	<b>xv</b>
<b>Abstract</b>	<b>xvii</b>
<b>Introduzione</b>	<b>1</b>
<b>1 Micro Sistemi Elettro Meccanici (MEMS)</b>	<b>7</b>
1.1 Descrizione generale . . . . .	7
1.2 Progettazione di una struttura sospesa . . . . .	8
1.3 Applicazioni . . . . .	9
1.3.1 Sensori di pressione . . . . .	9
1.3.2 Accelerometri . . . . .	10
1.3.3 Giroscopi . . . . .	12
1.3.4 Interruttori RF . . . . .	13
1.3.5 MEMS microfluidici . . . . .	13
1.4 Problemi di adesione spontanea: <i>stiction failures</i> . . . . .	14
1.4.1 Simulazione numerica . . . . .	16
<b>2 Fisica dei fenomeni di adesione spontanea</b>	<b>17</b>
2.1 Energia superficiale e di interfaccia . . . . .	17
2.1.1 Lavoro di adesione e coesione nel vuoto . . . . .	17
2.1.2 Energia superficiale e tensione superficiale . . . . .	17
2.1.3 Energia di interfaccia . . . . .	19
2.1.4 Lavoro di adesione in un terzo mezzo . . . . .	19
2.1.5 Energia superficiale di trasferimento . . . . .	19
2.2 Angoli di contatto . . . . .	20
2.2.1 Variabilità dell'angolo di contatto . . . . .	22
2.2.2 Isteresi dell'angolo di contatto . . . . .	24
2.3 Considerazioni sulla stima dell'adesione . . . . .	24
2.4 Effetto della condensazione capillare sull'adesione . . . . .	26
2.5 Attuatore a forza capillare . . . . .	31
2.5.1 Introduzione . . . . .	31
2.5.2 Stima della forza capillare . . . . .	32
2.6 Interazioni di van der Waals . . . . .	35

<b>3</b>	<b>Modellazione FEM del processo di formazione dei menischi</b>	<b>39</b>
3.1	Formulazione matematica . . . . .	39
3.2	Formulazione ad elementi finiti . . . . .	41
3.2.1	Buona posizione del problema . . . . .	41
3.2.2	Convergenza . . . . .	42
3.2.3	Integrazione temporale . . . . .	45
<b>4</b>	<b>Modelli di adesione capillare</b>	<b>49</b>
4.1	Definizione delle forze: richiami . . . . .	49
4.2	Sfera su superficie piatta . . . . .	49
4.2.1	Approssimazione standard . . . . .	50
4.2.2	Modelli energetici . . . . .	50
4.2.3	Modelli a geometria esatta . . . . .	51
4.2.4	Modelli a geometria approssimata. Angoli di contatto nulli. . .	51
4.2.5	Modelli a geometria approssimata. Angoli di contatto non nulli.	55
4.2.6	Risultati . . . . .	57
4.3	Rottura del menisco . . . . .	67
4.3.1	Bilancio energetico per il modello $M_3$ . . . . .	68
4.3.2	Risultati . . . . .	69
4.3.3	Simulazione FEM della rottura di menisco . . . . .	69
4.4	Sfera su sfera . . . . .	72
4.4.1	Approssimazione standard . . . . .	72
4.4.2	Modelli a geometria esatta . . . . .	72
4.4.3	Modelli a geometria approssimata. Angoli di contatto nulli. . .	73
4.4.4	Modelli a geometria approssimata. Angoli di contatto non nulli.	75
4.4.5	Risultati . . . . .	77
<b>5</b>	<b>Generazione numerica di superfici rugose</b>	<b>85</b>
5.1	Rugosità superficiale . . . . .	85
5.2	Algoritmo di Hu-Tonder . . . . .	88
5.2.1	Descrizione dell'algoritmo . . . . .	88
5.2.2	Esempi . . . . .	91
5.3	Algoritmi a geometria semplificata . . . . .	94
5.3.1	Algoritmo 1 . . . . .	94
5.3.2	Algoritmo 2 . . . . .	100
<b>6</b>	<b>Stima dell'adesione per superfici rugose</b>	<b>107</b>
6.1	Assemblaggio delle superfici . . . . .	107
6.2	Adesione capillare . . . . .	109
6.2.1	Forza - Rugosità. Superfici correlate. . . . .	109
6.2.2	Forza - Rugosità. Superfici non correlate . . . . .	115
6.2.3	Forza - RH. Superfici correlate . . . . .	117
6.2.4	Forza - Distanza media di separazione. Superfici correlate . . .	121
6.2.5	Forza - Distanza media di separazione. Superfici non correlate .	127
6.2.6	Commenti sull'intensità della forza . . . . .	130
6.2.7	Considerazioni statistiche . . . . .	132
6.3	Adesione di van der Waals . . . . .	139

---

6.4	Energia di adesione: confronto con i dati sperimentali . . . . .	142
<b>7</b>	<b>Modellazione FEM di menischi tra superfici complesse</b>	<b>147</b>
7.1	Punta AFM su superficie piatta . . . . .	147
7.2	<i>Spring-Based Smoothing</i> per la mesh del menisco . . . . .	148
7.2.1	Risultati . . . . .	152
7.3	Modellazione di un menisco tra due superfici rugose . . . . .	153
7.3.1	Generazione e dimensionamento della superficie . . . . .	153
7.3.2	Risultati . . . . .	154
<b>8</b>	<b>Conclusioni</b>	<b>157</b>
	<b>Ringraziamenti</b>	<b>161</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>163</b>



# Elenco delle figure

1.1	Alcuni esempi di impiego dei Micro Sistemi Elettro Meccanici. . . . .	8
1.2	Procedura di fabbricazione di una semplice struttura sospesa. . . . .	9
1.3	Sensore di pressione piezoresistivo. . . . .	10
1.4	Sensore di pressione capacitivo. Da [Dolphin, 2000]. . . . .	11
1.5	Sensore di inerzia piezoresistivo. . . . .	11
1.6	Sensore di inerzia capacitivo. Da [Cacchione, 2007]. . . . .	12
1.7	Giroscopio MEMS. . . . .	13
1.8	Interruttore ad alta frequenza MEMS. . . . .	14
1.9	Diagramma di fase per il diossido di carbonio. La freccia indica il percorso seguito nella <i>supercritical CO<sub>2</sub> drying</i> . Da [Wikipedia, 2011].	15
2.1	Definizione dei termini energetici caratteristici del fenomeno dell'adesione. Da [Israelachvili, 2011]. . . . .	18
2.2	Angoli di contatto. Da [Israelachvili, 2011]. . . . .	20
2.3	Effetto delle disomogeneità chimiche e fisiche di una superficie sull'angolo di contatto. Da [Israelachvili, 2011]. . . . .	23
2.4	Isteresi dell'angolo di contatto. Da [Israelachvili, 2011]. (a) Effetto della rugosità. Una goccia di liquido su una superficie rugosa, caratterizzata da un angolo di contatto microscopico ovunque di $90^\circ$ ma con un valori misurati $\theta_a$ e $\theta_r$ molto diversi tra loro. (b) Effetto della composizione chimica eterogenea. (c) Raggruppamenti molecolari, con diversa energia di adesione e angolo di contatto, dovuti alla differente fase a cui la superficie è esposta. (d) Effetto della disomogeneità fisica causata dal contatto tra due corpi. . . . .	25
2.5	I fluidi che presentano piccoli angoli di contatto con una superficie possono spontaneamente condensare da vapore in liquido all'interno dei pori o delle microfessure, dando origine a menischi d'acqua. . . . .	26
2.6	Schema di un menisco tra una sfera e una superficie piatta. . . . .	27
2.7	Raggi di curvatura principali per un comune menisco tridimensionale di forma concava, ossia caratterizzato da angoli di contatto inferiori a $90^\circ$ . I due centri di curvatura si trovano da parti opposte rispetto alla normale alla <i>superficie</i> che definisce il menisco e per questo i due raggi sono discordi. Concordemente alla eq. (2.9), poiché in generale si avrà $ r_2  >  r_1 $ , attribuiremo valore positivo ad $r_2$ e valore negativo a $r_1$ . . . . .	28

2.8	Definizione della distanza di <i>cut-off</i> per il modello di predizione della forza capillare a partire dal caso di un menisco tra due superfici piane, con angoli di contatto $\theta$ uguali e in ipotesi $r_2 \gg r_1$ : il profilo verticale del menisco è un arco di cerchio di raggio $r_1 \approx r_k$ . . . . .	29
2.9	Dipendenza del raggio di Kelvin da: (a) umidità relativa, (b) temperatura. . . . .	30
2.10	Configurazione standard di un attuatore a forza capillare. Per migliorare la rappresentazione, le dimensioni non sono in scala in quanto solitamente l'altezza del menisco è molto maggiore del suo raggio di base. Il piatto inferiore è considerato fisso mentre quello superiore si può muovere in direzione verticale. Da [Eleftheriou e Moheimani, 2011, cp. 12]. . . . .	32
2.11	Definizione delle grandezze che caratterizzano la geometria del menisco, in [Eleftheriou e Moheimani, 2011, cp. 12]. . . . .	33
2.12	Grafico del potenziale di Lennard - Jones. . . . .	36
3.1	Soluzione del moto smorzato per diversi valori di $\nu$ . . . . .	44
3.2	Configurazione iniziale per la superficie del menisco . . . . .	46
3.3	Simulazione numerica della formazione di un menisco d'acqua tra una punta piramidale e una superficie sferica. Umidità relativa: 85% . . . . .	47
3.4	Diagramma di flusso dell'algoritmo. . . . .	48
4.1	Geometria del modello $M_1$ . Angoli di contatto nulli. . . . .	52
4.2	Geometria del modello $M_2$ . Angoli di contatto nulli. . . . .	53
4.3	Geometria del modello $M_3$ . Angoli di contatto nulli. . . . .	53
4.4	Menisco tangente alla sfera a metà del suo diametro. . . . .	54
4.5	Geometria del modello $M_3$ . Angoli di contatto non nulli. . . . .	56
4.6	Modello $M_3$ . Stima del raggio $r_2$ . . . . .	56
4.7	Modello FEM: Menisco tra una sfera di raggio $R = 15nm$ e una superficie piana per diversi valori della distanza di separazione. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. . . . .	58
4.8	Andamento forza - distanza tra una sfera di raggio $R = 15nm$ e una superficie piana. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. . . . .	59
4.9	Andamento forza - distanza tra una sfera di raggio $R = 15nm$ e una superficie piana. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto: $\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{6}$ . . . . .	60
4.10	Andamento forza - distanza tra una sfera di raggio $R = 100nm$ e una superficie piana. $RH = 0.6$ . Angoli di contatto nulli . . . . .	61
4.11	Andamento forza capillare - distanza tra una sfera di raggio $R = 15nm$ e una superficie piana. $RH = 0.8$ . Confronto con [de Boer e de Boer, 2007]. . . . .	62
4.12	Codice FEM: Sensibilità della forza al variare del coefficiente di penalità. $R = 15nm$ . $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli . . . . .	63
4.13	Codice FEM: Sensibilità della forza al variare della mesh del menisco. $R = 15nm$ . $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli . . . . .	64
4.14	Andamento forza/raggio - RH tra una sfera di raggio $R = 15nm$ e una superficie piana. $d = 0.3nm$ . Angoli di contatto nulli . . . . .	65
4.15	Andamento forza/raggio - RH tra una sfera di raggio $R = 15nm$ e una superficie piana. $d = 0nm$ . Angoli di contatto nulli . . . . .	66



4.16	Andamento forza - angoli di contatto tra una sfera di raggio $R = 15nm$ e una superficie piatta. $d = 0nm$ . $RH = 0.8$ . . . . .	67
4.17	Rappresentazione schematica del collasso di un menisco tra una sfera e una superficie piana. In [Yang et al., 2010]. . . . .	68
4.18	Modello $M3$ : Andamento $\Delta E$ -distanza tra una sfera di raggio $R = 15nm$ e una superficie piatta. $RH = 0.8$ . . . . .	69
4.19	Codice FEM: Modellazione del processo di collasso di un menisco in due gocce tra una sfera di raggio $R = 15nm$ e una superficie piatta. . . . .	71
4.20	Geometria del modello $M_3$ . Angoli di contatto nulli. . . . .	74
4.21	Geometria del modello $M_3$ . Angoli di contatto non nulli. . . . .	76
4.22	Modello $M_3$ . Stima del raggio $r_2$ . . . . .	77
4.23	Andamento forza - distanza tra due sfere di raggio $R_1 = 35nm$ e $R_2 = 140nm$ . $RH = 0.8$ . Angoli di contatto: $\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{4}$ . Tolleranza angolo di contatto: $0.05rad$ . . . . .	79
4.24	Andamento forza - distanza tra due sfere di raggio $R_1 = 130nm$ e $R_2 = 190nm$ . $RH = 0.8$ . Angoli di contatto: $\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{4}$ . Tolleranza angolo di contatto: $0.05rad$ . . . . .	80
4.25	Andamento forza - distanza tra due sfere di raggio $R_i = 1000nm$ . $RH = 0.8$ . Angoli di contatto: $\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{4}$ . Tolleranza angolo di contatto: $0.05rad$ . . . . .	81
4.26	Andamento forza - distanza tra due sfere di raggio $R_1 = 35nm$ e $R_2 = 140nm$ . $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Tolleranza angolo di contatto: $0.2rad$ . . . . .	82
4.27	Andamento forza - distanza tra due sfere di raggio $R_i = 1000nm$ . $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Tolleranza angolo di contatto: $0.25rad$ . . . . .	83
5.1	Esempio di un profilo $z(x)$ . Da [Arosio, 2009]. . . . .	86
5.2	Funzione di correlazione esponenziale $ACF(\tau) = \exp(-\tau)$ . Sono indicati, rispettivamente con una linea continua e una tratteggiata, le distanze di correlazione $\beta^* = 2.3\beta$ e $\beta^* = \beta$ . . . . .	87
5.3	Confronto tra la rugosità di un cristallo di silicio generata numericamente e misurata per mezzo del microscopio a forza atomica. Da [Baldassarre, 2011]. . . . .	89
5.4	Confronto tra i profili delle altezze misurati e quelli ricavati dalla simulazione numerica per il cristallo di silicio. Da [Baldassarre, 2011]. . . . .	90
5.5	Confronto tra le funzioni di correlazione misurate e quelli ricavate dalla simulazione numerica per il cristallo di silicio. Da [Baldassarre, 2011]. . . . .	91
5.6	Superficie rugosa di lato $5\mu m$ . $\sigma = 5nm$ . $\beta_x^* = \beta_y^* = 200nm$ . . . . .	92
5.7	Superficie rugosa di lato $5\mu m$ . $\sigma = 10nm$ . $\beta_x^* = \beta_y^* = 200nm$ . . . . .	93
5.8	I raggi delle sfere sono ottenuti sommando realizzazioni campionarie da una gaussiana di media nulla e deviazione standard assegnata (in alto) ad una quota costante $d$ (in basso). . . . .	95
5.9	Griglia dei centri dei raggi delle sfere. . . . .	95
5.10	Esempio di un caso in cui un punto della griglia di valutazione appartiene a due sfere e quella di raggio massimo (in blu) non è quella per cui (in rosso) tale punto ha quota massima. . . . .	96

5.11	Dettaglio di una superficie generata dall'algoritmo 1. . . . .	96
5.12	Distribuzione delle altezze per una superficie di $\sigma = 5nm$ e $dx = dy = 2rm$ . . . . .	97
5.13	Superficie rugosa di lato $1\mu m$ . $\sigma = 5nm$ . . . . .	98
5.14	Superficie rugosa di lato $3\mu m$ . $\sigma = 10nm$ . . . . .	99
5.15	Evoluzione del valore di RMS ottenuto dall'algoritmo nel corso delle iterazioni. . . . .	102
5.16	Superficie rugosa di lato $5\mu m$ . $\sigma = 5nm$ . . . . .	103
5.17	Confronto tra le funzioni di correlazione ottenute con i due algoritmi e l'andamento <i>esatto</i> per una superficie rugosa di lato $5\mu m$ . $\sigma = 5nm$ . . . . .	104
5.18	Confronto tra singoli diversi profili per gli algoritmi per una superficie rugosa di lato $5\mu m$ . $\sigma = 2nm$ . . . . .	105
5.19	Singoli profili di rugosità ottenuti con l'algoritmo 2 al diminuire della rugosità. . . . .	105
6.1	Assemblaggio simmetrico per due superfici generate dall'algoritmo 1, confrontato con lo stesso per due superfici generate dall'algoritmo 2. Rugosità $\sigma = 5nm$ . Si osservi la diversa scala delle ascisse tra i due grafici. . . . .	108
6.2	Assemblaggio non simmetrico per due superfici generate dall'algoritmo 1, confrontato con lo stesso per due superfici generate dall'algoritmo 2. Rugosità $\sigma = 5nm$ . Anche per questo caso si vuole rimarcare la diversa scala delle ascisse tra i due grafici. . . . .	108
6.3	Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $1\mu m^2$ . . . . .	110
6.4	Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $9\mu m^2$ . . . . .	111
6.5	Andamento forza-rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $1\mu m^2$ . . . . .	112
6.6	Andamento forza-rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $9\mu m^2$ . . . . .	112
6.7	Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. $\sigma_{min} = 2nm$ . Area superficie: $25\mu m^2$ . . . . .	113
6.8	Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. $\sigma_{min} = 1nm$ . Area superficie: $25\mu m^2$ . . . . .	114
6.9	Andamento forza per unità di superficie - rugosità per il solo modello $M_3$ sulle due diverse superfici rugose modellate con semisfere generate dai due algoritmi implementati. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $25\mu m^2$ . . . . .	114
6.10	Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. $\sigma_{min} = 2nm$ . Area superficie: $25\mu m^2$ . . . . .	115

6.11	Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. $\sigma_{\min} = 1nm$ . Area superficie: $25\mu m^2$ . . . . .	116
6.12	Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici con un numero insufficiente di realizzazioni statistiche, alla distanza iniziale. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. $\sigma_{\min} = 4nm$ . Area superficie: $25\mu m^2$ . . . . .	116
6.13	Andamento forza per unità di superficie - RH tra due superfici, alla distanza iniziale. $\sigma = 5nm$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $1\mu m^2$ . Per lo stesso caso, oltre ai plot relativi ai quattro modelli, si riportano gli stessi grafici senza i dati relativi alla <i>standard-approximation</i> per migliorare la leggibilità. . . . .	118
6.14	Andamento forza per unità di superficie - RH tra due superfici, alla distanza iniziale. $\sigma = 5nm$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $1\mu m^2$ . . . . .	119
6.15	Andamento forza per unità di superficie - RH(0:0.8) tra due superfici, alla distanza iniziale. $\sigma = 5nm$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $1\mu m^2$ . . . . .	119
6.16	Andamento forza per unità di superficie - RH tra due superfici, alla distanza iniziale. $\sigma = 5nm$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $25\mu m^2$ . Per lo stesso caso, oltre ai plot relativi ai quattro modelli, si riportano gli stessi grafici senza i dati relativi alla <i>standard-approximation</i> per migliorare la leggibilità. . . . .	120
6.17	Andamento forza per unità di superficie - distanza tra due superfici rugose generate con l'algoritmo 1. $\sigma = 5nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $1\mu m^2$ . Si riportano le forze fino alla distanza tale per cui la <i>standard-approximation</i> prevede un'intensità nulla. . . . .	121
6.18	Andamento forza per unità di superficie - distanza tra due superfici rugose generate con l'algoritmo 1. $\sigma = 10nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $4\mu m^2$ . Si riportano le forze fino alla distanza tale per cui il modello M3 prevede un'intensità nulla. . . . .	122
6.19	Andamento forza per unità di superficie - distanza tra due superfici rugose generate con l'algoritmo 1. $\sigma = 15nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $9\mu m^2$ . Si riportano le forze fino alla distanza tale per cui il modello M3 prevede un'intensità nulla. . . . .	122
6.20	Andamento forza per unità di superficie - distanza per le superfici rugose generate con l'algoritmo 1 a confronto con quello per le superfici generate con Hu-Tonder. $\sigma = 5nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $1\mu m^2$ . . . . .	123
6.21	Andamento forza per unità di superficie - distanza per le superfici rugose generate con l'algoritmo 1 a confronto con quello per le superfici generate con Hu-Tonder. $\sigma = 10nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $4\mu m^2$ . . . . .	123

6.22	Andamento forza per unità di superficie - distanza tra due superfici rugose generate con l'algoritmo 2. $\sigma = 5nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $25\mu m^2$ . Si riportano le forze fino alla distanza tale per cui la standard-approximation prevede un'intensità nulla. . . . .	124
6.23	Andamento forza per unità di superficie - distanza per le superfici rugose generate con l'algoritmo 2 a confronto con quello per le superfici generate con Hu-Tonder. $\sigma = 2nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $25\mu m^2$ . . . . .	125
6.24	Andamento forza per unità di superficie - distanza per le superfici rugose generate con l'algoritmo 2 a confronto con quello per le superfici generate con Hu-Tonder. $\sigma = 5nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $25\mu m^2$ . . . . .	125
6.25	Riproduzione della <i>texture</i> e dei menischi individuati dal modello $M_3$ per una superficie generata con l'algoritmo 2 a due diverse distanze medie di separazione da quella superiore. $\sigma = 2nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $25\mu m^2$ . I menischi sono rappresentati come dei cilindri, di colore nero, di raggio e altezza pari al menisco calcolato dal modello. . . . .	126
6.26	Andamento forza per unità di superficie - distanza tra due superfici rugose non speculari. $\sigma = 5nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $1\mu m^2$ . . . . .	127
6.27	Andamento forza per unità di superficie - distanza per le superfici rugose generate con l'algoritmo 1 a confronto con quello per le superfici generate con Hu-Tonder. $\sigma = 5nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $1\mu m^2$ . . . . .	128
6.28	Andamento forza per unità di superficie - distanza tra due superfici rugose non speculari. $\sigma = 5nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $25\mu m^2$ . . . . .	129
6.29	Andamento forza per unità di superficie - distanza per le superfici rugose generate con l'algoritmo 2 a confronto con quello per le superfici generate con Hu-Tonder. $\sigma = 5nm$ $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie: $25\mu m^2$ . . . . .	129
6.30	Andamento forza capillare-distanza tra due sfere per i valori dei raggi medi delle sfere al variare della rugosità. Con una linea tratteggiata sono evidenziati i valori limite della distanza descritti in tabella 6.1. Angoli di contatto nulli. $RH = 0.8$ . . . . .	131
6.31	Diverse realizzazioni dell'andamento forza-distanza tra due superfici rugose. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. . . . .	132
6.32	Diverse realizzazioni dell'andamento forza-RH tra due superfici rugose. $\sigma = 5nm$ . Angoli di contatto nulli. . . . .	133
6.33	Analisi dell'influenza del controllo di confidenza per una superficie di rugosità $\sigma = 5nm$ . $RH=0.8$ . Angoli di contatto nulli. . . . .	135
6.34	Analisi dell'influenza del controllo di confidenza per una superficie di rugosità $\sigma = 10nm$ . $RH=0.8$ . Angoli di contatto nulli. . . . .	136
6.35	Analisi dell'influenza dei due diversi assemblaggi. $RH=0.8$ . Angoli di contatto nulli. . . . .	137

6.36	Confronto tra gli istogrammi relativi alla distribuzione (normalizzata) delle distanze tra le sommità delle emisfere, per le superfici relative agli algoritmi 1 e 2, e tra tutti i punti che le compongono, per le superfici generate attraverso l'algoritmo Hu-Tonder, tutte alla distanza iniziale. $\sigma = 5nm$ . Il tratteggio indica la distanza limite per la formazione dei menischi del modello <i>standard-approximation</i> ( $d_{cut} = 2r_k \cos \theta$ ). . . . .	138
6.37	Andamento energia di vdW - rugosità previsto dal modello puntuale per superfici generate con l'algoritmo di Hu-Tonder (StdApPuntuale-HuTonder) a confronto con quello ottenuto dallo stesso e da quello analitico per superfici generate con l'algoritmo 1 (StdApPuntualeSfere, StdApAnaliticaSfere). . . . .	140
6.38	Andamento energia di vdW - rugosità previsto dal modello puntuale per superfici generate con l'algoritmo di Hu-Tonder (StdApPuntuale-HuTonder) a confronto con quello ottenuto dallo stesso e da quello analitico per superfici generate con l'algoritmo 2 (StdApPuntualeSfere, StdApAnaliticaSfere). . . . .	141
6.39	Andamento energia di adesione - <i>RH</i> per i diversi modelli sulle superfici generate con l'algoritmo 1 e di Hu-Tonder. $\sigma = 2nm$ . . . . .	144
6.40	Andamento energia di adesione - <i>RH</i> per i diversi modelli sulle superfici generate con l'algoritmo 2 e di Hu-Tonder. $\sigma = 2nm$ . . . . .	145
6.41	Andamento energia di adesione - <i>RH</i> per i diversi modelli sulle superfici generate con gli algoritmi 2 e di Hu-Tonder, per i due valori di rugosità $\sigma = 1nm$ e $\sigma = 0.5nm$ . . . . .	145
6.42	Andamento energia di adesione - <i>RH</i> per i diversi modelli a confronto con quelli ottenuti in [Ardito et al., 2010] attraverso un modello che consideri anche le deformazioni plastiche. . . . .	146
6.43	Andamento energia di adesione - <i>RH</i> per i diversi modelli sulle superfici generate con gli algoritmi 1, 2 e di Hu-Tonder. Per queste ultime si è utilizzato come distanza iniziale quella alla quale le superfici si toccano in un solo punto. $\sigma = 2nm$ . . . . .	146
7.1	Menisco tra una punta triangolare e una superficie piatta: in evidenza gli elementi distorti della membrana a contatto con la superficie rigida superiore . . . . .	148
7.2	Menisco tra una punta triangolare e una superficie piatta: in evidenza gli elementi distorti della membrana a contatto con la superficie rigida superiore caratterizzati da un alto valore del residuo. Per dare un'idea delle dimensioni, la punta triangolare ha un'altezza di $25nm$ . . . . .	148
7.3	Definizione dei livelli . . . . .	149
7.4	Procedura di remeshing uniforme per un menisco di 5600 elementi tra una punta AFM e una superficie piatta. Tempo di esecuzione per 300 iterazioni: 1.8s . . . . .	150
7.5	Procedura di remeshing uniforme per un menisco di 5600 elementi tra una punta AFM e una superficie piatta. Tempo di esecuzione per 300 iterazioni: 1.8s . . . . .	151

---

7.6	Immagine di un menisco tra una punta triangolare e una superficie piatta, con vista dall'interno della punta, ottenuto attraverso la procedura di rilassamento senza raffinamento della mesh: sono visibili gli elementi del menisco che attraversano la superficie rigida e i nodi in cui si ha la concentrazione del residuo. . . . .	152
7.7	Immagine di un menisco tra una punta triangolare e una superficie piatta, con vista dall'interno della punta, ottenuto attraverso la procedura di rilassamento con raffinamento della mesh in prossimità dei bordi: sono visibili gli elementi del menisco che attraversano la superficie rigida e i nodi in cui si ha la concentrazione del residuo. . . . .	153
7.8	Diverse inizializzazioni per le geometria del menisco tra due superfici rigide di rugosità $\sigma = 5nm$ . . . . .	155
7.9	Menisco calcolato tra due superfici di rugosità $\sigma = 5nm$ , con un rilassamento della mesh ogni 100 iterazioni. $RH = 0.8$ . Angoli di contatto $\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{18}$ . . . . .	156

# Elenco delle tabelle

5.1	Proprietà statistiche delle superfici generate. . . . .	97
6.1	Distanza media tra le sfere in cui i diversi modelli individuano un menisco. Distanze e rugosità sono espresse in <i>nm</i> . . . . .	130
6.2	Distanza all'equilibrio per le diverse superfici. Con «(non sym.)» si intendono i dati relativi all'assemblaggio non speculare per le superfici generate con gli algoritmi 1 e 2 . . . . .	139





# Sommario

La tecnologia dei Micro Sistemi Elettro Meccanici (MEMS) è adottata negli ambiti applicativi più vari ed ha destato negli ultimi decenni un'attenzione sempre crescente. L'affidabilità dei microsistemi è diventata, con il crescere delle applicazioni, oggetto di numerosi studi. Fra i problemi di affidabilità vi è quello relativo ai fenomeni di adesione spontanea che costituiscono, ad oggi, uno dei limiti principali dei dispositivi che l'industria è in grado di produrre.

In questa tesi vengono studiate due delle principali cause di tale fenomeno, ossia le forze di van der Waals e quelle di natura capillare, con particolare riferimento alle seconde. Nel comportamento dei MEMS, infatti, a causa delle loro dimensioni micro e nanoscopiche, sono maggiormente determinanti questo tipo di forze superficiali rispetto ad altre, tipiche invece della grande scala, come ad esempio la gravità.

L'intento principale del lavoro è stato quello di sviluppare un nuovo modello in grado di fornire una stima dell'energia di adesione capillare fra due superfici rugose poste a distanza ravvicinata, al variare dell'umidità relativa. Per questo motivo si è elaborato un algoritmo in grado di modellare la rugosità attraverso delle calotte sferiche, al fine di poter applicare a queste superfici alcuni modelli predittivi ricavati per il caso di singole asperità, più raffinati del modello di base fino ad ora utilizzato in letteratura che, nonostante sia applicabile anche a superfici più rappresentative di quelle reali, è caratterizzato da ipotesi e semplificazioni la cui validità è spesso discutibile.

Il confronto dei risultati ottenuti dalla modellazione con alcuni dati sperimentali ha mostrato un accordo soddisfacente.



# Abstract

Micro Electro Mechanics Systems (MEMS) are adopted in many different applications. Over the past two decades they have received increasing attention. In parallel with the increasing number of applications, reliability of MEMS has become object of many studies. Among reliability problems for MEMS, phenomena of spontaneous adhesion represent one of the main limit to the technological progress of these devices. This thesis focuses on two of the main causes of this phenomenon: the van der Waals and the capillarity forces, with particular reference to the latter. In the MEMS behavior, in fact, because of their micro and nano size, this type of forces are more important than other, typical of the larger scale, such as gravity.

The main intent was to develop a new model able to provide an estimate of the adhesion energy, for two rough surfaces coming into contact, as function of the relative humidity. For this reason we elaborated an algorithm able to model the roughness using spherical caps in order to apply to these surfaces some predictive models derived for the case of individual asperities, more refined than the basic model used up to now. This simple model was applicable to most representative texture but it is characterized by assumptions and simplifications whose validity is often questionable. The comparison between numerical results and experimental data has shown a satisfactory agreement.



# Introduzione

I Micro Sistemi Elettro Meccanici (MEMS), anche indicati con il termine microsistemi, sono dei complessi dispositivi in grado di convertire un segnale non elettrico che può essere, ad esempio, la pressione, il campo magnetico, l'accelerazione o la velocità angolare in un segnale elettrico; viceversa essi possono trasformare un segnale elettrico in lavoro meccanico come un movimento, una vibrazione o l'applicazione di una pressione.

La tecnologia dei microsistemi è adottata negli ambiti applicativi più vari: questi dispositivi sono stati riconosciuti come una delle tecnologie più promettenti del XXI secolo, capaci di rivoluzionare sia il mondo industriale, sia quello dei prodotti di largo consumo, consentendo di rendere la nanotecnologia una realtà. Molti MEMS si basano su microscopici specchi o lenti oscillanti in versione singola o multipla che vengono usati per realizzare complessi apparati opto-elettronici, quali per esempio commutatori per segnali laser, sensori per telescopi, lenti deformanti, proiettori e display avanzati, ma anche sensori inerziali e accelerometri di precisione, presenti oggi in molti dispositivi elettronici di largo consumo come smartphone e tablet, fino a scanner retinici, otturatori digitali, interferometri e altri svariati sensori per misure sofisticate.

Nell'ambito dell'elettronica delle microonde (1 GHz - 100 GHz), sono impiegati come singoli interruttori per realizzare applicazioni più complesse come sfasatori, reti di adattamento, filtri risonanti e reti di alimentazioni per antenne. Anche nella tecnologia della chimica e della bioingegneria vengono utilizzati i MEMS per nuove soluzioni: tra le applicazioni troviamo micromotori elettrici del diametro di pochi millimetri e della lunghezza di circa dieci, ingranaggi epicicloidali inclusi e micro pompe.

I MEMS sono generalmente composti da strutture meccaniche libere di muoversi rispetto ad un substrato. Muovendosi, il dispositivo rileva la variazione di alcune grandezze elettriche, alla quale viene associata la misura della quantità di interesse. Le parti meccaniche di questi dispositivi sono tipicamente caratterizzate da strutture piatte, delle dimensioni di diversi micrometri, ma anche meno (tanto che oggi si parla addirittura di NEMS, a testimoniare la rapidissima evoluzione che la tecnologia moderna subisce, essendo ora in grado di ridurre al nanometro la dimensione dei dispositivi prodotti), estremamente sottili, poste molto vicine le une alle altre. Una configurazione di questo tipo agevola l'insorgere di fenomeni di adesione, causati dall'attrazione delle superfici della parte mobile verso il substrato. Se la forza di richiamo elastico dovuta alla struttura meccanica non è sufficiente a bilanciare l'energia di adesione, le componenti rimangono incollate compromettendo il corretto funzionamento del dispositivo. Risulta dunque di particolare interesse per la progettazione e la rea-

lizzazione di MEMS efficienti uno studio approfondito riguardo i fenomeni adesivi che intervengono in questi sistemi.

Le forze che contribuiscono all'adesione delle componenti meccaniche dei MEMS, alla micro e nanoscala, possono essere di natura differente: le tre principali sono quelle elettrostatiche, capillari e di van der Waals. In questo lavoro ci occuperemo solamente delle ultime due, con particolare riferimento a quelle dovute a fenomeni capillari: se per le interazioni di van der Waals sono già disponibili modelli predittivi sufficientemente accurati, numerosi lavori, in particolare nell'ultimo decennio, sono invece dedicati allo studio e alla predizione delle forze di natura capillare dovute alla possibile presenza di un menisco liquido tra due superfici rigide. Il problema è tutt'ora aperto in quanto, anche considerando geometrie molto semplici, non ci sono strumenti che permettano di calcolare l'esatta geometria del menisco dalla quale dipende la forza che esso genera e, inoltre, la modellazione matematica del fenomeno è ancora materia di dibattito [Sirghi et al., 2006]. Gli approcci principali che si possono seguire sono due [Payam e Fathipour, 2011], a seconda che si ipotizzi o meno l'equilibrio termodinamico tra il liquido e il vapore circostante. In ipotesi di equilibrio termodinamico la curvatura media del menisco è costante e si può calcolare attraverso l'equazione di Kelvin, risolvibile sia per via numerica [Pakarinen et al., 2005], [Chau et al., 2007] che con approcci analitici [Stifter et al., 2000]; in caso contrario è più appropriata una formulazione basata sulla conservazione del volume di liquido. Numerosi sono i lavori basati su quest'ultima ipotesi ma i risultati che i modelli producono sono obbligatoriamente confrontati con dati sperimentali riferiti a dimensioni maggiori di quelle di interesse nei MEMS, dove il liquido che forma il menisco è collocato volutamente tra le due superfici in modo da poterne controllare il volume [Rabinovich et al., 2005], [Mu e Su, 2007], [Payam e Fathipour, 2011]. La situazione di maggiore interesse ingegneristico nell'ambito dei microsistemi si riferisce alla condensazione capillare spontanea tra due superfici che, oltre a verificarsi alle dimensioni della nanoscala, non consente una misurazione del volume condensato. Più realistico è valutare quindi l'umidità dell'ambiente, dalla quale dipende il valore del raggio di Kelvin con il quale procedere alle stime della forza ipotizzando l'equilibrio termodinamico all'interfaccia liquido-aeriforme [Butt, 2008].

In entrambe le ipotesi si può arrivare alla stima delle forze o attraverso un metodo diretto (*Laplace approach*) o attraverso delle considerazioni di carattere energetico. Nel primo caso la forza capillare è divisa in una componente dovuta alla tensione superficiale e in un'altra causata dalla differenza di pressione tra la fase liquida del menisco e quella di vapore circostante; si assume qui implicitamente che la risultante totale abbia una direzione fissata a priori, con una sola delle tre componenti nello spazio non nulle. Se la forza dovuta alla tensione superficiale è sempre di tipo attrattivo tra le superfici, non è così per la seconda che può essere anche repulsiva in base al segno della differenza di pressione citata, che è definita dall'equazione di Laplace. Alla stima della forza di adesione capillare si può giungere anche seguendo un approccio energetico, esprimendo l'energia totale del menisco come somma dei contributi dovuti alle diverse interfacce e derivando poi l'espressione ottenuta rispetto alla distanza tra gli oggetti.

A prescindere dall'ipotesi termodinamica assunta e dal tipo di approccio seguito, per valutare correttamente l'entità dei contributi che concorrono a determinare la forza

di attrazione dovuta all'adesione capillare si renderebbe necessario, come detto, conoscere l'esatta geometria del menisco e, in particolare, l'area delle diverse interfacce. A causa della presenza di variabili difficilmente controllabili, questo è in generale molto difficile, anche considerando geometrie semplificate come quella di un menisco tra una sfera e un piano o tra due sfere che, tra le più frequenti in letteratura anche per la maggior facilità di realizzazione nelle prove sperimentali, sono configurazioni caratterizzate da evidenti simmetrie. In realtà per queste due configurazioni si possono trovare soluzioni esatte (ad es. [Lian et al., 1993], [Melrose, 1966]), espresse però in termini di integrali ellittici e parametri adimensionali che le rendono inutilizzabili in contesti pratici. In letteratura sono frequenti quindi diverse approssimazioni, sia di carattere geometrico che numerico a partire dalle quali è possibile arrivare ad una stima ingegneristica della forza voluta, come ad esempio angoli di contatto uguali per le due superfici [Israelachvili, 2011], [Lambert et al., 2008], [Mu e Su, 2007] e/o dimensioni identiche per il caso delle due sfere [Mu e Su, 2007], [Rabinovich et al., 2005]. Altre ipotesi a priori possono riguardare la geometria del menisco, dove il profilo verticale viene a volte approssimato come l'arco di un cerchio o di un paraboloido [de Lazzer et al., 1999], [Pepin et al., 2000], [Stifter et al., 2000]: calcoli numerici della curvatura hanno mostrato che l'approssimazione circolare risulta valida in molti casi [Pakarinen et al., 2005].

Nel caso di non equilibrio termodinamico esistono dei tentativi di rilassare le ipotesi sulla geometria delle superfici rigide e sulle condizioni al contorno con il menisco [Payam e Fathipour, 2011] che trovano riscontri soddisfacenti con i dati sperimentali disponibili. Per quanto riguarda invece la soluzione dell'equazione di Kelvin, come alternativa al calcolo numerico esplicito si ipotizza in genere una dimensione del menisco in altezza molto minore che in larghezza, a seguito della quale risulta ragionevole trascurare uno dei due raggi di curvatura e approssimare il profilo verticale come un arco di cerchio di raggio pari a quello di Kelvin, per arrivare ad una stima delle forze che, a nostra conoscenza, è disponibile in questi casi solo per le geometrie di base sopra descritte [de Boer e de Boer, 2007], [Butt, 2008]. Questa ipotesi risulta ragionevole in diverse circostanze, in particolare se la distanza tra le asperità tra cui il menisco si forma è prossima allo zero: per valori maggiori, infatti, esso subisce un progressivo stiramento che porta la geometria ad una situazione inversa rispetto a quella ipotizzata, fino all'istante in cui si andrà incontro a rottura.

Questa tesi si inserisce all'interno di un progetto del gruppo di ricerca sui MEMS del Dipartimento di Ingegneria Strutturale del Politecnico di Milano ([www.stru.polimi.it/mems](http://www.stru.polimi.it/mems)), cofinanziato dalla fondazione Cariplo. Il lavoro svolto fino a questo momento, riguardante lo studio e la predizione dell'adesione nelle micro macchine, ha portato all'elaborazione di un codice di calcolo per la stima dell'energia di adesione in grado di tenere in considerazione le forze di van der Waals, quelle di natura capillare oltre che una componente dovuta alla deformazione plastica delle asperità. Dal momento che nessun metodo di fabbricazione, per quanto preciso, può produrre una superficie piana a livello molecolare, per i materiali di uso comune, si è anzitutto considerato un generatore numerico di superfici rugose: a tale scopo si sono analizzati diversi algoritmi al fine di compararne le prestazioni [Arosio, 2009]: si è poi supposto che il materiale che costituisce le superfici fosse caratterizzato da un modello elasto-plastico di von Mises e che il possibile contatto tra due asperità appartenenti a superfici diverse

avvenisse senza attrito. Per la stima delle interazioni di van der Waals si è utilizzato il potenziale di Lennard-Jones [Jones, 1924] mentre per quelle di natura capillare un modello molto semplificato [van Spengen et al., 2002] che assegna interazione costante o nulla a seconda che due punti delle due superfici poste in prossimità siano ad una distanza inferiore o superiore di un certo valore limite. Tale scelta è stata condizionata dal fatto che non esistono al momento modelli più raffinati di predizione tra due asperità di forma geometrica irregolare prive di simmetrie.

In [Arosio, 2009] sono stati introdotti, inoltre, due modelli di predizione delle forze capillari per il caso di una sfera su un piano e di due sfere. Essi sono costruiti in regime di equilibrio termodinamico con delle ipotesi a priori sulla geometria del menisco e sulla distanza oltre la quale esso non si può formare. I risultati predittivi sono stati comparati con quelli ottenuti attraverso una nuova metodologia, sviluppata all'interno del dipartimento, che prevede l'utilizzo di elementi finiti di membrana per simulare la formazione di un menisco d'acqua tra due corpi ai quali non è richiesto, in generale, alcun tipo di simmetria, ottenendo un discreto accordo tra i diversi andamenti.

All'interno di questa tesi si è anzitutto sviluppato un nuovo modello analitico predittivo, sulla base dei due proposti in [Arosio, 2009] che, con uno sforzo computazionale di poco superiore, garantisce risultati, in termini di predizione della forza, più vicini a quelli ottenuti con il codice FEM. Il nuovo modello introdotto si basa come gli altri sull'ipotesi di equilibrio termodinamico oltre che di profilo circolare e procede al calcolo della forza secondo l'approccio diretto (di Laplace) per il caso di un menisco tra una sfera e un piano o tra due sfere, con angoli di contatto e dimensioni scorrelate. L'intento principale nello sviluppare il nuovo modello è stato quello di tenere in maggiore considerazione le dimensioni caratteristiche del menisco, soprattutto quando la distanza di separazione tra le due asperità diventa rilevante, senza risolvere numericamente l'equazione di Kelvin per la curvatura.

L'obiettivo successivo era poi quello di utilizzare il codice ad elementi finiti per simulare la formazione di menischi tra due generiche superfici rugose generate con gli algoritmi di cui si accennava in precedenza. Non essendo però riusciti ad ottenere risultati soddisfacenti in questa direzione, si è allora studiato un generatore numerico di superfici alternativo dove la rugosità venisse modellata con delle calotte sferiche, al fine di poter applicare i nuovi modelli introdotti per ogni singola *asperità*. Riuscendo con questo nuovo strumento a riprodurre le principali proprietà fisico-statistiche di interesse, seppur prevedibilmente in maniera meno raffinata che con gli altri generatori disponibili, si è potuto arrivare ad una predizione dell'adesione tra due superfici di rugosità assegnata applicando i modelli sviluppati per due singole sfere ad ogni coppia di asperità corrispondenti e ad un confronto con alcuni dati sperimentali disponibili in letteratura ([DelRio et al., 2005], [de Boer et al., 1999]).

La tesi è organizzata nel seguente modo: nel capitolo 1 viene presentata una breve introduzione al mondo dei MEMS. Inizialmente vengono descritti alcuni dei dispositivi più diffusi in commercio con un cenno al loro principio di funzionamento e alle fasi principali della lavorazione necessaria per realizzarli. Successivamente si presenta una panoramica dei problemi di adesione spontanea che possono insorgere tra superfici in microsistemi e che possono portare al mancato funzionamento del sensore.

Il capitolo 2 è dedicato ad una trattazione fisica dei fenomeni di adesione spontanea con particolare riferimento a quelli di natura capillare.



Nel capitolo 3 viene descritto il codice FEM per la simulazione della formazione di un menisco tra due generiche superfici. A partire dalla formulazione del problema governante il fenomeno in forma forte, con metodologie tipiche della meccanica computazionale e del calcolo delle variazioni, si giunge ad una formulazione debole, vero punto di partenza della discretizzazione numerica. In conclusione sono riportate alcune considerazioni di carattere generale riguardanti la buona posizione del problema. Nel capitolo 4 si trova una dettagliata presentazione del nuovo modello analitico predittivo introdotto in questo lavoro, sia per il caso di un menisco tra una sfera e una superficie piana che per quello tra due sfere. Vengono analizzati gli andamenti della forza prevista e confrontati con quelli dei modelli introdotti in [Arosio, 2009], con quelli ottenuti dalla simulazione FEM con i quali si è ottenuto un eccellente accordo e con alcuni disponibili in letteratura.

I capitoli successivi sono dedicati all'estensione dei modelli analitici per due singole sfere al caso di una superficie rugosa modellata attraverso calotte sferiche. Inizialmente (capitolo 5) vengono presentati i due algoritmi introdotti per generare tali superfici, seguiti da un'analisi statistica a posteriori dei risultati che consentono di ottenere. Questi sono poi confrontati anche con quelli relativi ad uno degli algoritmi analizzati in [Arosio, 2009] che è stato preso come riferimento, risultato di un *trade-off* tra performance e onere computazionale. Successivamente (capitolo 6) si propone l'analisi predittiva vera e propria, ottenuta utilizzando i diversi modelli disponibili, sia per le superfici rugose realistiche che per quelle modellate con gli algoritmi introdotti: prima vengono presentati gli andamenti della forza capillare al variare di alcuni diversi parametri per arrivare poi, dopo un breve cenno ai risultati inerenti le interazioni di van der Waals, al confronto con i dati sperimentali riguardanti l'energia di adesione al variare dell'umidità relativa.

Il capitolo 7 presenta le modifiche e gli sviluppi apportati al codice ad elementi finiti nell'intento di poterlo utilizzare per la simulazione di menischi tra generiche superfici rugose. Purtroppo però, come già accennato, i risultati raggiunti in questa direzione non sono stati soddisfacenti e l'obiettivo ultimo di utilizzare tale strumento per un'analisi statistica della formazione di menischi e delle conseguenti forze di adesione generate, non è stato completamente raggiunto.

Nel capitolo 8 si riportano alcune osservazioni conclusive.



# Capitolo 1

## Micro Sistemi Elettro Meccanici (MEMS)

In questo capitolo viene fornita una breve introduzione riguardante i MEMS, facendo riferimento a [Cacchione, 2007]. Lo studio del fenomeno di adesione svolto in questo lavoro è in parte motivato e, comunque, strettamente legato alle problematiche inerenti questi dispositivi, in quanto l'adesione superficiale ne può compromettere sia la realizzabilità che la corretta funzionalità.

### 1.1 Descrizione generale

La microelettronica convenzionale è un settore in continua espansione: nel corso degli anni, seguendo la legge di Moore<sup>1</sup>, sono stati compiuti grandi passi in avanti raggiungendo risultati, dal punto di vista di velocità dei processori, densità di integrazione dei componenti e capacità di memoria, prima inimmaginabili.

Più recentemente, inoltre, dalla tecnologia legata alla fabbricazione di circuiti integrati è emersa una nuova applicazione che ha portato ad un diverso approccio nella progettazione e nello sviluppo. Si tratta dei MEMS, acronimo dall'inglese *Micro-Electro-Mechanical Systems*, dispositivi costruiti utilizzando alcune tecniche di fabbricazione tipiche dell'industria dei semiconduttori, ossia la produzione di grandi quantità di componenti su *wafers* di silicio. La differenza consiste nel fatto che i componenti elettrici ed elettronici si combinano anche ad elementi meccanici e ottici. L'utilizzo di queste micromacchine è in continua espansione e le previsioni per i prossimi anni sono caratterizzate ancora da un trend di crescita

I MEMS estendono le funzionalità dei componenti di silicio a molte nuove applicazioni: i circuiti microelettronici integrati (ICs) possono essere pensati come i “*cervelli*” dei sistemi e i MEMS aumentano la loro capacità di prendere decisioni per mezzo di “*occhi*” e “*braccia*”, in modo che il microsistema possa percepire e controllare l'ambiente. Nella loro forma più semplice, questi sensori sono in grado di ricavare informazioni dall'ambiente misurando fenomeni meccanici, termici, biologici, chimici, ottici e magnetici. Le componenti elettroniche analizzano le informazioni provenienti dai sensori e dirigono la risposta dell'attuatore per mezzo di movimenti, posizionamenti, regola-

---

<sup>1</sup>In elettronica e informatica si indica come prima legge di Moore il seguente enunciato: «Le prestazioni dei processori, e il numero di transistor ad essi relativo, raddoppiano ogni 18 mesi.»

zioni, pompaggi e filtraggi, al fine di raggiungere i risultati desiderati.

Oggi i più comuni dispositivi MEMS sono i sensori meccanici che misurano l'accelerazione, la velocità di rotazione e la pressione, presenti in molti dei dispositivi tecnologici di uso comune, anche se sempre più micromacchine trovano applicazione in altri ambiti, come i sistemi termofluidi, che rappresentano una tecnologia in forte espansione.



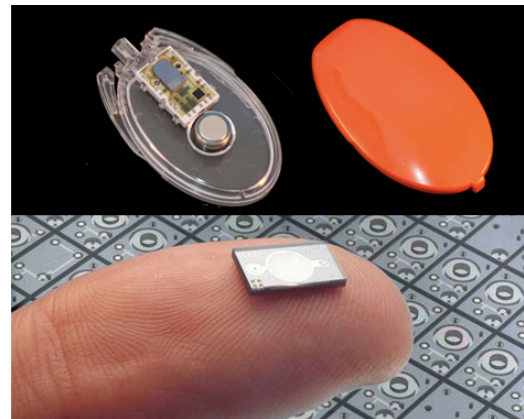
(a) *No caption required.*



(b) *No caption required (2).*



(c) *Testine di stampa termica a getto d'inchiostro.*



(d) *Una micropompa (Debiotech™ e STMicroelectronics) utilizzata per iniettare automaticamente l'insulina nei pazienti affetti da diabete.*

Figura 1.1: Alcuni esempi di impiego dei Micro Sistemi Elettrico Meccanici.

## 1.2 Progettazione di una struttura sospesa

In questa sezione viene presentato un esempio di come un processo di microfabbricazione può essere utilizzato per progettare una struttura sospesa come quella che costituisce un MEMS. Poiché lo scopo è solo quello di dare un'idea di come avviene la

lavorazione, ci limiteremo ad un caso molto semplice come quello della realizzazione di una trave a mensola ancorata ad un substrato. È opportuno sottolineare che tutti i passi che verranno descritti sono in realtà la somma di molti processi tecnologici aventi come obiettivo quello di generare un materiale con particolari dimensioni e spessore, senza difetti e con desiderate proprietà fisico-chimiche.

La Figura 1.2 illustra la procedura di fabbricazione. Partendo da un substrato di monosilicio (Figura 1.2(a)), è possibile far crescere una pellicola di ossido di silicio (Figura 1.2(b)). Questo strato è necessario per creare la separazione tra la struttura mobile e il substrato. Il passo successivo consiste nel creare un foro quadrato nello strato di ossido di silicio (Figura 1.2(c)) per poi depositare sopra l'intera struttura una pellicola di polisilicio (Figura 1.2(d)). La cavità fatta in precedenza viene perciò riempita di tale materiale: in corrispondenza del foro si crea, così, la connessione meccanica tra il polisilicio e il substrato. In seguito, attraverso un processo litografico di incisione si conferisce alla struttura meccanica la forma desiderata (Figura 1.2(e)). A questo punto la struttura non è però libera di muoversi, in quanto risulta incollata al substrato sottostante dallo strato di ossido: per questo l'ultimo passo consiste nella rimozione dell'ossido, solitamente mediante un attacco acido (Figura 1.2(f)).

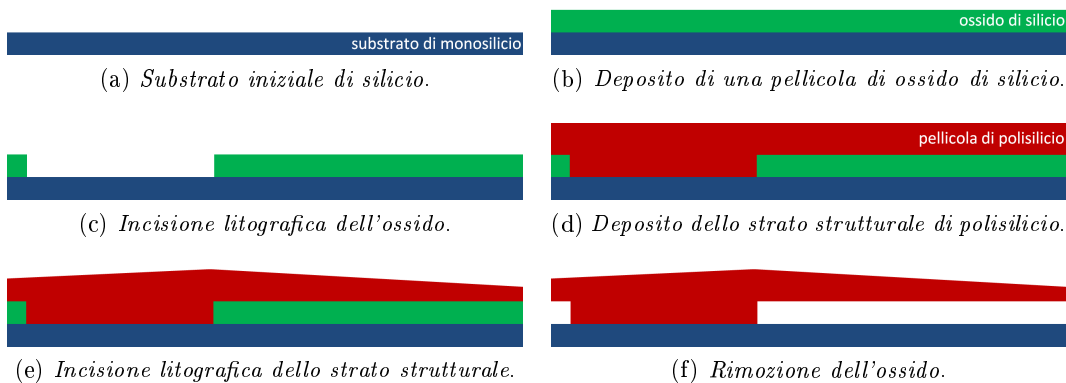


Figura 1.2: Procedura di fabbricazione di una semplice struttura sospesa.

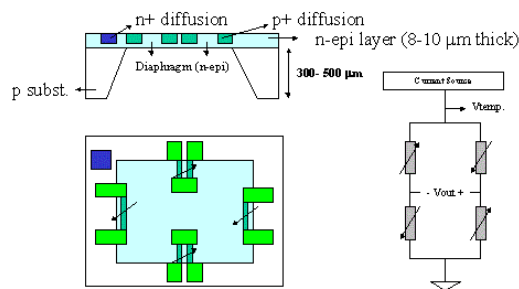
## 1.3 Applicazioni

In questa sezione vengono introdotti alcuni esempi di MEMS oggi utilizzati: in particolare verranno trattati sensori di pressione, accelerometri, giroscopi, interruttori oltre ad un breve cenno ai MEMS microfluidici.

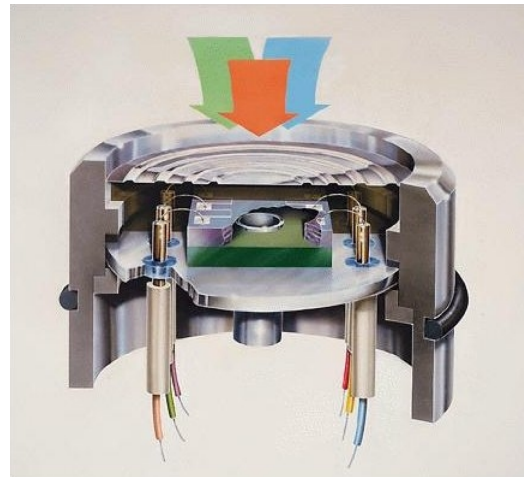
### 1.3.1 Sensori di pressione

I sensori di pressione si trovano in un'ampia area di applicazioni, che costituisce un settore in forte espansione e che varia da sistemi di monitoraggio della pressione sanguigna, lavatrici, pneumatici e scarichi delle automobili a sistemi idraulici e aeronautici. Tali MEMS si possono classificare in due famiglie, a seconda del modo in cui viene rilevata la pressione:

- dispositivi piezoresistivi (Figura 1.3). Sono i più semplici e consistono in sottili piatti con gli estremi fissati al substrato. Quando la pressione agisce sopra la superficie causa una deformazione del piatto. Vicino ai lati della membrana, dove le deformazioni sono massime, vengono posizionati quattro piezoresistori sensibili alle deformazioni del piatto: misurando le variazioni delle loro resistenze è possibile conoscere il valore della pressione agente sulla membrana.



(a) *Schema*. Da [Metu Mems, 2002].



(b) *Rapp. grafica*. Da [Josefaipulo, 2011].

Figura 1.3: Sensore di pressione piezoresistivo.

- dispositivi capacitivi (Figura 1.4). Essi si basano su di un diverso principio di funzionamento e l'intero sistema agisce come un condensatore: quando la pressione deforma il piatto, questo si muove verso un elettrodo posizionato nella parte sottostante e la diminuzione della distanza tra il piatto e l'elettrodo causa un aumento della capacità totale. Conoscendo quindi la relazione che intercorre tra la configurazione deformata del piatto e la variazione di capacità e quella tra la pressione applicata e la forma deformata del piatto, è possibile misurare la pressione.

### 1.3.2 Accelerometri

Gli accelerometri (sensori inerziali) sono ampiamente utilizzati nelle industrie aerospaziali, di difesa, dell'automobile, navali e di consumo. Nell'industria aerospaziale, ad esempio, vengono impiegati per la stabilizzazione del volo degli aeroplani e dei razzi e per la navigazione. Le applicazioni nel settore automobilistico, invece, includono i sistemi di stabilità dei veicoli, i sistemi di aiuto alla navigazione i sensori di impatto negli airbag. Infine, le applicazioni in ambito navale riguardano la stabilizzazione dell'imbarcazione e la navigazione.

I più comuni accelerometri MEMS si dividono anch'essi nelle due categorie analoghe a quelle viste per i sensori di pressione.

- dispositivi piezoresistivi. In questo tipo di sensori, alcuni piezoresistori (Figura 1.5(a)) sono distribuiti sulla parte superiore della superficie del dispositivo

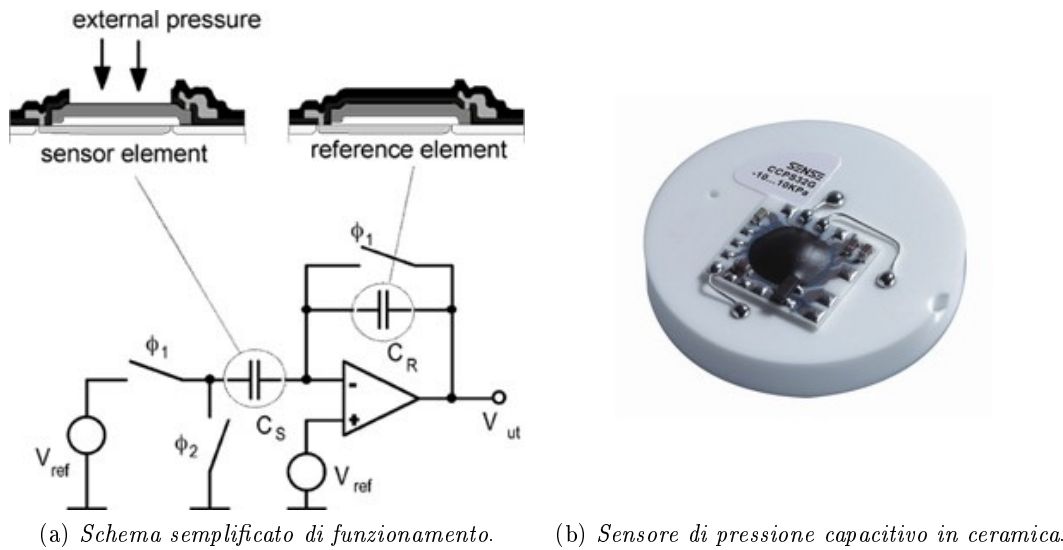


Figura 1.4: Sensore di pressione capacitivo. Da [Dolphin, 2000].

e connessi elettricamente. Quando l'accelerazione agisce sul sistema, la massa di prova reagisce muovendosi e deformando la sottile membrana sospesa sopra di essa: questa deformazione causa una variazione della resistenza dei piezoresistori, rilevata da un circuito elettronico che calcola poi la forza e la direzione dell'accelerazione.

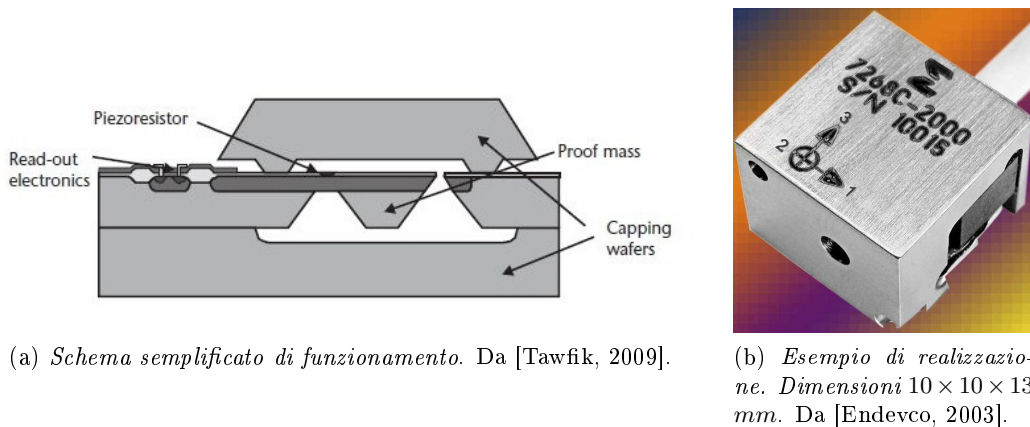
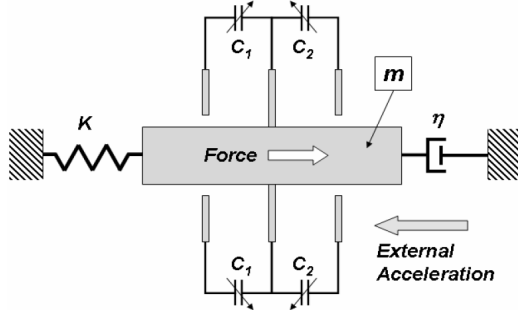


Figura 1.5: Sensore di inerzia piezoresistivo.

- o dispositivi capacitivi. Come mostra la Figura 1.6, il dispositivo può essere schematizzato come un sistema meccanico del secondo ordine, composto da una massa, una molla e uno smorzatore. Quando l'accelerazione esterna agisce sul sistema, la massa si muove in direzione opposta a quella dell'accelerazione. Lo spostamento viene rilevato dal sistema capacitivo, costituito da un certo numero di elettrodi, che sono connessi con la massa e dunque liberi di muoversi, e da altri sensori che invece sono fissati sul substrato. Lo spostamento della massa causa un cambiamento della capacità misurata dal sistema elettrostatico e dalla mi-

sura diretta di questa variazione è possibile calcolare il valore dell'accelerazione esterna.



(a) Schema semplificato di funzionamento.



(b) Due esempi di realizzazione con relative misure (Colibrys Ltd.).

Figura 1.6: Sensore di inerzia capacitivo. Da [Cacchione, 2007].

### 1.3.3 Giroscopi

I giroscopi *tradizionali* alle macroscale utilizzano generalmente una grande massa rotante ad alta velocità. Tuttavia, alla microscaletta, l'entità delle forze di attrito, che causano un prematuro fallimento del sistema, e le tecniche di lubrificazione non sono adeguatamente efficienti; per questo, nei microdispositivi, questa tecnica non può essere impiegata e si ricorre così ad una struttura meccanica che viene guidata verso la risonanza, a cui si aggiunge una sollecitazione generata dalla rotazione e dovuta alla forza di Coriolis. Con riferimento allo schema meccanico del giroscopio (Figura 1.7), è possibile scrivere le equazioni del moto nelle coordinate locali:

$$\begin{cases} m\ddot{x} + \eta_x\dot{x} + k_x x = F_x + mx\dot{\theta}^2 + my\ddot{\theta} + 2m\dot{y}\dot{\theta} \\ m\ddot{y} + \eta_y\dot{y} + k_y y = F_y + my\dot{\theta}^2 - mx\ddot{\theta} - 2m\dot{x}\dot{\theta} \end{cases}$$

dove  $m$  è la massa del sistema,  $x$  e  $y$  le coordinate nel sistema di riferimento locale,  $\eta_x$  e  $\eta_y$  i coefficienti di smorzamento,  $k_x$  e  $k_y$  le costanti elastiche,  $F_x$  e  $F_y$  le forze agenti sul sistema e  $\theta$  la rotazione della configurazione locale rispetto ad un sistema inerziale. Al fine di misurare la velocità angolare con un giroscopio di questo tipo, viene utilizzata una forza  $F_x$  sinusoidale di ampiezza  $F_d$  e pulsazione  $\omega_d$ . In particolare, viene scelto un valore di  $\omega_d$  sufficientemente elevato in modo che i termini  $x\dot{\theta}^2$ ,  $y\dot{\theta}^2$ ,  $y\ddot{\theta}$  e  $x\ddot{\theta}$  risultino abbastanza piccoli da poter essere trascurati. Le equazioni del moto, perciò, si riducono a:

$$\begin{cases} m\ddot{x} + \eta_x\dot{x} + k_x x = F_x + 2m\dot{y}\dot{\theta} \\ m\ddot{y} + \eta_y\dot{y} + k_y y = F_y - 2m\dot{x}\dot{\theta} \end{cases} \quad (1.1)$$

Quando il giroscopio è sottoposto ad una velocità angolare esterna  $\dot{\theta} = \Omega$ , il termine  $2\Omega\dot{x}$  nella eq. (1.1) causa un'oscillazione della  $y$  alla frequenza  $\omega_d$  con un'ampiezza proporzionale alla velocità angolare  $\Omega$ . Da ciò consegue che dal segnale di uscita  $y$  è possibile ricavare  $\Omega$ .



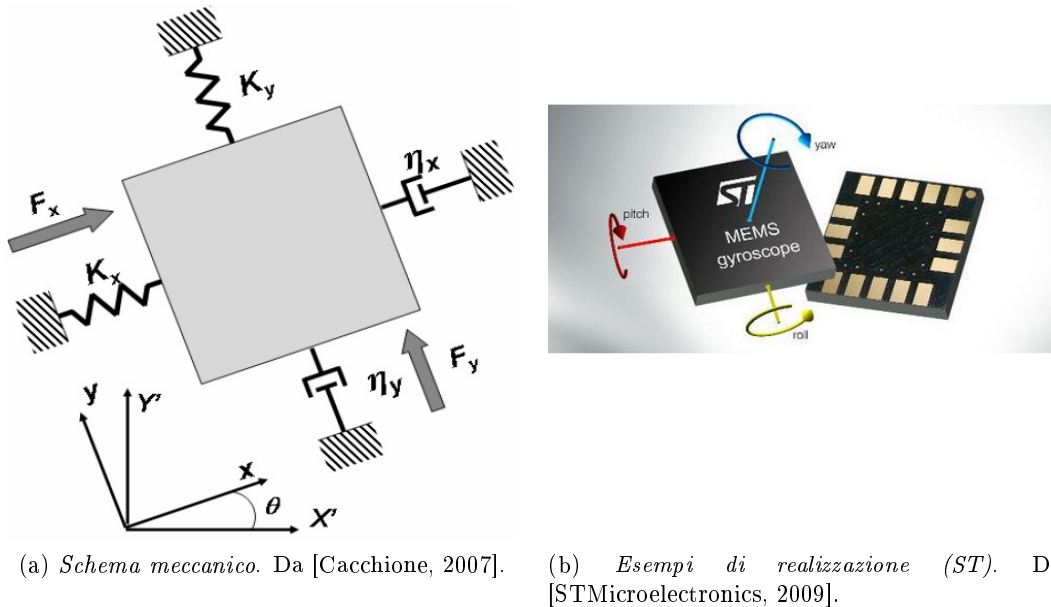


Figura 1.7: Giroscopio MEMS.

Un ostacolo all'utilizzo di questa tecnologia è causato dal fatto che le forze di Coriolis sono molto più piccole della forza che viene applicata in direzione ortogonale. Tuttavia, con delle scelte opportune del sistema, è possibile superare questo inconveniente.

### 1.3.4 Interruttori RF

Gli interruttori a radio-frequenza vengono utilizzati nei sistemi radar e di comunicazione wireless, oltre che in numerose altre applicazioni. Essi offrono benefici significativi rispetto a quelli formati da semiconduttori, in termini di alto isolamento, perdita limitata del segnale su di un più ampio intervallo di frequenze, basso consumo ed eccellenti caratteristiche di linearità. D'altro canto, gli aspetti negativi consistono nei voltaggi relativamente alti e nella bassa velocità di risposta. La Figura 1.8 mostra l'aspetto di un interruttore RF molto comune. Quando la linea di corrente che trasporta il segnale è allo stesso potenziale della membrana metallica, nessuna forza agisce sul sistema e, di conseguenza, l'interruttore è aperto. Se viene applicato un voltaggio alla linea del segnale, insorge una forza elettrostatica che spinge il ponte verso la linea. Se il voltaggio è maggiore di un certo valore di soglia, il ponte collapsa sulla linea determinando un cambiamento dello stato dell'interruttore, che chiude il circuito.

### 1.3.5 MEMS microfluidici

Il contesto meccanico nei MEMS è stato ampliato, a partire dai primi anni novanta, dalla sola fase solida a quella liquida: sono stati cioè sviluppati sistemi microfluidici, utilizzando approcci di fabbricazione simili a quelli dei MEMS tradizionali, che *manipolano* e *interrogano* flussi liquidi e gocce al posto di strutture solide.

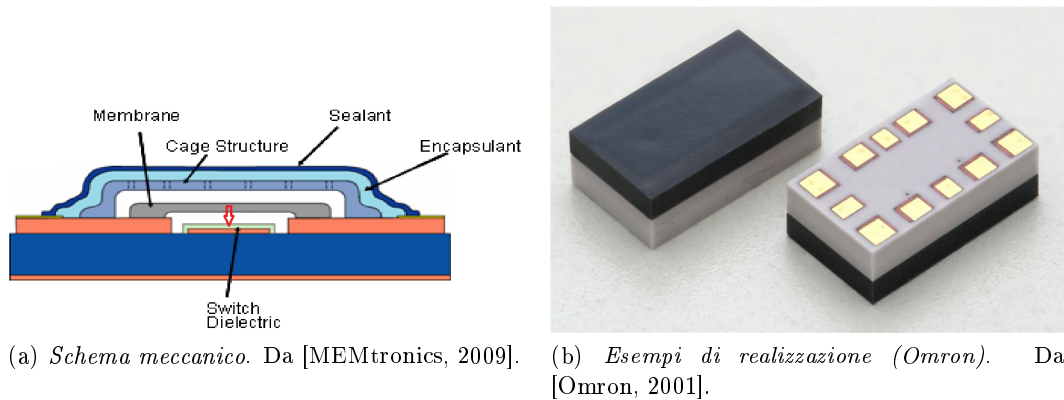


Figura 1.8: Interruttore ad alta frequenza MEMS.

Moderni sviluppi nella loro progettazione e realizzazione hanno trovato oggi molteplici applicazioni: non è obiettivo di questo lavoro darne una panoramica completa ma solo citare alcuni esempi.

- biotecnologie, diagnostica non invasiva e chirurgia. È questa l'area oggi forse più promettente nella ricerca e sviluppo di tali sensori, anche se probabilmente la più difficile a causa dell'interfaccia tra campioni biologici e dispositivi microelettronici i cui collegamenti elettrici devono essere accuratamente isolati e incapsulati.
- processi di chimica industriale
- trasporto di liquidi e gas nell'industria aerospaziale ed automobilistica
- stampa e applicazioni ottiche

#### 1.4 Problemi di adesione spontanea: *stiction failures*

L'adesione spontanea è un fenomeno di grande importanza nell'ambito dei MEMS: essa riveste infatti un ruolo estremamente rilevante sia durante il processo di fabbricazione, sia durante la fase di funzionamento del dispositivo. La parola *stiction* con cui solitamente ci si riferisce alle problematiche che possono insorgere è un neologismo che deriva da *static friction*, con il quale si vuole evidenziare la forte correlazione al mondo della micro e nano tribologia, in quanto l'attrito e l'erosione dei punti di contatto tra due superfici sono fortemente connessi con i fenomeni adesivi che insorgono tra di esse.

Anche se l'adesione spontanea può avvenire a tutte le scale, risulta particolarmente pericolosa nei microdispositivi a causa di alcune loro proprietà quali piccole dimensioni, grandi rapporti tra superficie e volume, piccole forze di richiamo elastico e grande vicinanza tra superfici adiacenti. Il fallimento dovuto alla *stiction*, a seguito del quale la micromacchina può risultare completamente inutilizzabile, può avvenire in differenti situazioni, che possono essere raggruppate in due categorie.

- *process stiction* o *release stiction*. Nell'ambito di studio di questa tesi, ma più in generale in ogni lavoro di ricerca a riguardo, è la situazione che più interessa.

Questo tipo di fallimento si verifica durante l'ultimo passo del processo di microfabbricazione (cfr. Figura 1.2 (e)-(f)) quando, come visto, si rende necessario rimuovere gli strati di ossido di silicio utilizzando una soluzione acida seguita da un lavaggio mediante acqua deionizzata. Durante il processo di essiccazione finale, possono rimanere intrappolati tra i due solidi alcuni ponti di acqua che generano delle forze di adesione a seguito delle quali può verificarsi il collasso della superficie sospesa sul substrato. Il fenomeno è stato oggetto di studio fin dai primi sviluppi dei MEMS e, soprattutto recentemente, sono state proposte delle tecniche di fabbricazione alternative che possano cercare di evitarlo. In particolare può essere utilizzata un'essiccazione detta *supercritical CO<sub>2</sub> drying* che prevede di portare il fluido dallo stato liquido a quello gassoso senza attraversare direttamente l'interfaccia sul diagramma di fase (Figura 1.9) ma seguendo un percorso che passi attraverso la zona supercritica, dove la sostanza ha proprietà intermedie tra le due fasi, in modo da evitare l'insorgere di forze capillari e di tensione superficiale.

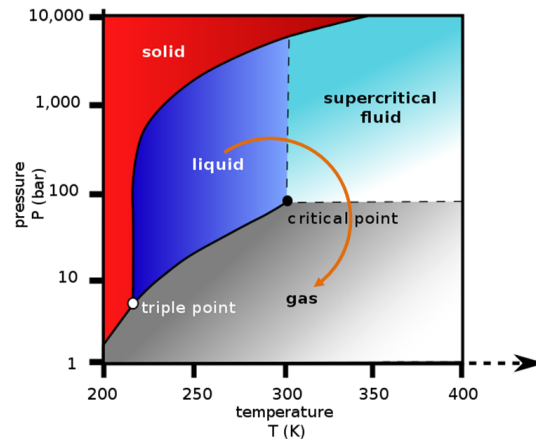


Figura 1.9: Diagramma di fase per il diossido di carbonio. La freccia indica il percorso seguito nella *supercritical CO<sub>2</sub> drying*. Da [Wikipedia, 2011].

- *in-use stiction* o *post-release stiction*, si riferisce all'adesione che si verifica dopo la fase di fabbricazione. Il contatto accidentale tra le superfici può accadere, per esempio, come una conseguenza dell'azione di forze elettrostatiche incontrollate, cadute o impatti del microdispositivo ma anche forze capillari analoghe a quelle descritte in precedenza che possono insorgere a causa della condensazione spontanea di vapore in ambienti umidi. Per la loro natura *aleatoria*, questa tipologia di collassi non può essere del tutto prevista e controllata con un adeguato sviluppo nella progettazione e nelle tecniche di fabbricazione.

Riguardo l'adesione di superfici che compongono i microdispositivi, occorre precisare che essa non è un fenomeno sempre da impedire: come visto, ad esempio, per gli interruttori RF, esistono dei casi in cui essa è richiesta per il corretto funzionamento dell'intera struttura. Tuttavia, anche in queste situazioni, essa riveste un ruolo di grande importanza che giustifica ancora una volta l'interesse della moderna ricerca.

### 1.4.1 Simulazione numerica

Come si avrà modo di ripetere anche nel seguito del lavoro, la dimensione caratteristica dei MEMS oggi prodotti, che si attesta all'ordine della microscala, rende molto complessa ogni tipo di prova sperimentale sui dispositivi, oltre che onerosa non solo dal punto di vista economico. Per questo è largamente impiegata la simulazione numerica, sia dal punto di vista della meccanica computazionale che della meccanica statistica molecolare anche se quest'ultima è ancora rallentata dagli eccessivi oneri computazionali. Oltre a richiedere un'apparecchiatura hardware meno complessa, la simulazione al computer consente una frequente ripetizione dell'esperimento in tempi brevi e una più facile misura delle grandezze fisiche di interesse.

## Capitolo 2

# Fisica dei fenomeni di adesione spontanea

Nello studio dell'attrazione spontanea tra superfici poste tra loro a distanza micro o nanoscopica, diverse sono le forze che possono avere un ruolo significativo. Tra le principali da un punto di vista fisico ci sono le forze di attrazione capillare e quelle di van der Waals: le prime sono dovute alla possibile presenza di menischi d'acqua, la cui formazione può essere conseguenza di una spontanea condensazione capillare in ambiente umido a causa dell'estrema vicinanza tra le superfici, mentre le seconde, di diversa natura, sono dovute all'interazione tra i dipoli indotti tra molecole non polari. Scopo di questo capitolo è dare una panoramica di queste due possibili interazioni presentandone gli aspetti fondamentali da un punto di vista fisico oltre ai primi semplici modelli fino ad ora utilizzati per stimarle: il testo di riferimento è [Israelachvili, 2011] a cui si rimanda per ulteriori approfondimenti.

### 2.1 Energia superficiale e di interfaccia

Verranno ora introdotte le grandezze fisiche principali nello studio delle interazioni appena descritte.

#### 2.1.1 Lavoro di adesione e coesione nel vuoto

Si considera inizialmente la variazione di energia libera, o il lavoro reversibile, necessaria per separare un'area unitaria di due mezzi dalla situazione di contatto a una distanza infinita, nel vuoto (Figura 2.1). Per due mezzi differenti, questa energia viene chiamata lavoro di adesione  $W_{12}$ , mentre per due mezzi identici viene chiamata lavoro di coesione  $W_{11}$ .

Se il mezzo 1 è un solido e il mezzo 2 è un liquido,  $W_{12}$  viene anche indicato con  $W_{SL}$ . Dal momento che i corpi si attraggono tra loro nel vuoto, si ha sempre  $W_{11} > 0$  e  $W_{12} > 0$ .

#### 2.1.2 Energia superficiale e tensione superficiale

Una seconda quantità di interesse è la variazione di energia libera  $\gamma$  che si riscontra quando l'area superficiale di un mezzo viene incrementata di un'unità. Il processo

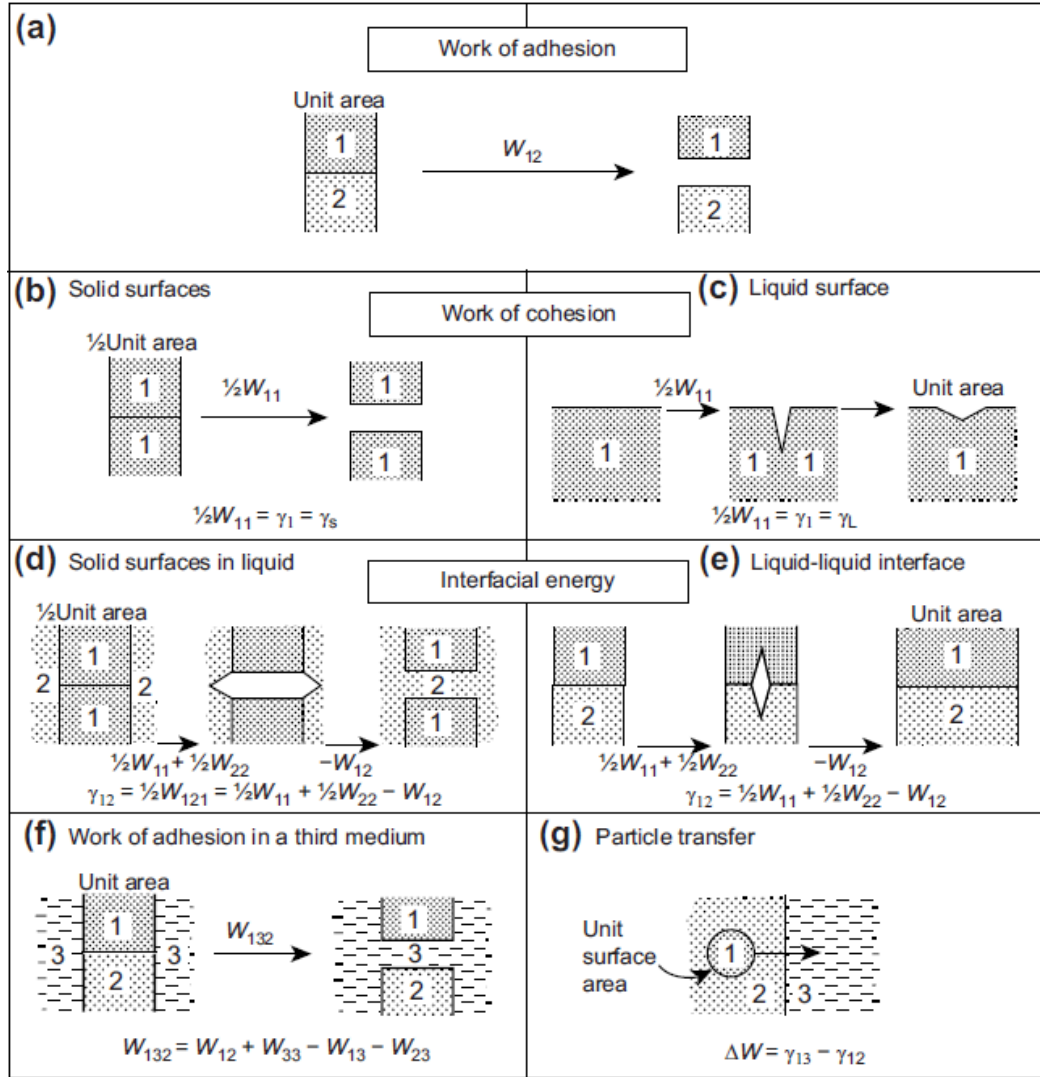


Figura 2.1: Definizione dei termini energetici caratteristici del fenomeno dell'adesione. Da [Israelachvili, 2011].

di creazione di un'area unitaria di superficie è equivalente a quello necessario per separare dal contatto due porzioni di superficie di area pari a 1/2 (Figura 2.1(b),(c)). Si può quindi scrivere:

$$\gamma_1 = \frac{1}{2}W_{11}$$

Per i solidi la quantità  $\gamma_1$  è solitamente chiamata *energia superficiale*, indicata con  $\gamma_S$  ed espressa in termini di energia per unità di area  $\left[\frac{J}{m^2}\right]$ ; per i liquidi, invece, è solitamente chiamata *tensione superficiale*, indicata con  $\gamma_L$  ed espressa in termini di tensione per unità di lunghezza  $\left[\frac{N}{m}\right]$ <sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Si osservi che dalla definizione di  $N$  e  $J$  segue l'equivalenza dimensionale  $\left[\frac{J}{m^2}\right] \equiv \left[\frac{N}{m}\right]$

### 2.1.3 Energia di interfaccia

Quando due liquidi immiscibili sono in contatto, la variazione di energia libera che occorre per espandere la superficie di interfaccia di un'unità di area viene detta *energia di interfaccia* o *tensione di interfaccia*  $\gamma_{12}$ . L'energia associata a questo processo di espansione può essere considerata come dovuta a due ipotetici passi (Figura 2.1(e)): prima vengono create due aree unitarie dei liquidi per poi essere messe in contatto. La variazione totale di energia libera  $\gamma_{12}$  risulta dunque essere espressa dalla seguente *Equazione di Duprè*:

$$\gamma_{12} = \frac{1}{2}W_{11} + \frac{1}{2}W_{22} - W_{12} = \gamma_1 + \gamma_2 - W_{12} \quad (2.1)$$

Come mostrato in Figura 2.1(d) quest'energia è formalmente equivalente a quella spesa per separare due mezzi di tipo 1 in un mezzo 2 ( $W_{121}$ ) o, analogamente, due mezzi di tipo 2 in un mezzo 1 ( $W_{212}$ ). Per questo si può anche scrivere:

$$\gamma_{12} = \frac{1}{2}W_{121} = \frac{1}{2}W_{212}$$

Per un'interfaccia solido-liquido la quantità  $\gamma_{12}$  viene comunemente indicata con  $\gamma_{SL}$ . La eq. (2.1) può quindi essere scritta come:

$$\gamma_{SL} = \gamma_S + \gamma_L - W_{SL}$$

### 2.1.4 Lavoro di adesione in un terzo mezzo

La variazione di energia che occorre per separare due mezzi 1 e 2 in un terzo mezzo 3 (Figura 2.1(f)) è data da:

$$W_{132} = W_{12} + W_{33} - W_{13} - W_{23} = \gamma_{13} + \gamma_{23} - \gamma_{12} \quad (2.2)$$

Si osservi che  $W_{132}$  può essere positiva (corrispondente ad un'attrazione tra i mezzi 1 e 2) o negativa (corrispondente ad una repulsione). Se il terzo mezzo è il vuoto, allora  $W_{132} \rightarrow W_{12}$ ,  $\gamma_{13} \rightarrow \gamma_1$ ,  $\gamma_{23} \rightarrow \gamma_2$  e la eq. (2.2) si riconduce alla eq. (2.1).

### 2.1.5 Energia superficiale di trasferimento

Quando una particella macroscopica 1 si muove da un mezzo 2 ad un mezzo 3 (Figura 2.1(g)) la variazione di energia per unità di area della superficie della particella è data da:

$$\Delta W = \left( W_{12} - \frac{1}{2}W_{22} \right) - \left( W_{13} - \frac{1}{2}W_{33} \right) = \gamma_{13} - \gamma_{12}$$

dove  $\left( W_{12} - \frac{1}{2}W_{22} \right)$  è l'energia richiesta per separare prima un'area unitaria dei mezzi 1 e 2, e per porre poi in contatto la nuova superficie libera del mezzo 2, mentre  $\left( W_{13} - \frac{1}{2}W_{33} \right)$  è l'operazione inversa per il mezzo 1 con il mezzo 3.

## 2.2 Angoli di contatto

L'energia superficiale e di interfaccia è anche responsabile della forma che una goccia di liquido assume quando adagiata su un piano. Si consideri una grande goccia di un liquido 2, inizialmente sferica, in un mezzo 3, che si avvicina e poi si adagia su una superficie piatta di materiale 1 (Figura 2.2(a), in alto). L'energia totale del sistema

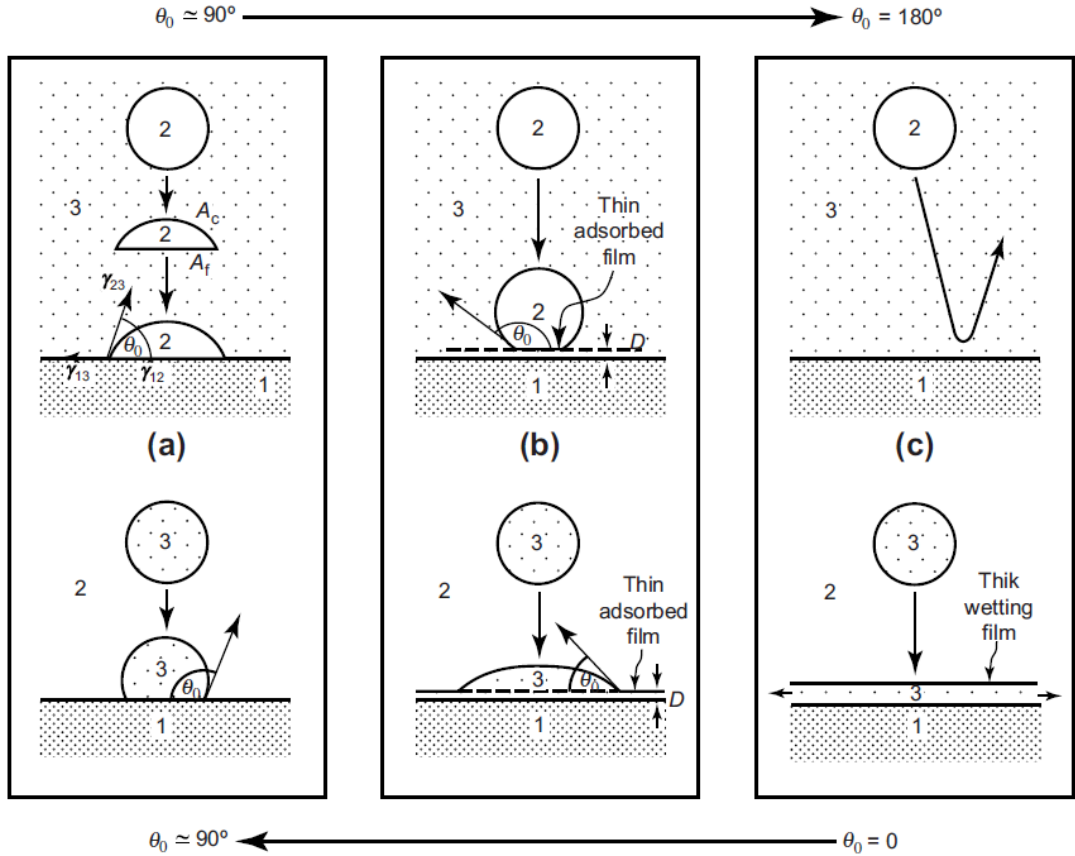


Figura 2.2: Angoli di contatto. Da [Israelachvili, 2011].

risulta essere:

$$W_{tot} = \underbrace{\gamma_{23}(A_c + A_f)}_{(I)} - \underbrace{W_{132}A_f}_{(II)}$$

dove  $A_c$  e  $A_f$  sono rispettivamente la porzione curva e quella piatta della goccia. Il termine  $(I)$  rappresenta l'energia dovuta al cambio di forma della goccia nel mezzo 3, mentre  $(II)$  è il contributo dovuto al lavoro di adesione. Considerando variazioni infinitesime di superficie  $dA_c$  e  $dA_f$ , all'equilibrio si ha che:

$$\gamma_{23}(dA_c + dA_f) - W_{132}dA_f = 0 \quad (2.3)$$

Per una goccia con volume costante si può dimostrare, per mezzo di considerazioni geometriche, che:

$$\frac{dA_c}{dA_f} = \cos \theta$$



dove  $\theta$  è l'*angolo di contatto* tra la goccia e la superficie piatta. Supponendo che tale equilibrio sia raggiunto per  $\theta = \theta_0$  si può riscrivere la eq. (2.3) come

$$\gamma_{23}(1 + \cos \theta_0) = W_{132} \quad (2.4)$$

che, tenuto conto della eq. (2.2), equivale a

$$\gamma_{12} + \gamma_{23} \cos \theta_0 = \gamma_{13} \quad (2.5)$$

Tale relazione si può anche ricavare da un bilancio delle tensioni di interfaccia nel piano della superficie.

Supponiamo ora che i materiali 2 e 3 siano scambiati (Figura 2.2(a), sotto). L'analogia della eq. (2.4) è

$$\gamma_{23}(1 + \cos \hat{\theta}_0) = W_{123} = \gamma_{12} + \gamma_{23} - \gamma_{13}$$

da cui si ottiene,

$$\gamma_{12} - \gamma_{23} \cos \hat{\theta}_0 = \gamma_{13}$$

che equivale alla eq. (2.5) dove si è posto  $\theta_0 = \pi - \hat{\theta}_0$ . Dunque, l'angolo di contatto rappresentato in Figura 2.2(a, sotto) è pari a  $\pi - \theta_0$ , dove  $\theta_0$  è l'angolo in Figura 2.2(a, sopra). I risultati sopra riportati sono stati ottenuti nel caso specifico di una goccia di forma sferica su di una superficie piatta. Tuttavia, l'angolo di contatto è indipendente dalla geometria ([Adamson e Gast, 1997, cp. 7]). Dunque, l'angolo di contatto  $\theta_0$  è lo stesso per superfici curve, dentro un capillare o per ogni punto di una qualsiasi superficie di forma irregolare.

Se il mezzo 3 è un'atmosfera inerte, allora le equazioni (2.4) e (2.5) diventano rispettivamente l'equazione di *Young-Duprè*

$$\gamma_2(1 + \cos \theta_0) = W_{12} \quad (2.6)$$

e l'*equazione di Young*

$$\gamma_{12} + \gamma_2 \cos \theta_0 = \gamma_1 \quad (2.7)$$

Nel caso in cui il mezzo 3 sia un liquido, può capitare che l'equilibrio si ottenga ad una certa distanza  $D$  dalla superficie (Figura 2.2(b), sopra). In questo caso l'angolo di contatto è generalmente molto piccolo. Una situazione analoga si presenta quando la goccia di liquido giunge a contatto con una superficie ricoperta da un sottile strato dello stesso liquido (Figura 2.2(b), sotto). Qualitativamente, in questo caso si può affermare che si forma un angolo di contatto piccolo in quanto il liquido che ricopre la superficie è lo stesso di quello che forma la goccia. Infine, se l'interazione tra la goccia 2 e la superficie 1 nel mezzo 3 è repulsiva, la goccia di liquido viene respinta dalla superficie (Figura 2.2(c), sopra) e si ha  $W_{132} = 0$ .

L'angolo di contatto, che può essere misurato durante gli esperimenti, viene utilizzato per valutare l'energia di interfaccia, dopo che la tensione superficiale del liquido e l'energia superficiale del solido sono state misurate indipendentemente. Ciò riveste grande importanza nella simulazione del comportamento adesivo delle superfici umide: se si genera un menisco d'acqua caratterizzato da angoli di contatto minori di  $\frac{\pi}{2}$  allora insorge una forza attrattiva tra esse.

### 2.2.1 Variabilità dell'angolo di contatto

Nel seguito della tesi l'angolo di contatto verrà sempre considerato come una proprietà dipendente dalla composizione dell'interfaccia liquido - solida: essendo infatti una grandezza termodinamica, esso dovrebbe essere univocamente definito. In realtà, oltre alle difficoltà legate alla misura di tale quantità, anche solo per alcuni casi test che possano essere presi come benchmark, occorre considerare che l'angolo di contatto può subire delle variazioni che non dipendono necessariamente dalle sostanze interessate.

Fino a questo momento si è implicitamente assunto che tutte le superfici considerate fossero fisicamente e chimicamente omogenee. Nella realtà, tuttavia, questa ipotesi può essere fortemente disattesa e comportare di conseguenza delle modifiche negli angoli di contatto che si avrebbero nella situazione ideale: si vuole nel seguito analizzare separatamente il contributo delle due possibili disomogeneità.

#### Effetto dell'eterogeneità chimica

La Figura 2.3(a) mostra una superficie liscia caratterizzata da una composizione chimica differente (1 e 2) e come essa comporti in due gocce dello stesso liquido un differente angolo di contatto. Se si considerasse però una goccia con il profilo posizionato all'interfaccia tra le due sostanze, determinare l'angolo di contatto in  $P$  diventerebbe impossibile in quanto esso non è univocamente definito nell'intervallo  $[\theta_1, \theta_2]$ . Per meglio comprendere questo fenomeno, tenendo conto che a livello molecolare l'interfaccia non è definita da una linea retta ideale, si supponga che la linea in  $P$  abbia uno spessore finito dove la composizione chimica della superficie vari con continuità da 2 a 1; sia poi  $f_i$  la frazione locale (espressa in termini di densità superficiale) di componenti 1 e 2 nella regione di transizione, con  $f_1 + f_2 = 1$ . Ponendo  $\gamma_L(1 + \cos \theta_1) = W_{1L} = \sqrt{W_1 W_L}$  e  $\gamma_L(1 + \cos \theta_2) = W_{2L} = \sqrt{W_2 W_L}$ , l'equivalente della eq. (2.6) nella regione di transizione diventa

$$\gamma_L(1 + \cos \theta) \approx \sqrt{(f_1 W_1 + f_2 W_2) W_L} = \sqrt{f_1 W_1 W_L + f_2 W_2 W_L}$$

Elevando al quadrato entrambi i termini si ha

$$\gamma_L^2(1 + \cos \theta)^2 = f_1 W_1 W_L + f_2 W_2 W_L$$

da cui, poichè  $W_i W_L = \gamma_L^2(1 + \cos \theta_i)^2$  per  $i = 1, 2$ , si ricava la seguente relazione generale per l'angolo di contatto  $\theta$  su superfici chimicamente eterogenee

$$(1 + \cos \theta)^2 = f_1(1 + \cos \theta_1)^2 + f_2(1 + \cos \theta_2)^2$$

La non univocità dell'angolo di contatto, come vedremo, sarà anche una causa dell'isteresi dell'angolo di contatto e di conseguenza della forza capillare.

#### Effetto della rugosità

La Figura 2.3(b) si riferisce all'effetto che un'irregolarità della superficie può avere sull'angolo di contatto. Rispetto a quella di un piano ideale, infatti, l'area dell'interfaccia effettiva tra il solido ed il liquido è diversa da quella *proiettata* definita dal

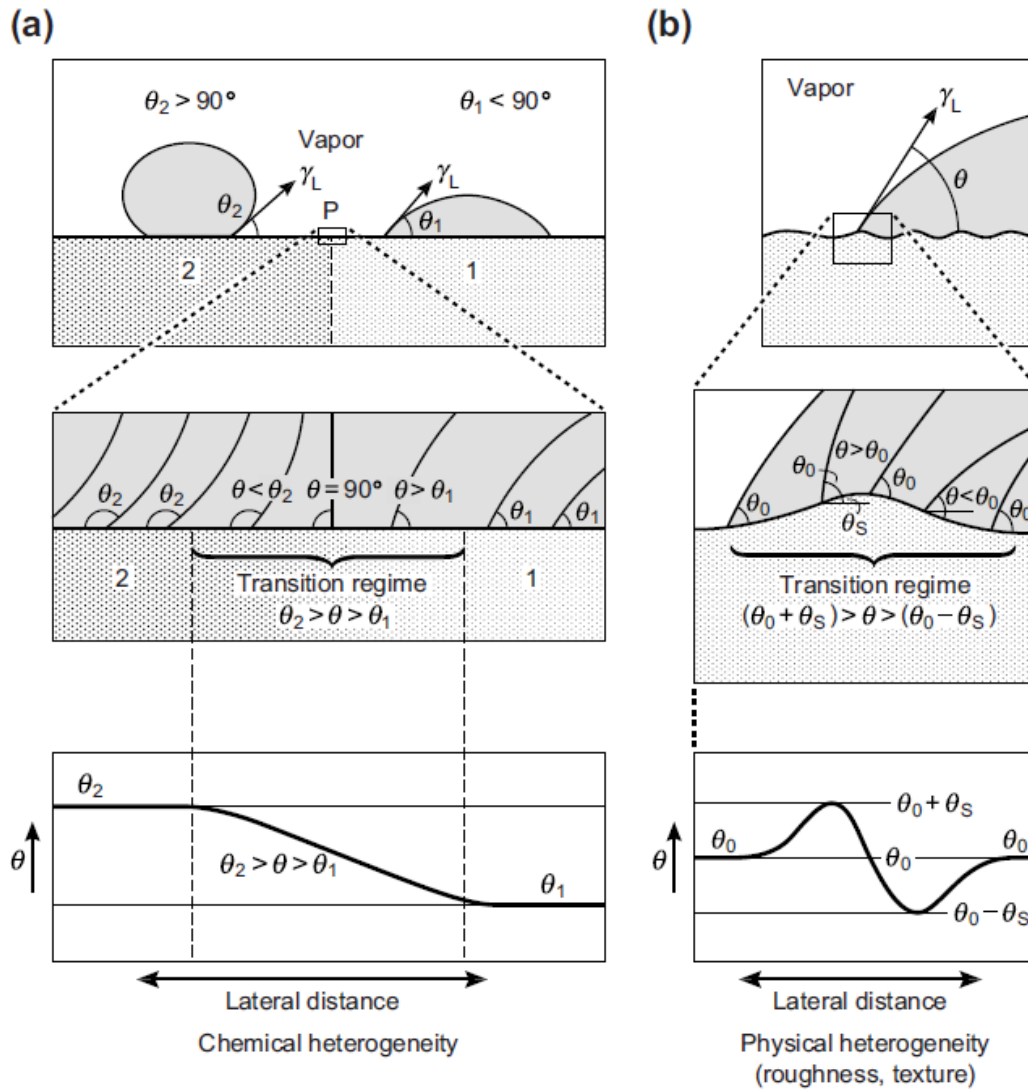


Figura 2.3: Effetto delle disomogeneità chimiche e fisiche di una superficie sull'angolo di contatto. Da [Israelachvili, 2011].

solo profilo di contatto. Per tener conto di questo effetto si può formulare la seguente variante della eq. (2.6):

$$\gamma_L(1 + \cos \theta) = \phi W_{SL}$$

da cui si ricava

$$(1 + \cos \theta) = \phi(1 + \cos \theta_0) \quad (2.8)$$

dove  $W_{SL}$  e  $\theta_0$  sono i valori relativi alla superficie idealmente liscia mentre il parametro  $\phi$ , noto come rapporto di rugosità, è dato dal rapporto tra l'area superficiale effettiva e la proiezione della stessa sul piano. Il risultato ottenuto può essere confrontato con l'equazione di Wenzel [Wenzel, 1949]

$$\cos \theta_{Wz} = \phi(\cos \theta_0)$$

un precedente tentativo di tenere in considerazione l'effetto descritto, che però mostra un limite fisico nel caso di angoli di contatto  $\theta = 90^\circ$  dove l'effetto della rugosità viene annullato.

All'apparente semplicità della eq. (2.8) si contrappone la difficoltà tecnica di determinare il rapporto di rugosità, un valore di equilibrio teorico che è difficile da misurare a causa della non idealità delle superfici stesse.

### 2.2.2 Isteresi dell'angolo di contatto

Anche per superfici omogenee si osserva spesso come l'angolo di contatto non sia sempre univocamente determinato: in corrispondenza dell'aumento di area dell'interfaccia liquido-solido, infatti, l'angolo di contatto può crescere fino ad un valore  $\theta_a$  (advancing contact angle), per diminuire invece a  $\theta_r$  (receding contact angle) quando l'area si restringe. Il fenomeno è noto in letteratura come isteresi dell'angolo di contatto e uno dei lavori a riguardo che può essere preso a riferimento è [de Gennes, 1985]. Le cause di questo fenomeno possono essere molteplici, e due di queste sono appena state descritte (Figura 2.3); la Figura 2.4 mostra altre due situazioni analoghe che possono causare l'isteresi, ovvero il cambiamento della natura fisica e chimica di una superficie una volta che questa è venuta a contatto con un liquido o con un altro materiale. In Figura 2.4(c) si propone un esempio relativo al fatto che l'orientazione dei gruppi chimici che compongono la superficie, dipendendo spesso dalla fase a cui essi sono esposti, possa dare origine a dei raggruppamenti molecolari con differente energia di adesione e angolo di contatto per l'interfaccia *anteriore* e *posteriore* di una goccia in movimento. La Figura 2.4(d) si riferisce invece al caso di una disomogeneità fisica causata da un contatto tra i due corpi: la diffusione e l'agitazione a livello molecolare, specialmente per polimeri e materiali viscoelastici, può causare differenti energie di adesione tra il processo di avvicinamento e quello di allontanamento dopo il contatto. I due riquadri enfatizzano come questa differenza sia causata da un differente profilo superficiale che, se perfettamente liscio quando i due corpi sono distanti, può diventare molto irregolare nella situazione di contatto.

Occorre infine precisare come non sia spesso semplice stabilire con certezza quale tra le possibili descritte, sia l'effettiva causa dell'isteresi.

L'intervallo  $[\theta_r, \theta_a]$  può essere, in generale, molto ampio, anche più di  $90^\circ$  ed è difficile stabilire il valore esatto dell'angolo all'equilibrio di un processo che non è termodinamicamente reversibile. In generale, dunque, solo nel caso di una superficie perfettamente liscia, omogenea, infinitamente rigida e chimicamente inerte si può avere la speranza di cogliere il valore esatto dell'angolo di contatto.

## 2.3 Considerazioni sulla stima dell'adesione

Quando si vuole indagare la forza di attrazione tra due superfici, qualunque sia la natura fisica che la determina, va tenuto conto che alle scale microscopiche tipiche dei MEMS, non esiste un metodo di fabbricazione in grado di produrre delle superfici perfettamente lisce. Per questo motivo, qualora si sia in grado di ricavare delle formule di predizione dell'intensità della forza supponendo che l'interazione sia tra due piani lisci perfettamente paralleli occorre considerare che i valori predetti potrebbero essere fortemente disattesi a causa della mancata validità dell'ipotesi geometrica assunta.

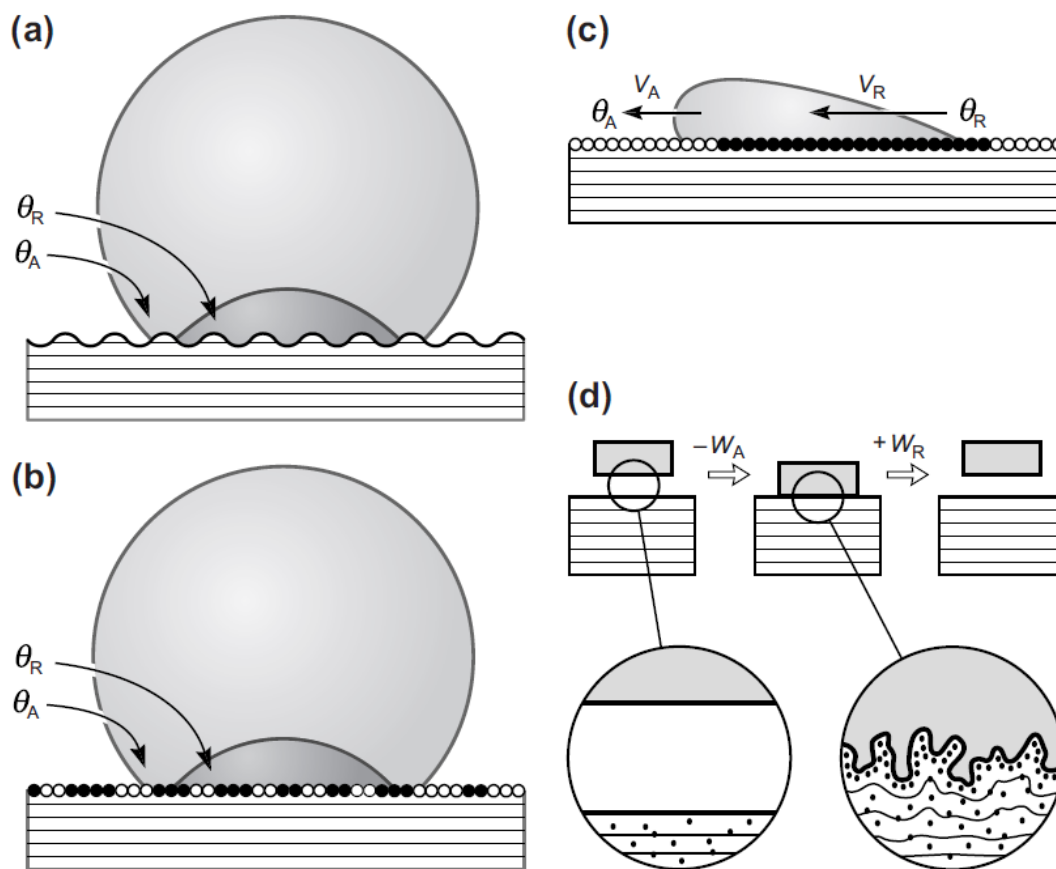


Figura 2.4: Isteresi dell'angolo di contatto. Da [Israelachvili, 2011]. (a) Effetto della rugosità. Una goccia di liquido su una superficie rugosa, caratterizzata da un angolo di contatto microscopico ovunque di  $90^\circ$  ma con un valori misurati  $\theta_a$  e  $\theta_r$  molto diversi tra loro. (b) Effetto della composizione chimica eterogenea. (c) Raggruppamenti molecolari, con diversa energia di adesione e angolo di contatto, dovuti alla differente fase a cui la superficie è esposta. (d) Effetto della disomogeneità fisica causata dal contatto tra due corpi.

Gli approcci nel cercare di ricavare modelli predittivi possono essere, schematizzando, di due tipi. Da un lato l'obiettivo può essere quello di trovare una distribuzione di pressione indotta dalla forza che, integrata sulla superficie su cui viene definita, consenta di trovare la risultante totale; in alternativa si può supporre che le microasperità che caratterizzano le superfici abbiano una forma geometrica riconducibile in buona approssimazione ad enti geometrici elementari (sfere, ellissoidi,...) per i quali si possa sviluppare un modello specifico tenendo conto delle geometrie e delle proprietà di cui essi godono per poi applicarlo a tutte le asperità che caratterizzano i due corpi in esame. Come si avrà modo di apprezzare nel seguito del lavoro, se il primo approccio ha il vantaggio di prescindere dalla morfologia della rugosità ma richiede un'approssimazione molto semplicistica in termini della pressione assegnata, il secondo consente una modellizzazione della forza più *raffinata* ma è limitato dalla possibilità di trovare una geometria semplificata sufficientemente rappresentativa della rugosità reale.

## 2.4 Effetto della condensazione capillare sull'adesione

Come accennato precedentemente, la valutazione dell'energia superficiale di interfaccia tra solido e liquido è importante anche in assenza di acqua allo stato liquido: infatti, le strutture microscopiche sono molto sensibili alla presenza di quantità, anche piccole, di vapore nell'atmosfera. L'energia di adesione, in questi casi, è fortemente influenzata dalla condensazione capillare del vapore attorno ai punti di contatto (fori, crepe o asperità) dalla quale si generano menischi d'acqua (in inglese, *liquid bridge*) (Figura 2.5). Diversi studi, sia di carattere sperimentale che teorico, si sono concentrati sulla descrizione geometrica di tali menischi, sulla dinamica della loro formazione e rottura, per descrivere in modo sempre più dettagliato come essi influenzano la forza di attrazione tra i corpi tra cui essi si formano.

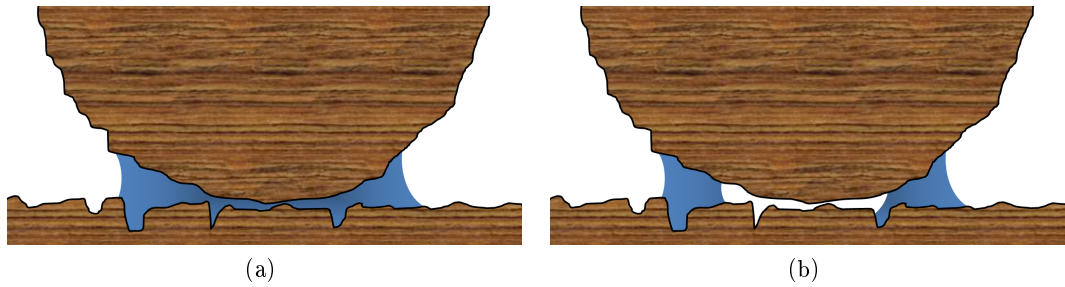


Figura 2.5: I fluidi che presentano piccoli angoli di contatto con una superficie possono spontaneamente condensare da vapore in liquido all'interno dei pori o delle microfessure, dando origine a menischi d'acqua.

### Equazione di Kelvin e stima dell'adesione per geometrie semplici

Si consideri ora il caso ideale di una sfera macroscopica inizialmente a contatto su di una superficie piatta (Figura 2.6(a)). Siano  $r_1$  e  $r_2$  i raggi di curvatura principali della superficie del menisco definiti in Figura 2.7. All'equilibrio, la curvatura media  $H$ , definita da

$$H = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)$$

è legata alla pressione di vapore relativa (per l'acqua, all'umidità relativa)  $RH$  dalla *equazione di Kelvin* [Adamson e Gast, 1997]:

$$\left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)^{-1} = r_k = \frac{\gamma_L V}{RT \log(RH)} \quad (2.9)$$

dove  $r_k$  viene detto raggio di Kelvin,  $V$  è il volume molare del liquido,  $R$  la costante dei gas perfetti,  $T$  la temperatura assoluta e  $\gamma_L$  la tensione superficiale del liquido. La eq. (2.9) è valida, a rigore, solo nel caso di volume molare costante e nell'ipotesi di gas perfetto.

Per indagare l'effetto quantitativo della condensazione alla forza di adesione, si considera ora la pressione di Laplace all'interno del fluido, definita dall'*equazione di Young-Laplace* seguente:

$$P = \gamma_L \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \stackrel{(*)}{\approx} \frac{\gamma_L}{r_1} \quad (2.10)$$

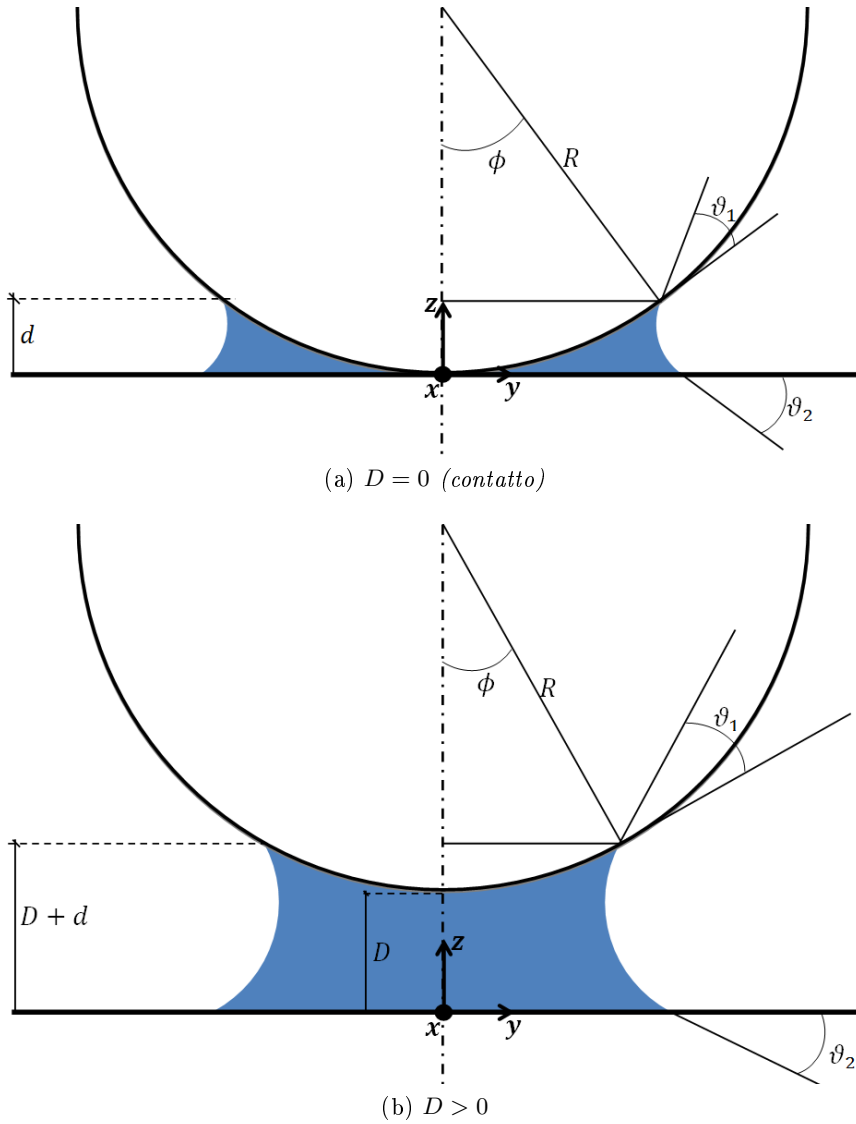


Figura 2.6: Schema di un menisco tra una sfera e una superficie piatta.

dove l'approssimazione (\*) è valida solo se  $r_2 \gg r_1$  ipotesi che, in alcune circostanze, risulta essere ragionevole. La eq. (2.10) si dimostra ipotizzando che la superficie di interfaccia sia in equilibrio meccanico [Adamson e Gast, 1997]. La pressione di Laplace che, dalla definizione dei raggi di curvatura risulta negativa per i menischi concavi di interesse, agisce su di un'area tra le due superfici pari a

$$A = \pi(R^2 - (R - d)^2) = \pi(2Rd - d^2) \underset{d \ll R}{\approx} 2\pi R d$$

e genera quindi una forza che attira le due superfici una verso l'altra di intensità

$$F = PA = 2\pi R d \frac{\gamma L}{r_1}$$

Per piccoli angoli  $\phi$ , si può porre  $d \approx 2r_1 \cos \theta$  (supponendo angoli di contatto uguali) e l'area sulla quale agisce la pressione di Laplace diventa perciò  $A \approx 4\pi R r_1 \cos \theta$ .

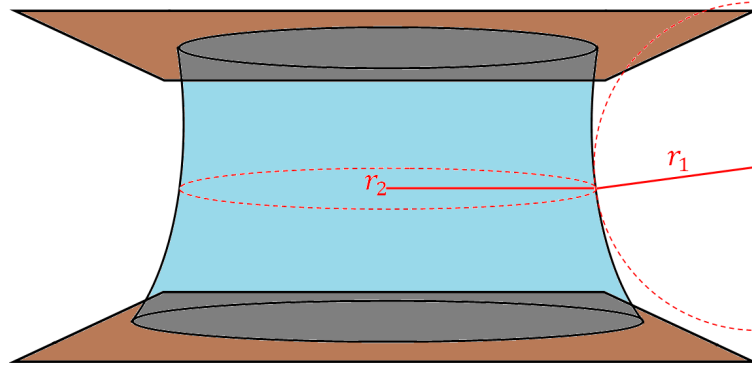


Figura 2.7: Raggi di curvatura principali per un comune menisco tridimensionale di forma concava, ossia caratterizzato da angoli di contatto inferiori a  $90^\circ$ . I due centri di curvatura si trovano da parti opposte rispetto alla normale alla *superficie* che definisce il menisco e per questo i due raggi sono discordi. Concordemente alla eq. (2.9), poiché in generale si avrà  $|r_2| > |r_1|$ , attribuiremo valore positivo ad  $r_2$  e valore negativo a  $r_1$ .

Di conseguenza, il contributo alla forza di adesione dovuto alla pressione di Laplace risulta essere pari a:

$$F_{cp} = 4\pi R\gamma_L \cos \theta \quad (2.11)$$

La forza di adesione è influenzata anche dal contributo dato dalla tensione superficiale lungo la linea di contatto tra il menisco e le superfici rigide, che tuttavia in prima approssimazione è sempre trascurabile rispetto al termine dovuto alla pressione di Laplace, tranne che per angoli  $\theta \approx \frac{\pi}{2}$  che comportano  $\cos \theta \approx 0$ .

Si può dimostrare inoltre che l'energia di adesione per unità di area risulta essere pari a  $2\gamma_L$ . Considerando che la pressione di Laplace agisce su di una area approssimativamente di  $A \approx 4\pi r_k R \cos \theta$  risulta che l'energia totale vale  $W_{tot} \approx 8\pi\gamma_L r_k R \cos \theta$ .

Si consideri ora il caso in cui la sfera e la superficie piatta siano poste ad una distanza tra loro pari a  $D$  (Figura 2.6(b)). Considerando come l'energia superficiale totale del sistema cambi al variare della distanza di separazione, per valori dell'angolo  $\phi$  piccoli si può dimostrare che

$$F_{cp} = \frac{4\pi R\gamma_L \cos \theta}{1 + \frac{D}{d}} \quad (2.12)$$

Si osservi che la forza massima si ha per  $D = 0$ , valore per cui si ritrova la eq. (2.11). L'approccio dunque più semplificato, e di fatto il più utilizzato oggi per stimare la forza di attrazione al variare della distanza di separazione, è quello di considerare la forza pari al valore determinato dalla eq. (2.12) fino a che non viene raggiunta una distanza critica di separazione tra sfera e superficie, dopo la quale la forza viene istantaneamente posta a zero. La determinazione della distanza critica si calcola facilmente per mezzo di considerazioni geometriche nel caso in cui le superfici a contatto possano essere considerate con buona approssimazione piatte ( $R \gg r_k$ ). In questo caso una buona stima di tale distanza è  $D_{lim} = 2r_k \cos \theta$  (Figura 2.8). Dalle equazioni riportate in precedenza risulta infine evidente che l'energia di adesione e le forze



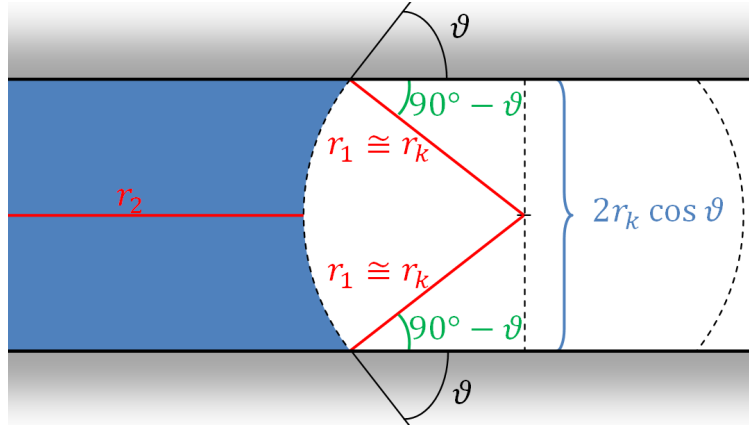


Figura 2.8: Definizione della distanza di *cut-off* per il modello di predizione della forza capillare a partire dal caso di un menisco tra due superfici piane, con angoli di contatto  $\theta$  uguali e in ipotesi  $r_2 \gg r_1$ : il profilo verticale del menisco è un arco di cerchio di raggio  $r_1 \approx r_k$ .

superficiali aumentano al crescere del raggio di Kelvin la cui lunghezza dipende, a sua volta, dall'umidità relativa (Figura 2.9(a)), in accordo con la eq. (2.9). Si osservi, inoltre, che  $r_k$  varia anche in funzione dalla temperatura assoluta (Figura 2.9(b)) che influenza la tensione superficiale dell'acqua, secondo la relazione seguente:

$$\gamma_L = 121.2 \cdot 10^{-3} \frac{J}{m^2} - 0.167 \cdot 10^{-3} \frac{J}{m^2 K} T$$

### Stima dell'adesione per superfici generiche

Nella condizione più realistica dove la geometria tra le due superfici tra cui si prevede possa formarsi un menisco non sia facilmente riconducibile ad una sfera o ad una superficie piana si può utilizzare il modello predittivo più semplificato presentato in [Israelachvili, 2011] di cui, peraltro, l'approssimazione per il caso di sfera su un piano vista in precedenza costituisce un caso particolare.

Per predire la forza di attrazione capillare si analizzano così *punto per punto* le due superfici poste in prossimità tra loro: se la distanza tra due punti corrispondenti, uno appartenente alla superficie inferiore l'altro a quella superiore, è minore di una certa quantità fissata  $d_{cut} = 2r_k \cos \theta$  allora a quella coppia di punti viene *assegnata* la pressione di Laplace  $P = \frac{\gamma_L}{r_k}$ , mentre in caso contrario si pone  $P = 0$ . Sinteticamente:

$$P(i, j) = \begin{cases} \frac{\gamma}{r_k} & \text{se } z_U(i, j) - z_L(i, j) < 2r_k \cos \theta \\ 0 & \text{se } z_U(i, j) - z_L(i, j) > 2r_k \cos \theta \end{cases} \quad (2.13)$$

con  $r_k$  raggio di Kelvin ricavato dalla sola espressione termodinamica (senza considerare i raggi di curvatura del menisco),  $\theta$  angolo di contatto,  $z_{U/L}$  altezze dei punti delle superfici superiore e inferiore,  $i$  e  $j$  indici nelle due direzioni del piano  $xy$ .

Al termine della procedura, per ottenere la forza capillare, si integra la distribuzione

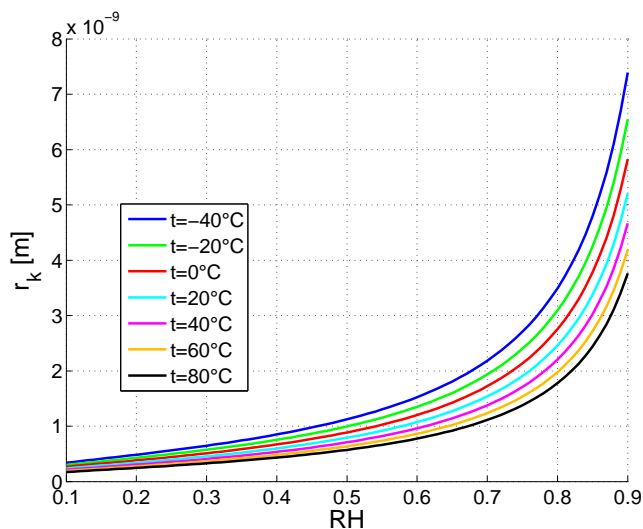
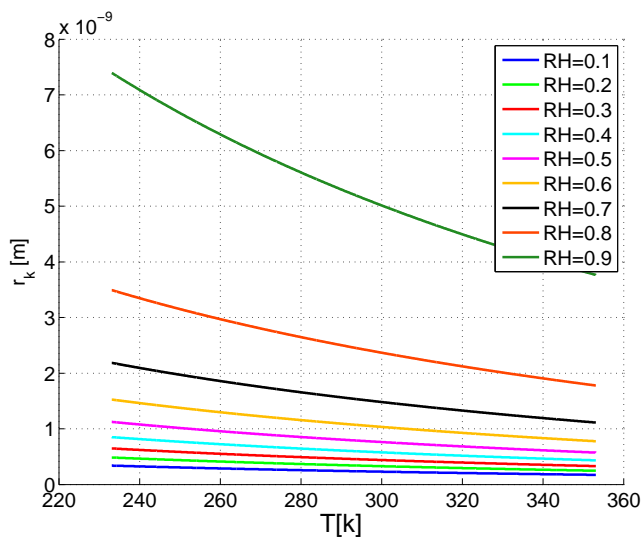
(a) *Al variare di RH.*(b) *Al variare di T.*

Figura 2.9: Dipendenza del raggio di Kelvin da: (a) umidità relativa, (b) temperatura.

di pressione assegnata sull'intera superficie moltiplicando, di fatto, la pressione di Laplace per una stima dell'area equivalente che compete a quei punti tra i quali è stata individuata una pressione non nulla.

L'intento ultimo sarà quello di confrontare la capacità predittiva di modelli complessi vincolati ad asperità geometriche regolari con quella di un modello più semplice ma adatto a poter essere utilizzato su superfici rugose realistiche.

## 2.5 Attuatore a forza capillare

Nel resto della tesi, come nella maggior parte degli studi riguardanti fino ad oggi la forza capillare, questa viene considerata come una delle possibili cause che possono portare ad un mancato funzionamento delle micromacchine e, di conseguenza, l'intento è quello di limitarla il più possibile. In tempi recenti, tuttavia, si stanno sviluppando alcune applicazioni dove la forza capillare sta alla base del principio di funzionamento. Scopo di questa sezione è quello di esporre brevemente una di queste applicazioni, l'attuatore a forza capillare, un'invenzione presentata in [Eleftheriou e Moheimani, 2011, cp. 12].

### 2.5.1 Introduzione

Fino ad oggi sono stati utilizzati una varietà di sistemi attuatori, sia per muovere delle microstrutture che per indurre uno stato di sforzo voluto in una struttura stazionaria, come quelli elettromagnetici, elettrostatici, pneumatici, termici, piezoelettrici, magnetostrittivi e tanti altri. Ognuno di essi è caratterizzato da vantaggi e svantaggi, oltre che da un *trade-off* in termini di performance quali capacità della forza, spostamento totale, banda di attuazione e facilità di costruzione e assemblaggio.

Gli attuatori a forza capillare costituiscono una nuova tecnologia, con ambito applicativo alle microscale, basata sull'utilizzo di un potenziale elettrico che induce un cambiamento nella pressione capillare: questi dispositivi, infatti, utilizzano la forza da cui prendono il nome, generata da un menisco d'acqua che si forma tra due superfici piane costituite da due elettrodi, ciascuno dei quali è ricoperto da un sottile strato di dielettrico (Figura 2.10). Il campo elettrico indotto causa un cambiamento nell'angolo di contatto e, di conseguenza, nel segno della pressione capillare del menisco: tra i due piani si instaura così una forza di tipo attrattivo.

Questo nuovo tipo di attuatore presenta una serie di potenziali vantaggi rispetto alle più comuni tecnologie sopra citate:

- con il livello di voltaggio tipico dei circuiti integrati è in grado di sviluppare una forza 10-100 volte maggiore di un attuatore elettrostatico di pari dimensione;
- ha un consumo energetico molto inferiore rispetto agli attuatori termici di pari capacità;
- dal punto di vista del movimento consentito, esso è maggiore di quello che tipicamente si può ottenere con attuatori elettrostatici e piezoelettrici;
- può essere facilmente in grado di produrre forze *fuori piano* come quelle che richiedono molte applicazioni ottiche e microfluidiche (si pensi, ad esempio, alla forza necessaria ad attuare l'iniezione di un liquido attraverso una micropompa) e che con i dispositivi oggi disponibili sono difficili da ottenere;
- è soggetto ad un'usura meccanica molto inferiore rispetto ad altri attuatori ed è caratterizzato da una stabilità maggiore anche quando lo spostamento consentito diventa molto ampio.

Per le principali caratteristiche appena descritte questo nuovo dispositivo può trovare una grande varietà di impiego in diverse applicazioni, alcune delle quali dettagliatamente descritte in [Eleftheriou e Moheimani, 2011, cp. 12].

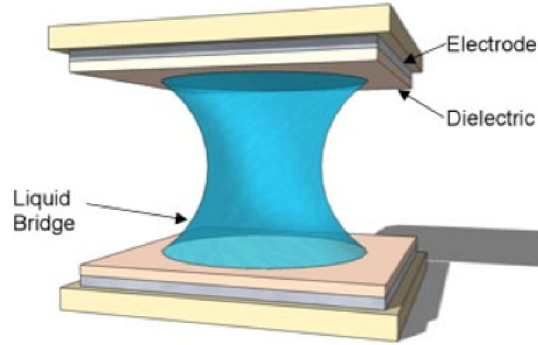


Figura 2.10: Configurazione standard di un attuatore a forza capillare. Per migliorare la rappresentazione, le dimensioni non sono in scala in quanto solitamente l'altezza del menisco è molto maggiore del suo raggio di base. Il piatto inferiore è considerato fisso mentre quello superiore si può muovere in direzione verticale. Da [Eleftheriou e Moheimani, 2011, cp. 12].

### Electrowetting

Come detto in precedenza, alla base del funzionamento di un'attuatore capillare si ha un menisco d'acqua, o più precisamente una soluzione acquosa di sale inorganico, tra due elettrodi che caricano elettricamente il liquido: questo causa un decremento dell'angolo di contatto, l'interfaccia inizialmente idrofobica diventa idrofilica e conseguentemente, come già descritto, insorge una forza attrattiva tra i due piatti. Idealmente il cambiamento dell'angolo di contatto dovuto alla carica elettrica è governato dall'equazione di Young-Lippmann seguente:

$$\cos \theta_v = \cos \theta_0 + \frac{\varepsilon_d}{2\gamma_{gl}t_d} v_d^2$$

dove  $\theta_v$  è il nuovo angolo di contatto e  $\theta_0$  quello termodinamico in assenza di campo elettrico,  $\gamma_{gl}$  è la tensione superficiale dell'interfaccia liquido-gassosa,  $\varepsilon_d$  e  $t_d$  sono rispettivamente la permittività e lo spessore del dielettrico,  $v_d$  è infine il potenziale tra i due elettrodi. È importante sottolineare come il cambiamento dell'angolo di contatto sia un effetto puramente meccanico in quanto causato da una modifica del bilancio di pressione nel liquido e non da un cambiamento nell'energia superficiale.

#### 2.5.2 Stima della forza capillare

Come si è già avuto modo di esporre nel presente lavoro, le forze di attrazione che insorge tra i due piani a seguito della presenza di un menisco con angoli di contatto minori di  $90^\circ$  è il risultato di due contributi, uno dovuto alla tensione superficiale che agisce sulla linea di contatto, l'altro alla pressione capillare che si esercita su tutta la superficie bagnata. In [Knospe e Haj-Hariri, 2012] l'autore propone un'analisi per determinare una formula predittiva della forza totale dove, contrariamente a quanto considerato nel resto di questa tesi, si tiene conto anche della dinamica dell'intero fluido conseguente al movimento del piano superiore.

Con riferimento alla Figura 2.11, supponendo  $h \ll R$  e il menisco di forma assialsimmetrica, considerando il fluido incomprimibile la dinamica rispetto ad un sistema di coordinate cilindriche è governata dalle equazioni di Navier-Stokes seguenti, dove si è trascurato il termine convettivo non lineare:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0 \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \mu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} - \frac{u_r}{r^2} \right] \quad (2.15)$$

dove  $u$  è la velocità del fluido,  $p$  la pressione e  $\mu$  la viscosità cinematica. La eq. (2.14) esprime l'incomprimibilità del fluido e la eq. (2.15) la conservazione della quantità di moto in direzione radiale. A causa della natura assialsimmetrica del problema, la

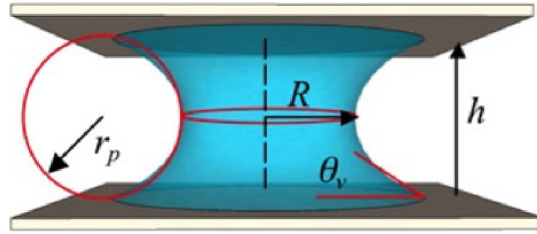


Figura 2.11: Definizione delle grandezze che caratterizzano la geometria del menisco, in [Eleftheriou e Moheimani, 2011, cp. 12].

velocità radiale  $u_r$  sarà una funzione lineare omogenea di  $r$  e, di conseguenza,

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) = \frac{1}{r} u_r + \frac{1}{r} \underbrace{r \frac{\partial u_r}{\partial r}}_{=u_r} = \frac{2}{r} u_r. \quad (2.16)$$

Sostituendo la eq. (2.16) nella eq. (2.14) si ottiene:

$$u_r = -\frac{r}{2} \frac{\partial u_z}{\partial z}.$$

La velocità radiale media, considerando come già detto il piatto inferiore fermo e quello superiore in moto con velocità  $\dot{h}$ , si calcola quindi come:

$$\bar{u}_r = \frac{1}{h} \int_0^h u_r dz = \frac{1}{h} \int_0^h -\frac{r}{2} \frac{\partial u_z}{\partial z} dz = -\frac{r}{2h} \dot{h} \quad (2.17)$$

Sempre dall'ipotesi sulla forma di  $u_r$  si ha

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{u_r}{r} = \frac{u_r}{r^2}$$

e la eq. (2.15) si riduce dunque a

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \mu \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} \quad (2.18)$$

Integrando la eq. (2.18) due volte rispetto a  $z$  si ottiene:

$$\mu u_r = \frac{\partial p}{\partial r} \frac{z^2}{2} + Az + B$$

Dove  $A$  e  $B$  sono le costanti di integrazione da determinare mediante le condizioni iniziali. Si ha:

$$\begin{aligned} u_r(r, z = 0) = 0 &\longrightarrow B = 0 \\ u_r(r, z = h) = 0 &\longrightarrow Ah = -\frac{\partial p}{\partial r} \frac{h^2}{2} \end{aligned}$$

da cui si ottiene

$$u_r = \frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial r} (z^2 - zh)$$

La velocità media si può ancora ricavare come:

$$\bar{u}_r = \frac{1}{h} \int_0^h u_r dz = \frac{1}{h} \int_0^h \frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial r} (z^2 - zh) dz = -\frac{h^2}{12\mu} \frac{\partial p}{\partial r} \quad (2.19)$$

Combinando le eq. (2.17) e (2.19) si ottiene l'equazione differenziale che governa la variazione radiale della pressione

$$\frac{dp}{dr} = \frac{6\mu\dot{h}}{h^3} r \quad (2.20)$$

Integrando la eq. (2.20) rispetto a  $r$  e imponendo che la pressione in  $r = R$  sia pari alla pressione di Laplace  $P_{Lap}$  si può trovare

$$p(r) = -\frac{3\mu\dot{h}}{h^3} (R^2 - r^2) + P_{ap}$$

da cui per integrazione si calcola la forza agente tra i due piani:

$$f_{cp} = \int_0^R p(r) 2\pi r dr = -\frac{3\pi\mu R^4}{2h^3} \dot{h} + \pi R^2 P_{Lap}$$

La pressione di Laplace, già definita in eq. (2.10), con le notazioni di Figura 2.11, tenendo conto del segno negativo del raggio di curvatura  $R_p$ , diventa:

$$P_{Lap} = \gamma_{gl} \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{R_p} \right)$$

Sempre nell'ipotesi  $h \ll R$  gli autori, non conoscendo la forma esatta del menisco all'equilibrio, approssimano il raggio  $R_p$  come

$$R_p = \frac{h}{2 \cos \theta_v}$$

e l'espressione per la forza capillare diventa dunque

$$f_{cp} = -\frac{3\pi\mu R^4}{2h^3} \dot{h} + \pi R \gamma_{gl} - \frac{2\pi R^2 \gamma_{gl}}{h} \cos \theta_v.$$

Per quanto riguarda invece il contributo alla forza totale dovuto all'effetto della tensione superficiale sui profili di liquido a contatto con i due piani, esso si esprime come

$$f_{st} = -2\pi R\gamma_{gl}$$

La forza totale si calcola quindi con la seguente formula finale:

$$f = f_{cp} + f_{st} = -\frac{3\pi\mu R^4}{2h^3}\dot{h} - \pi R\gamma_{gl} - \frac{2\pi R^2\gamma_{gl}}{h}\cos\theta_v \quad (2.21)$$

Tutti i termini che compaiono nella eq. (2.21) si possono considerare noti ad eccezione del raggio di curvatura orizzontale  $R$ . Supponendo di poter conoscere il volume totale del menisco, sempre nell'ipotesi  $h \ll R$ , si può porre

$$R = \sqrt{\frac{V}{\pi h}}$$

## 2.6 Interazioni di van der Waals

Le interazioni tra due superfici molto vicine tra loro sono fortemente influenzate dalle proprietà elettriche delle molecole stesse che le compongono: se queste sono cariche, l'interazione è principalmente dovuta alla forza di Coulomb, mentre per molecole neutre insorgono delle forze di polarizzazione dovute ai momenti di dipolo indotti negli atomi e nelle molecole dai campi elettrici delle cariche vicine e dei dipoli permanenti. Queste forze contribuiscono alle *interazioni di van der Waals*, che rivestono un ruolo fondamentale in molti fenomeni, tra cui l'adesione e la tensione superficiale. Con il termine *forza di van der Waals* si indica un insieme di forze che differiscono per la natura dei dipoli tra cui esse si instaurano: la forza di dispersione di London si esercita tra dipoli istantanei indotti, quella di Keesom tra dipoli permanenti, quella di Debye tra un dipolo permanente e il corrispondente dipolo indotto.

Nel caso dei MEMS la manifestazione più frequente delle interazioni di van der Waals è rappresentata dalle forze di dispersione. Queste forze hanno un'origine di natura essenzialmente quantistica: intuitivamente, per molecole non polari, il momento di dipolo mediato nel tempo è nullo; tuttavia, istantaneamente, la posizione degli elettroni rispetto al nucleo dà luogo a un momento di dipolo finito che influenza il campo elettrico circostante e polarizza ogni atomo neutro nelle vicinanze, inducendo in esso un momento di dipolo. Come conseguenza dell'interazione tra i dipoli indotti, si instaura una forza attrattiva tra gli atomi e, inoltre, la media temporale di tale forza risulta finita.

Di seguito sono riportate alcune proprietà significative delle forze di van der Waals:

- sono forze ad ampio raggio: il loro effetto è sensibile da distanze maggiori di  $10nm$  (si parla di retarded van der Waals forces) fino alle scale interatomiche pari a circa  $0.2nm$  (normal van der Waals forces);
- sono forze generalmente attrattive, ma possono diventare repulsive a seconda delle proprietà del materiale;

- inducendo forze intermolecolari, tendono ad allineare le molecole, determinando in alcuni casi un comportamento anisotropo;
- sono forze non-additive, in quanto la forza di dispersione tra due atomi è influenzata dalla presenza di un terzo atomo.

### Stima dell'adesione

Per stabilire quale sia il contributo delle interazioni di van der Waals sulla forza presente tra due superfici, generalmente si integrano le energie degli atomi di entrambi i corpi rilassando, di fatto, l'ipotesi di non additività. A tale scopo risulta molto utilizzato il potenziale di Lennard - Jones [Jones, 1924] (Figura 2.12) che cattura l'attrazione moderata ( $6^a$  potenza) tra le superfici mentre si avvicinano e la forte repulsione ( $12^a$  potenza) in prossimità del contatto. La forma matematica del potenziale

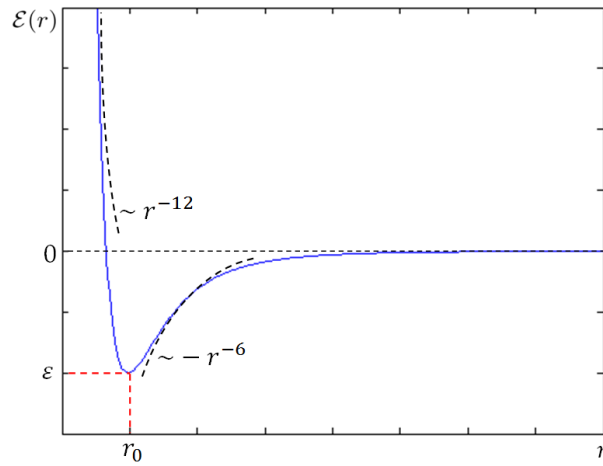


Figura 2.12: Grafico del potenziale di Lennard - Jones.

di Lennard-Jones è la seguente:

$$\mathcal{E}(r) = -\varepsilon \left[ 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \quad (2.22)$$

dove  $\varepsilon$  è il minimo del potenziale,  $r$  è la distanza interatomica e  $r_0$  viene detta distanza di equilibrio.

L'espressione finale della pressione si calcola integrando l'energia degli atomi dei due corpi ottenendo un'espressione che, opportunamente modificata al fine di evitare la presenza di forze infinite nel modello numerico, assume la seguente forma:

$$q_{vdW}(r) = \frac{A}{6\pi[D(r) + r_0]^3} \left[ \left( \frac{r_0}{D(r) + r_0} \right)^6 - 1 \right] \quad (2.23)$$

dove  $A$  è la *costante di Hamaker*,  $D(r)$  la distanza locale tra due punti della superficie,  $r_0$  la già citata distanza di equilibrio, che per il silicio risulta pari a  $r_0 = 0.149nm$ . La costante di Hamaker è definita come

$$A = \pi^2 C \rho_1 \rho_2$$



dove  $\rho_1$  e  $\rho_2$  sono il numero di atomi per unità di volume nei due corpi e  $C$  è il potenziale tra una coppia di due atomi. Per il silicio si ottiene, ad esempio, il seguente valore:  $A \approx 27 \cdot 10^{-20} J$ .

Per tenere in considerazione anche il regime ritardante, in passato sono state sviluppate alcune correzioni alla eq. (2.23): riportiamo, per completezza, una di queste, proposta in [Anandarajah e Chen, 1995]:

$$q_{vdW-ret}(r) = \frac{A}{6\pi[D(r) + r_0]^3} \left[ \left( \frac{r_0}{D(r) + r_0} \right)^6 - 1 \right] g_p(r)$$

La funzione correttiva  $g_p(r)$  è definita da

$$g_p(r) = \left[ 1 - \frac{2r}{c} + \frac{6r^2}{c^2} + \frac{12r^3}{c^3} - \frac{12r^3}{c^4} (r + c) \ln \left( 1 + \frac{c}{r} \right) \right]$$

dove  $c = 1.55\lambda/\pi$  con  $\lambda$  lunghezza d'onda caratteristica dell'interazione che, sempre per il silicio, può essere posta pari a  $\lambda = 25nm$ .

### Stima dell'adesione per geometrie semplici

Per alcune geometrie elementari, integrando la eq. (2.22), si può ricavare una semplice legge di interazione - che non considera il regime ritardante - espressa ancora in funzione della costante di Hamaker. Nelle applicazioni che riguardano le superfici rugose dei MEMS, è significativo considerare tre geometrie di riferimento, per le quali si ottiene [Israelachvili, 2011] la seguente energia libera  $W$ :

$$\begin{aligned} W &= -\frac{A}{6D} \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} && \text{sfera - sfera} \\ W &= -\frac{AR}{6D} && \text{sfera - superficie piana} \\ W &= -\frac{A}{12\pi D^2} && \text{sup. piana - sup. piana} \end{aligned}$$

dove  $R$ ,  $R_1$  e  $R_2$  sono i raggi delle sfere e  $D$  è la minima distanza tra i due corpi. Differenziando l'energia rispetto alla distanza si ottiene la forza dovuta alle interazioni di van der Waals nei primi due casi e la distribuzione di pressione per i due piani paralleli idealmente infiniti.



## Capitolo 3

# Modellazione FEM del processo di formazione dei menischi

In questo capitolo si fornisce una descrizione di un codice ad elementi finiti, scritto nel linguaggio *Fortran90* ideato per simulare la configurazione geometrica di un menisco tra due corpi. Come visto, l'entità della forza di attrazione dovuta alla presenza di un menisco è fortemente influenzata dalla forma che esso assume. Un primo obiettivo di questo codice è quello di dare una stima della forza di attrazione attraverso l'individuazione di tale forma. In letteratura esistono, a tal fine, già diverse tecniche, più o meno sofisticate: dalle più semplici approssimazioni costanti tipo *cut-off* fino alle sofisticate modellazioni di meccanica molecolare, oltre ad una serie di modelli semi-analitici che verranno meglio descritti nel capitolo 4. Molte di queste tecniche però, e molti degli studi che si trovano a riguardo in letteratura, sono fino ad oggi concentrati su particolari casi test, dove i corpi rigidi tra cui si forma il menisco sono di forma geometrica semplice, regolare, tutti caratterizzati da particolari simmetrie, prevalentemente assialsimmetriche. Ciò può essere limitativo nello studio dei fenomeni adesivi tra superfici rugose che più interessano in ambito ingegneristico, caratterizzate da asperità irregolari. Si è scelto quindi di considerare una nuova modellazione della geometria del menisco, che non fosse vincolata a geometrie particolari, ma che potesse essere utilizzabile anche per corpi non simmetrici.

### 3.1 Formulazione matematica

L'idea, presentata per la prima volta in [Arosio, 2009], sulla quale si basa la formulazione del problema studiato, è quella di considerare il menisco come una membrana elastica, con una tensione assegnata e soggetta alla pressione di Laplace definita dalla eq. (2.10). Le condizioni al contorno sono date dall'angolo che il menisco forma con la superficie dei corpi con i quali è a contatto. La geometria del menisco sarà quella che permette di soddisfare le condizioni di equilibrio. Il problema considerato per determinare la conformazione del menisco risulta essere, dunque, un problema di equilibrio statico. Le equazioni governanti il problema sono quelle di bilancio tra le forze interne al menisco e quelle esterne agenti su di esse [Corigliano e Taliercio, 2005]. A partire dal principio dei lavori virtuali, seguendo una metodologia classica [Zienkiewicz et al., 2005] della meccanica computazionale, e

del calcolo delle variazioni, introducendo gli spostamenti virtuali  $\delta \mathbf{u}$  e le deformazioni virtuali  $\boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u})_{ij} = \frac{1}{2}(\delta u_{i,j} + \delta u_{j,i})$ , si ha la seguente formulazione del problema:

$$\underbrace{\int_S \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) dS}_{(I)} - \underbrace{\int_S \mathbf{F} \cdot \delta \mathbf{u} dS - \int_{\partial S} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} dl}_{(II)} = 0 \quad (3.1)$$

Le quantità fisiche introdotte nella eq. (3.1) hanno il seguente significato.

- $S$ , superficie del menisco;
- $\partial S$ , bordo del menisco a contatto con le superfici dei due corpi rigidi;
- $\mathbf{n}$ , versore normale alla superficie  $S$ ;
- $\boldsymbol{\sigma}$ , tensore degli sforzi;
- $\mathbf{F}$ , vettore delle forze agenti su  $S$ ;
- $\mathbf{f}$ , vettore delle forze agenti su  $\partial S$ .

La eq. (3.1) si può interpretare come l'uguaglianza tra il lavoro virtuale interno compiuto dagli sforzi ( $I$ ) e quello esterno delle forze ( $II$ ). Nel problema in esame il modello degli sforzi è noto a priori ed è pari a

$$\boldsymbol{\sigma} = \gamma \mathbf{I}_S \quad (3.2)$$

dove  $\gamma$  è la già citata tensione superficiale del liquido e  $\mathbf{I}_S$  è il tensore identità di superficie definito come

$$\mathbf{I}_S = \mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$$

Per quanto riguarda i carichi esterni, come detto le forze superficiali agenti sul menisco sono pari a:

$$\mathbf{F} = -p\mathbf{n}$$

dove  $p$  è la pressione di Laplace.

Il termine  $\mathbf{f}$ , invece, che rappresenta le forze esercitate dalla superficie rigida sul menisco, è pari a

$$\mathbf{f} = \mathbf{T}^D = \gamma \cos \theta \mathbf{r}$$

dove  $\mathbf{r}$  è il versore normale al bordo del menisco giacente sulla superficie rigida con la quale il menisco è a contatto e  $\theta$  è l'angolo di contatto formato dal menisco con la superficie rigida. Con le quantità appena introdotte, si può riscrivere la eq. (3.1) come:

$$\underbrace{\int_S \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) dS}_{\mathbf{F}_i} = \underbrace{\int_S -p\mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_{\partial S} \mathbf{T}^D \cdot \delta \mathbf{u} dl}_{\mathbf{F}_e} \quad (3.3)$$

La eq. (3.3) è il punto di partenza per la discretizzazione numerica: il termine a sinistra rappresenta le forze interne del sistema mentre i termini di destra quelle esterne. Le quantità  $\boldsymbol{\sigma}$ ,  $p$  e  $\theta$ , che caratterizzano il problema, sono proprietà fisiche supposte note. La vera incognita, come già anticipato, è data dal dominio  $S$  dell'equazione, che rappresenta la configurazione geometrica del menisco.

## 3.2 Formulazione ad elementi finiti

Il problema definito dalla eq. (3.3) viene risolto utilizzando il metodo di Galerkin-Elementi Finiti. La superficie del menisco è discretizzata facendo uso di Elementi Finiti triangolari. Si introduce quindi l'usuale forma approssimata del vettore degli spostamenti virtuali  $\delta \mathbf{u}(x)$ :

$$\delta \mathbf{u}(x) \approx \delta \tilde{\mathbf{u}} = \sum_b N_b(\mathbf{x}) \delta \tilde{u}_b = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \delta \tilde{\mathbf{u}}$$

dove  $N_b$  sono le funzioni di forma dell'elemento,  $\delta \tilde{u}_b$  gli spostamenti nodali, mentre la somma è intesa su tutti i nodi associati all'elemento corrente. Dal momento che si è scelto di utilizzare elementi triangolari lineari,  $b = 1, 2, 3$  per ogni componente  $x, y, z$  dello spostamento nodale, mentre le funzioni di forma  $N_b$  sono funzioni lineari che valgono 1 nel nodo  $b$  e sono nulle sugli altri. Gli integrali sulla superficie e sui bordi del menisco, che compaiono nella eq. (3.3) possono essere scomposti nella sommatoria degli integrali sui singoli elementi. Indicato con  $K \in S$  il generico EF e con  $\partial K_S \in \partial S$  i lati degli elementi che giacciono sul bordo del menisco, si ha:

$$\sum_K \int_K \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) dS = \sum_K \int_K -p \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{u} dS + \sum_{\partial K_S} \int_{\partial K_S} \mathbf{T}^D \cdot \delta \mathbf{u} dl \quad (3.4)$$

Con argomenti di geometria differenziale, tenuto conto della eq. (3.2), si può dimostrare [Green e Zerna, 2002] che

$$\int_K \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) dS = \gamma \int_{\partial K} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} dl.$$

dove  $\mathbf{b} = \mathbf{t} \wedge \mathbf{n}$ , con  $\mathbf{t}$  versore tangente al bordo  $\partial S$ .

### 3.2.1 Buona posizione del problema

Il problema, in questa prima formulazione, risulta essere mal posto, sia dal punto di vista dell'esistenza di una soluzione che dell'unicità. Per entrambi gli aspetti, infatti, occorre prestare particolare attenzione.

#### Unicità

A causa del fatto che lo stato di sforzo  $\boldsymbol{\sigma}$  è imposto a priori e non dipende dalle posizioni nodali, la stessa geometria del menisco può essere definita da diverse configurazioni dei nodi. Si possono verificare, perciò, situazioni in cui gli elementi sono estremamente distorti. Per ovviare a questo inconveniente e garantire l'unicità della soluzione, una prima possibilità è quella di introdurre il seguente termine di penalizzazione:

$$\frac{\lambda}{2} \sum_K (A_K - \bar{A})^2$$

dove la sommatoria è intesa su tutti gli elementi,  $A_K$  è l'area del  $K$ -esimo elemento,  $\bar{A}$  la media dell'area di tutti gli elementi e  $\lambda$  un coefficiente di penalizzazione scelto a priori dall'utente. In questo modo viene inserito un controllo sull'area degli elementi

per evitare che si discostino in modo eccessivo dall'area media. La soluzione sarà tanto più vicina a quella esatta quanto più la penalizzazione sarà piccola. La forma variazionale del termine introdotto risulta essere

$$\lambda \sum_K (A_K - \bar{A}) \delta A_K$$

dove  $\delta A_K$  è la variazione dell'area del  $K$ -esimo elemento, pari a

$$\delta A_K = \int_K \nabla \cdot \delta \mathbf{u} dS = \int_{\partial K} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} dl$$

Con l'aggiunta di tale termine si può riscrivere la eq. (3.4) come:

$$\sum_K \gamma \int_{\partial K} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} dl = \sum_K \int_K -p \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{u} dS + \sum_{\partial K_s} \int_{\partial K_s} \mathbf{T}^D \cdot \delta \mathbf{u} dl - \lambda \sum_K (A_K - \bar{A}) \int_{\partial K} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} dl \quad (3.5)$$

Ancora una volta si può interpretare l'equazione ottenuta come un bilancio tra le forze interne (termine di sinistra), e le forze esterne. La eq. (3.5) si può dunque riscrivere in modo compatto come

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_e \quad (3.6)$$

### Esistenza

L'esistenza di una soluzione, anche e soprattutto da un punto di vista fisico, è un problema, a quanto ci risulta oggi, ancora aperto. In particolare non sono ancora stati trovati dei metodi efficaci ed esatti che consentano di trovare la distanza tra i due corpi rigidi alla quale il menisco non può più esistere in equilibrio e va quindi incontro a collasso (cfr. sezione 4.3). Il codice di calcolo elaborato procede per incrementi successivi della distanza di separazione tra i due corpi rigidi e, per ogni valore, cerca una possibile configurazione di equilibrio. Sarebbe auspicabile che in corrispondenza del valore critico di rottura anche il codice non riuscisse più a trovare una configurazione di equilibrio e, inoltre, raggiungesse tale valore trovando una soluzione per ogni step precedente, così da poter diventare uno strumento utilizzabile per determinare come le condizioni ambientali e le geometrie dei corpi influenzino la possibilità che si verifichi o meno la condensazione tra di essi. Al momento però ciò non è possibile in quanto si è osservato che la convergenza dello schema (cfr. sezione 3.2.2) è fortemente influenzata anche da altri parametri quali ad esempio un coefficiente di penalità eccessivamente piccolo o una configurazione iniziale del menisco troppo lontana da quella finale di equilibrio.

### 3.2.2 Convergenza

Il problema formulato risulta essere fortemente non lineare e ciò comporta difficoltà di convergenza. Per questo motivo, il problema, che è statico, può essere visto come la parte statica della risposta transitoria di un problema dinamico. Se si è interessati alla soluzione statica, che si ottiene quando il processo è giunto all'equilibrio, la parte transitoria del problema dinamico non è di interesse. Di conseguenza, i parametri che caratterizzano la dinamica del problema (massa, smorzamento e passo temporale),

possono essere scelti in modo da massimizzare la velocità di convergenza verso lo stato stazionario. Viene dunque simulato un processo dinamico ma, grazie alle forze inerziali scelte per stabilizzare la soluzione, questo risulta essere incondizionatamente stabile. Questo approccio viene chiamato *dynamic relaxation*.

### Il metodo *dynamic relaxation*: generalità

Si consideri l'equazione unidimensionale del moto oscillatorio smorzato, scritta in forma canonica

$$\ddot{x} + \mu\dot{x} + \omega_0^2 x = 0$$

con

$$\mu = \frac{c}{m} \quad \text{e} \quad \omega_0^2 = \frac{k}{m}$$

I termini  $\mu$  e  $\omega_0$  rappresentano, rispettivamente, il coefficiente di smorzamento e la frequenza propria del sistema non smorzato. La soluzione generale del moto si può scrivere come

$$x(t) = Ae^{\xi_1 t} + Be^{\xi_2 t}$$

dove  $A$  e  $B$  sono costanti da determinarsi con le condizioni iniziali assegnate e  $\xi_i$  le radici dell'equazione caratteristica associata, ossia

$$\xi^2 + 2\nu\omega_0\xi + \omega_0^2 = 0$$

da cui si ottiene

$$\xi_{1,2} = -\nu\omega_0 \pm \omega_0\sqrt{\nu^2 - 1}$$

Si possono quindi distinguere tre diversi regimi:

- smorzamento debole:  $\nu < 1$
- smorzamento critico:  $\nu = 1$
- smorzamento superiore al critico:  $\nu > 1$

Con semplici simulazioni si osserva (Figura 3.1) che la convergenza alla soluzione stazionaria si ottiene più velocemente in regime di smorzamento critico. Il metodo *dynamic relaxation* si basa dunque sull'idea di aggiungere alla eq. (3.5) dei termini dinamici fittizi per ottenere un moto oscillatorio smorzato. Tali termini vengono scelti in modo da essere in un regime di oscillazione il più vicino possibile a quello di smorzamento critico. In questo modo si raggiunge più velocemente la stazionarietà, che corrisponde alla soluzione desiderata dell'equazione statica.

### *Dynamic relaxation* del problema

Consideriamo dunque l'equazione in forma compatta (3.6), e introduciamo la seguente dinamica:

$$\mathcal{M}\ddot{\mathbf{U}}^n + \mathcal{C}\dot{\mathbf{U}}^n + \mathbf{F}_i^n = \mathbf{F}_e^n \quad (3.7)$$

dove con la notazione  $n$  si indica che le quantità sono valutate, introdotto un passo di discretizzazione temporale  $\Delta t$ , all'istante  $t^n = n\Delta t$ . La matrice di massa  $\mathcal{M}$  e quella di smorzamento  $\mathcal{C}$  vengono scelte in modo da accelerare la convergenza. Per semplicità,

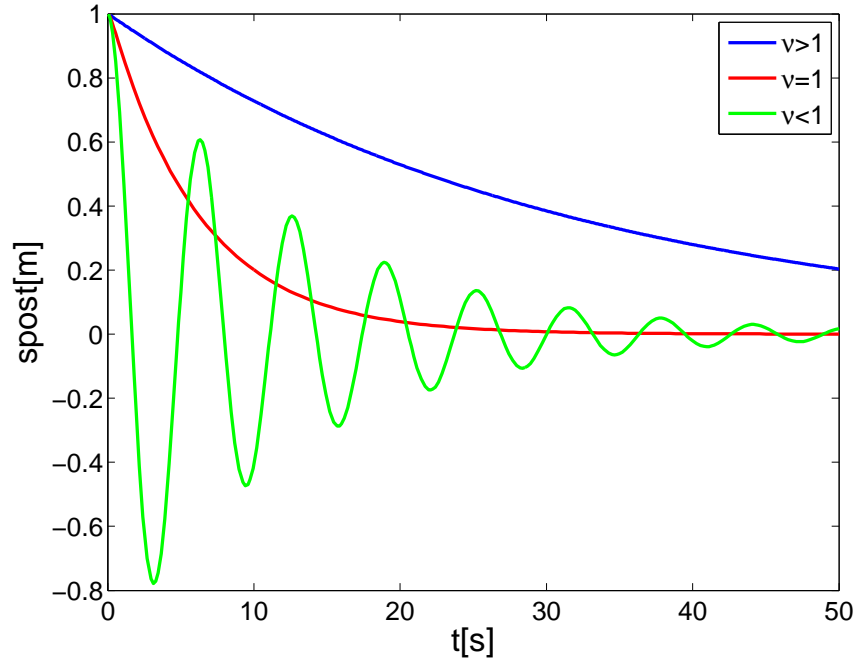


Figura 3.1: Soluzione del moto smorzato per diversi valori di  $\nu$ .

dal momento che è sempre possibile operare un cambio di base che diagonalizzi  $\mathcal{M}$  ma non  $\mathcal{C}$ , considereremo un approccio alla Rayleigh con entrambe le matrici in forma diagonale, legate da un rapporto di proporzionalità:

$$\mathcal{C} = \alpha \mathcal{M}$$

Per quanto riguarda la scelta della matrice di massa, se si trattasse di una membrana reale sarebbe nota la sua densità. Essendo invece il menisco una membrana fittizia, si impone in modo arbitrario che la densità sia pari alle tensioni superficiali.

La scelta del coefficiente  $\alpha$  deve essere fatta in modo tale che il sistema abbia uno smorzamento critico. Come presentato in [Oakley e Knight, 1995], un'approssimazione di questa quantità è data da:

$$\alpha \approx 2 \frac{\omega_m \omega_M}{\sqrt{\omega_m^2 + \omega_M^2}}$$

dove  $\omega_m$  e  $\omega_M$  sono, rispettivamente, la frequenza minima e massima del sistema discretizzato. Per sistemi meccanici, solitamente si ha che  $\omega_m \ll \omega_M$  e, di conseguenza,  $\alpha \approx 2\omega_m$ . Una stima di  $\omega_m$  è data da

$$\omega_m^2 \approx \frac{\mathbf{w}^T \mathcal{K}^t \mathbf{w}}{\mathbf{w}^T \mathcal{M}^t \mathbf{w}}$$

dove  $\mathbf{w}$  è un vettore peso mentre  $\mathcal{K}^t$  è un'approssimazione diagonale della matrice di rigidità tangente, le cui componenti possono essere stimate come

$$\mathcal{K}_{jj}^{tn} = \frac{F_{ij}^n - F_{ij}^{n-1}}{u_j^n - u_j^{n-1}}$$



Si assume come vettore peso la seguente quantità:

$$\mathbf{w} = \frac{\mathbf{U}^n - \mathbf{U}^{n-1}}{t^n - t^{n-1}} = \frac{d\mathbf{U}^n}{\Delta t^{n-1}}$$

Si ottiene quindi che all'istante  $t^n$  il coefficiente di smorzamento risulta essere

$$\alpha^n \approx 2 \max \left( \sqrt{\frac{d\mathbf{U}^{nT} [\mathbf{F}_i^n - \mathbf{F}_i^{n-1}]}{d\mathbf{U}^{nT} \mathcal{M} d\mathbf{U}^n}}, 0 \right) \quad (3.8)$$

Con l'apice  $n$  si vuole sottolineare che per garantire un'ottima convergenza durante l'esecuzione, il coefficiente di smorzamento deve essere ricalcolato ad ogni iterazione. Poichè ad ogni passo temporale  $\Delta t$  la configurazione della superficie del menisco si modifica, anche l'area degli elementi della discretizzazione cambia e ad ogni iterazione bisogna ricalcolare anche la matrice di massa e il termine noto.

### 3.2.3 Integrazione temporale

Per simulare l'evoluzione temporale del sistema (3.7) si utilizza il metodo delle differenze centrate (si veda [Bonnet e Frangi, 2006]). Velocità e accelerazione si esprimono dunque come

$$\dot{\mathbf{U}}^{n+\frac{1}{2}} \approx \frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t^n} \quad \ddot{\mathbf{U}}^n \approx \frac{\dot{\mathbf{U}}^{n+\frac{1}{2}} - \dot{\mathbf{U}}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t^n}$$

dove con l'apice  $n \pm \frac{1}{2}$  si fa riferimento all'istante temporale intermedio  $t^{n \pm \frac{1}{2}}$ . Gli spostamenti all'iterazione  $n + 1$  sono dati da:

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \Delta t^n \dot{\mathbf{U}}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.9)$$

La velocità al tempo  $t^n$  viene invece calcolata come

$$\dot{\mathbf{U}}^n = \frac{\dot{\mathbf{U}}^{n+\frac{1}{2}} - \dot{\mathbf{U}}^{n-\frac{1}{2}}}{2}$$

Mediante semplici sostituzioni, supponendo un passo di discretizzazione temporale uniforme, è facile verificare che per le derivate prima e seconda degli spostamenti nodali  $\mathbf{U}$ , è stata utilizzata la consueta approssimazione

$$\dot{\mathbf{U}}^n \approx \frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^{n-1}}{2\Delta t} \quad \ddot{\mathbf{U}}^n \approx \frac{\mathbf{U}^{n+1} - 2\mathbf{U}^n + \mathbf{U}^{n-1}}{\Delta t^2}$$

La eq. (3.7) diventa dunque

$$\mathcal{M}^n \frac{\mathbf{U}^{n+1} - 2\mathbf{U}^n + \mathbf{U}^{n-1}}{(\Delta t^n)^2} + \alpha^n \mathcal{M}^n \frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^{n-1}}{2\Delta t^n} = \mathbf{F}_e^n - \mathbf{F}_i^n$$

oppure, scrivendola in funzione di  $\dot{\mathbf{U}}^{n+\frac{1}{2}}$ ,

$$\mathcal{M}^n \frac{\dot{\mathbf{U}}^{n+\frac{1}{2}} - \dot{\mathbf{U}}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t^n} + \alpha^n \mathcal{M}^n \frac{\dot{\mathbf{U}}^{n+\frac{1}{2}} - \dot{\mathbf{U}}^{n-\frac{1}{2}}}{2} = \mathbf{F}_e^n - \mathbf{F}_i^n$$

da cui si può ricavare

$$\dot{U}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{2\Delta t^n}{2 + \alpha^n \Delta t^{n+1}} (\mathcal{M}^n)^{-1} (\mathbf{F}_e^n - \mathbf{F}_i^n) + \frac{2 - \alpha^n \Delta t^n}{2 + \alpha^n \Delta t^n} \dot{U}^{n-\frac{1}{2}} \quad (3.10)$$

Dal momento che la matrice  $\mathcal{M}^n$  è diagonale, il sistema (3.10) risulta essere di facile risoluzione. Sul bordo  $\partial S$  del menisco bisogna imporre che la velocità  $\dot{U}^{n+\frac{1}{2}}$  sia in direzione tangente alla superficie rigida con la quale il menisco è a contatto. Una volta che la velocità è stata calcolata, si determinano poi le posizioni dei nodi della discretizzazione spaziale della superficie per mezzo della eq. (3.9), ottenendo così la nuova configurazione geometrica del menisco.

Come già accennato, alla prima iterazione del processo dinamico bisogna scegliere una conformazione del menisco, che poi evolverà alla geometria corretta, che non sia troppo lontana da tale soluzione finale. Per tutte le prove fino ad ora effettuate riguardanti solidi rigidi di forma regolare e geometria assialsimmetrica è stata scelta una configurazione iniziale cilindrica o a tronco di cono; solo per il caso non assialsimmetrico si è resa necessaria una diversa forma iniziale, anch'essa non assialsimmetrica (Figura 3.2).

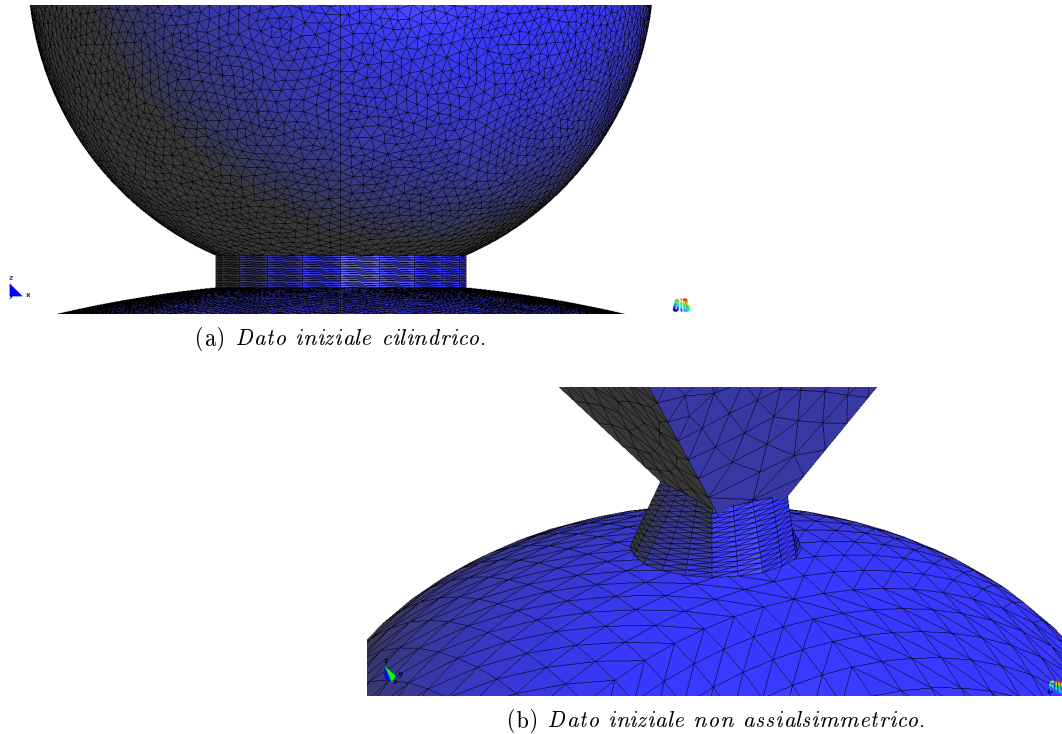


Figura 3.2: Configurazione iniziale per la superficie del menisco

La procedura iterativa viene arrestata quando la soluzione si stabilizza, controllando la seguente quantità:

$$\frac{\|\mathbf{F}_i^n - \mathbf{F}_e^n\|}{\|\mathbf{F}_i^n\|} < \text{tol} \quad (3.11)$$

dove con  $\|\cdot\|$  si intende la norma Euclidea, mentre  $\text{tol}$  è una tolleranza prefissata. Si osservi che al numeratore si ha il residuo dell'equazione del problema statico, pesato

al denominatore dal contributo delle forze interne.

Se non si ha convergenza, la procedura iterativa si arresta dopo un numero massimo di iterazioni. Come già detto, da un punto di vista puramente numerico, la cause di una mancata convergenza vanno cercate tra:

- configurazione iniziale del menisco troppo lontana da quella esatta;
- coefficiente di penalità troppo piccolo con conseguente deformazione eccessiva degli elementi.

In Figura 3.4 riportiamo per chiarezza un diagramma di flusso sintetico dell’algoritmo con le principali operazioni richieste.

Per la validazione iniziale del modello si rimanda a [Arosio, 2009]. In Figura 3.3 ci si limita solo a mostrare il menisco calcolato per un caso non assialsimmetrico, dove si è voluta simulare l’interazione tra un modello della punta di un AFM e una superficie sferica.

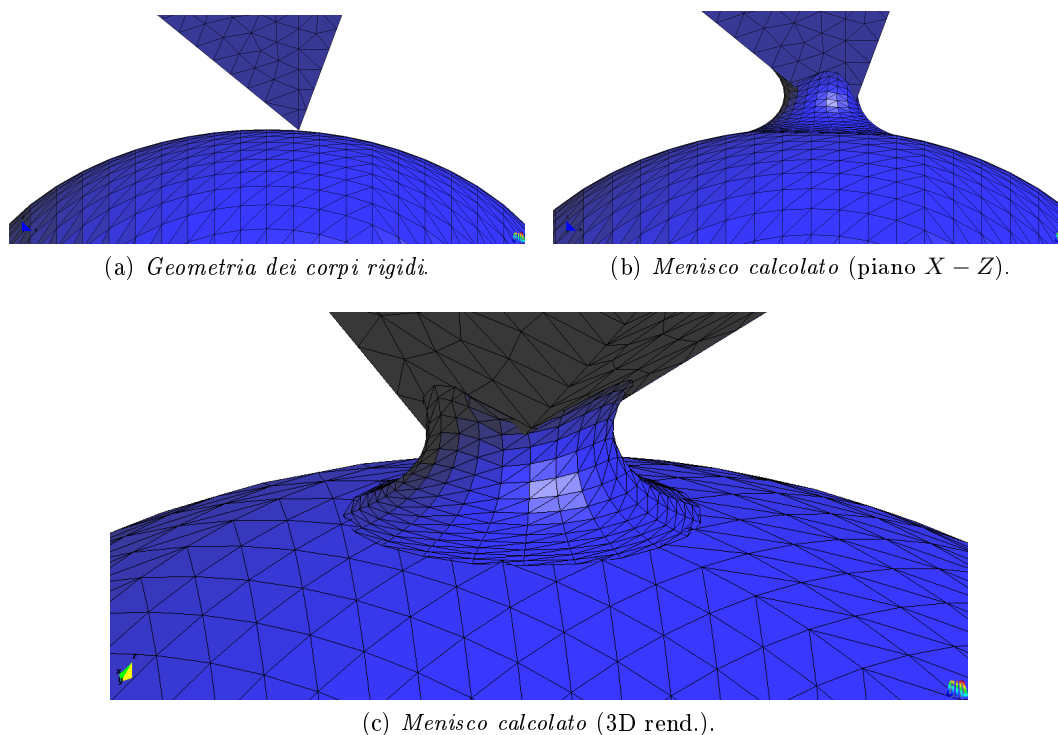


Figura 3.3: Simulazione numerica della formazione di un menisco d’acqua tra una punta piramidale e una superficie sferica. Umidità relativa: 85%

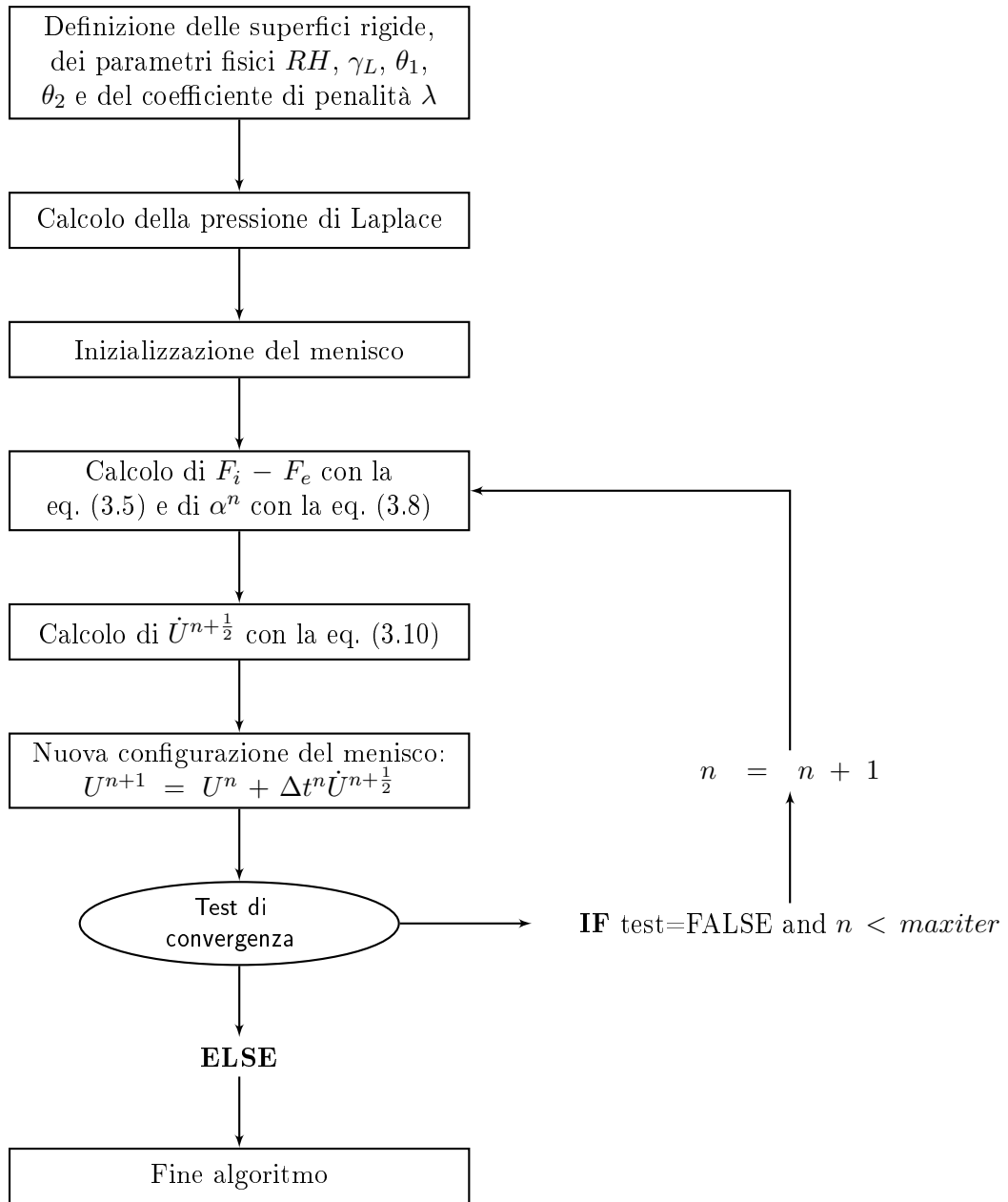


Figura 3.4: Diagramma di flusso dell'algoritmo.

## Capitolo 4

# Modelli di adesione capillare

In questo capitolo vengono presentati alcuni possibili modelli *semianalitici* predittivi della forza di adesione dovuta alla condensazione di vapore tra due corpi micro/nanoscopici caratterizzati da una geometria elementare. Verranno considerati due casi test e, ad una panoramica sullo stato dell'arte, seguirà la presentazione di un nuovo modello che approssimi in modo migliore l'andamento di tale forza, soprattutto per oggetti di dimensione nell'ordine delle decine di nanometri, cercando di tenere in maggiore considerazione la geometria del menisco.

### 4.1 Definizione delle forze: richiami

Come visto nel capitolo 2 le forze di attrazione di natura statica tra due particelle dovute alla condensazione di vapore e alla conseguente formazione di un menisco d'acqua tra esse, sono di due tipi: una di natura *capillare*, nel seguito indicata con  $F_{cp}$ , e una dovuta alla *tensione superficiale* del liquido, denotata con  $F_{st}$ . Tali contributi sono definiti dalle seguenti relazioni:

$$F_{cp} = A_{xy}P \qquad F_{st} = L\gamma \cos \alpha \qquad (4.1)$$

dove  $A_{xy}$  è la proiezione sul piano  $x-y$  dell'area della particella bagnata dal menisco,  $P$  la pressione di Laplace,  $L$  il perimetro ottenuto dal contatto tra il menisco e la particella mentre  $\alpha$  è l'angolo che il menisco forma con l'asse delle  $z$ . Per calcolare con precisione il valore delle forze di adesione è necessario, dunque, conoscere la corretta geometria del menisco. Il codice presentato nel capitolo 3 è uno dei possibili strumenti che, attraverso il calcolo approssimato di tale configurazione, è in grado di dare una predizione sull'intensità delle forze attrattive. Presenteremo nel seguito alcuni modelli diversi che possano fornire un'analogia predizione anche senza necessitare dell'esplicito calcolo del menisco all'equilibrio.

### 4.2 Sfera su superficie piatta

Il primo caso test considerato, di tipo assialsimmetrico, riguarda lo studio della forza tra una superficie rigida di forma sferica e un piano orizzontale.

### 4.2.1 Approssimazione standard

Come visto nella sezione 2.4 l'equazione più semplice utilizzata per stimare la forza di adesione non considera in realtà la corretta geometria del menisco, ed è la cosiddetta *standard approximation*, riportata di seguito:

$$F = \begin{cases} 4\pi R\gamma_L \cos\theta \left(1 + \frac{d}{2r_k \cos\theta}\right)^{-1} & \text{se } d < d_{cut} \\ 0 & \text{se } d > d_{cut} \end{cases} \quad (4.2)$$

dove  $R$  è il raggio della sfera,  $\gamma_L$  la tensione superficiale e  $\theta$  l'angolo di contatto,  $d$  la distanza minima tra la sfera e la superficie,  $d_{cut}$  un'opportuna distanza limite che è di solito presa, come visto, pari a  $d_{cut} = 2r_k \cos\theta$ , con  $r_k$  raggio di Kelvin.

Il confronto con i dati sperimentali, ottenibili ad esempio per mezzo del microscopio a forza atomica, mostra però che la eq. (4.2) vale solo sotto condizioni molto restrittive, quali ad esempio basse umidità e sfere di raggio nell'ordine dei micrometri. Tale equazione predice infatti una forza che, oltre a trascurare l'effetto della curvatura orizzontale, risulta essere indipendente sia dalla posizione della linea di contatto del menisco sulle due superfici sia dalla distanza tra esse, elementi che si è verificato invece essere influenti, soprattutto per sfere aventi raggio di lunghezza nell'ordine dei nanometri.

### 4.2.2 Modelli energetici

Una prima alternativa per correggere la *standard approximation* che non richiede dettagli riguardo alla geometria del menisco è quella presentata in [de Boer e de Boer, 2007], che fa uso di argomentazioni energetiche. Gli autori a partire da un bilancio basato sulla prima legge della termodinamica per i due casi in cui si ipotizzi o il volume del menisco costante oppure la pressione, ricavano un'espressione per la variazione di lavoro sul volume di controllo nel processo di allontanamento delle due superfici rigide tra cui il menisco si è formato. Noto tale lavoro  $W$  l'espressione della forza in funzione della distanza  $d$  sarà data da

$$F(d) = \frac{\partial W}{\partial d}$$

Per il caso di una sfera su una superficie piatta gli autori ottengono le seguenti espressioni:

$$F(d) = 4\pi R\gamma \cos\theta \left(1 - \frac{d}{\sqrt{4r_k^2 \cos^2\theta + d^2}}\right) \quad (\text{volume costante})$$

$$F(d) = 4\pi R\gamma \cos\theta \left(1 - \frac{d}{2|r_k| \cos\theta}\right) \quad (\text{pressione costante})$$

dove i vari termini hanno il significato già visto nella sezione 4.2.1.

### 4.2.3 Modelli a geometria esatta

In [Pakarinen et al., 2005] viene invece presentato uno studio che non si limita in realtà al solo caso di una sfera su superficie patta ma può essere esteso a tutti i casi di assialsimmetria. Si tratta di un metodo per calcolare numericamente la forma esatta, non necessariamente circolare, del menisco, tenendo conto di entrambe le curvature della superficie liquida, a partire dalla definizione del raggio di Kelvin (eq. (2.9)), che riportiamo per semplicità:

$$r_k = \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)^{-1} \quad (4.3)$$

Nel caso di menischi assialsimmetrici,  $r_2$  rappresenta il raggio di curvatura positivo attorno al centro del sistema di riferimento mentre  $r_1$  il raggio di curvatura verticale, che risulta essere negativo per i comuni menischi di forma concava (cfr. Figura 2.7). Si consideri il caso di un menisco tra una sfera e una superficie patta, con il sistema di riferimento indicato in Figura 4.3; il profilo del menisco viene calcolato allineando elementi infinitesimi di linea. Il primo viene collocato in modo tale che una sua estremità giaccia sulla superficie della particella e formi l'angolo di contatto  $\theta_1$  voluto. L'altro estremo dell'elemento determina il raggio di curvatura orizzontale  $r_2$ , calcolato a partire dall'asse di rotazione della particella. Alla corrispondente altezza, una volta che  $r_2$  è noto, si determina il raggio di curvatura verticale  $r_1$ , utilizzando la eq. (4.3). L'elemento di linea successivo deve essere posizionato in modo tale da assumere il raggio di curvatura richiesto  $r_1$ . Nel piano  $y - z$  il raggio  $r_1$  è legato alla curvatura del profilo verticale del menisco  $\kappa$  dalla relazione:

$$r_1 = \frac{1}{\kappa} = \frac{\left[ 1 + (dy/dz)^2 \right]^{3/2}}{d^2y/dz^2} \quad (4.4)$$

Una volta che quindi  $r_1$  è stato calcolato con la eq. (4.3), la pendenza nel piano del nuovo elemento di linea si calcola a partire dalla eq. (4.4), da cui si ricava:

$$dz^2 = \frac{d^2y \left[ 1 + (dy/dz)^2 \right]^{3/2}}{r_1}$$

Questo procedimento viene ripetuto continuando ad aggiungere elementi fino a quando il profilo del menisco raggiunge l'altra superficie. Viene quindi calcolato l'angolo di contatto che si forma tra l'ultimo elemento e la superficie. Se questo ha il valore  $\theta_2$  desiderato, allora si è ottenuta la configurazione esatta del menisco; in caso contrario si itera la procedura scegliendo un nuovo punto di partenza.

### 4.2.4 Modelli a geometria approssimata. Angoli di contatto nulli.

Di seguito vengono presentati tre modelli che permettono di approssimare la conformazione del menisco in modo poi da stimare l'entità delle forze di adesione. I primi due, che verranno indicati con  $M_1$  e  $M_2$  sono stati proposti in [Arosio, 2009] mentre il terzo,  $M_3$  viene presentato per la prima volta in questo lavoro.

Si considera dunque il caso di una sfera posta in prossimità di una superficie patta

(Figura 4.3). La sfera, di raggio  $R$ , è separata dalla superficie da una distanza  $d$ . Il menisco è a contatto con la sfera ad una quota  $z = D$  e assume, sulla superficie rigida della sfera, un profilo circolare di raggio  $r_m$ . Per calcolare le forze di adesione è sufficiente conoscere tale valore: una volta noto, infatti, è immediato da esso calcolare le grandezze necessarie:

$$A_{xy} = \pi r_m^2 \qquad L = 2\pi r_m \qquad (4.5)$$

I tre modelli si differenziano nella stima che forniscono per la quantità  $D$ , dalla quale è possibile ricavare  $r_m$  osservando che

$$r_m = \sqrt{R^2 - [R - (D - d)]^2}$$

### Modello M1

Questo primo modello considera come valore di  $D$  quello che si avrebbe tra due superfici piate, trascurando la curvatura orizzontale (Figura 4.1):

$$D^{(1)} = 2r_k$$

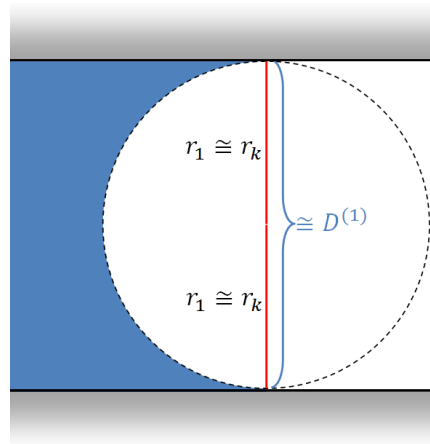


Figura 4.1: Geometria del modello  $M_1$ . Angoli di contatto nulli.

### Modello M2

In questo caso, poiché nella realtà si ha  $D < 2r_k$ , si pone invece (Figura 4.2)

$$D^{(2)} = 2r_k \left( 1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r_k}{R + d}} \right)$$

osservando che se  $R \rightarrow \infty$  allora  $D^{(2)} \rightarrow D^{(1)}$ .



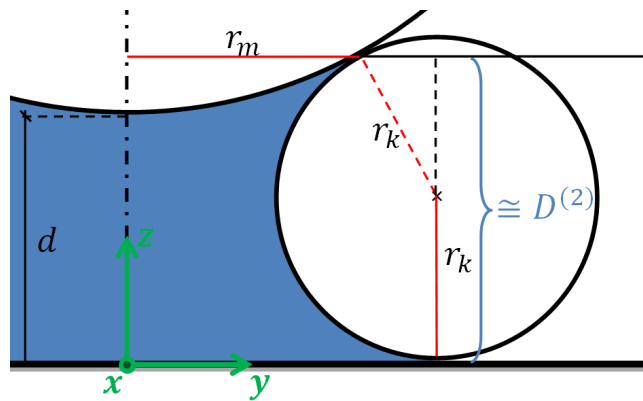


Figura 4.2: Geometria del modello  $M_2$ . Angoli di contatto nulli.

### Modello M3

Con riferimento alla Figura 4.3, anche questo modello ipotizza inizialmente  $r_2 \gg r_1$ . La proiezione sul piano  $y - z$  del profilo verticale del menisco è quindi l'arco di una circonferenza di raggio  $r_k$ . Si considera allora il seguente sistema, basato su considerazioni di natura geometrica, osservando che l'angolo  $\alpha$  che il menisco forma con la verticale è pari a quello individuato dai prolungamenti di  $R$  e  $r_m$  esterni alla sfera, perché entrambi complementari dello stesso angolo

$$\begin{cases} r_m = R \cos \alpha \\ D^{(3)} = r_k + r_k \sin \alpha \\ r_m = \sqrt{R^2 - [R - (D - d)]^2} \end{cases}$$

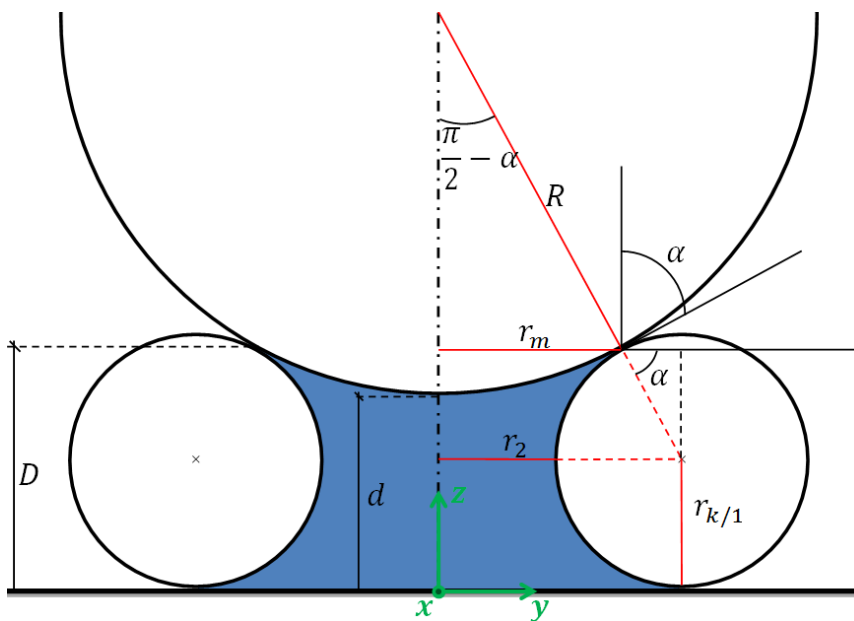


Figura 4.3: Geometria del modello  $M_3$ . Angoli di contatto nulli.

Per sostituzione, dopo alcuni passaggi si ricava

$$\sin \alpha = \frac{R + d - r_k}{R + r_k} \quad (4.6)$$

Si osservi che se  $d \leq 2r_k$  (e per i casi di nostro interesse sarà sempre così) allora  $\left| \frac{R+d-r_k}{R+r_k} \right| \leq 1$ . Per la eq. (4.6) valgono inoltre le seguenti considerazioni, comuni al modello  $M_2$ :

- se  $R \rightarrow \infty$  allora  $\sin \alpha \rightarrow 1$  e  $D^{(3)} \rightarrow D^{(1)}$
- se  $R = r_k - d$ , ossia il caso limite in cui il menisco sia tangente alla sfera a metà del suo diametro, allora correttamente si ha  $\sin \alpha = 0$  (Figura 4.4).

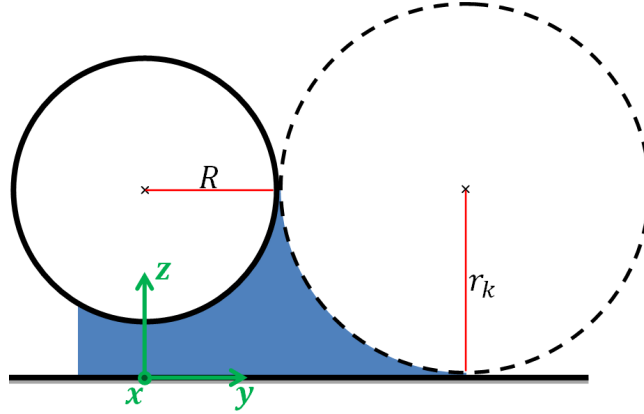


Figura 4.4: Menisco tangente alla sfera a metà del suo diametro.

Una volta noto  $\alpha$ , l'intenzione è quella di rilassare l'ipotesi  $r_2 \gg r_1$  cercando di stimare i valori  $r_1$  e  $r_2$  utilizzando la eq. (4.3). Si suppone che la proiezione sul piano  $y - z$  del profilo verticale del menisco rimanga comunque l'arco di una circonferenza ma di raggio  $r_1$ . Con riferimento alla Figura 4.3, se si considera come  $r_2$  il segmento indicato, si può scrivere

$$r_2 = (R + r_1) \sin \left( \frac{\pi}{2} - \alpha \right) - r_1 \quad (4.7)$$

Sostituendo la (4.7) nella (4.3) si ottiene un'equazione nella sola  $r_1$ . Risolta questa si ricalcola la distanza  $D$  come

$$D^{(3)} = r_1 + r_1 \sin \alpha$$

per poi procedere a valutare le forze.

Si osserverà che questa procedura ha un'incoerenza di fondo, utilizzando una certa ipotesi per ricavare il valore di  $\alpha$  e rilassando con lo stesso valore così ottenuto l'ipotesi stessa. Tuttavia, giocando le due curvature entrambe un ruolo ugualmente significativo quando il menisco diventa, per diverse ragioni come ad esempio il progressivo allontanamento delle due superfici rigide, molto sottile, si ritiene in tal modo di poter dare una prima stima del contributo di  $r_2$  che non viene considerato dai modelli  $M_1$

e  $M_2$ .

Il codice di calcolo, che avanza per incrementi successivi della distanza  $d$ , utilizza la eq. (4.6) solo per la prima iterazione mentre successivamente valuta un'espressione analoga dove al posto di  $r_k$  sostituisce il valore di  $r_1$  calcolato al passo precedente. Questa approssimazione si è resa necessaria in quanto utilizzare la eq. (4.6) tenendo conto del valore corrente di  $r_1$  ad ogni iterazione complica notevolmente le espressioni analitiche.

#### 4.2.5 Modelli a geometria approssimata. Angoli di contatto non nulli.

Si consideri ora una situazione analoga al caso visto per angoli di contatto nulli, in cui venga appunto rimossa questa ipotesi. L'idea dei tre modelli non stravolge quella già vista e ancora una volta essi si differenziano nella stima che danno della lunghezza  $D$ .

##### Modello M1

In questo primo modello si pone

$$D^{(1)} = r_k(\cos \theta_1 + \cos \theta_2)$$

##### Modello M2

Sempre osservando che in realtà  $D < 2r_k$ , si pone invece

$$D^{(2)} = r_k(\cos \theta_1 + \cos \theta_2) \left( 1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r_k}{R+d}} \right)$$

osservando che se  $R \rightarrow \infty$  allora  $D^{(2)} \rightarrow D^{(1)}$ .

##### Modello M3

Con riferimento alla Figura 4.5, anche questo modello ipotizza inizialmente  $r_2 \gg r_1$ . La proiezione sul piano  $y - z$  del profilo verticale del menisco è ancora l'arco di una circonferenza di raggio  $r_k$ . Si considera allora il seguente sistema, basato su considerazioni di natura geometrica:

$$\begin{cases} r_m = R \cos(\alpha + \theta_1) \\ D^{(3)} = r_k \cos(\theta_1 + \beta) + r_k \cos \theta_2 \\ r_m = \sqrt{R^2 - [R - (D - d)]^2} \end{cases}$$

Dopo aver sostituito l'espressione per  $D$  della seconda equazione del sistema nella prima, combinando questa con la terza si ottiene la seguente equazione nell'incognita  $\alpha$  che, in questo caso, viene risolta numericamente:

$$R^2 \cos^2(\alpha + \theta_1) - R^2 + (R - (r_k \cos(\theta_1 + \beta) + r_k \cos \theta_2) - d)^2 = 0$$

Ancora una volta, noto  $\alpha$ , l'intenzione è quella di rilassare l'ipotesi  $r_2 \gg r_1$  cercando di stimare i valori  $r_1$  e  $r_2$  utilizzando la eq. (4.3). Si suppone ancora che la proiezione

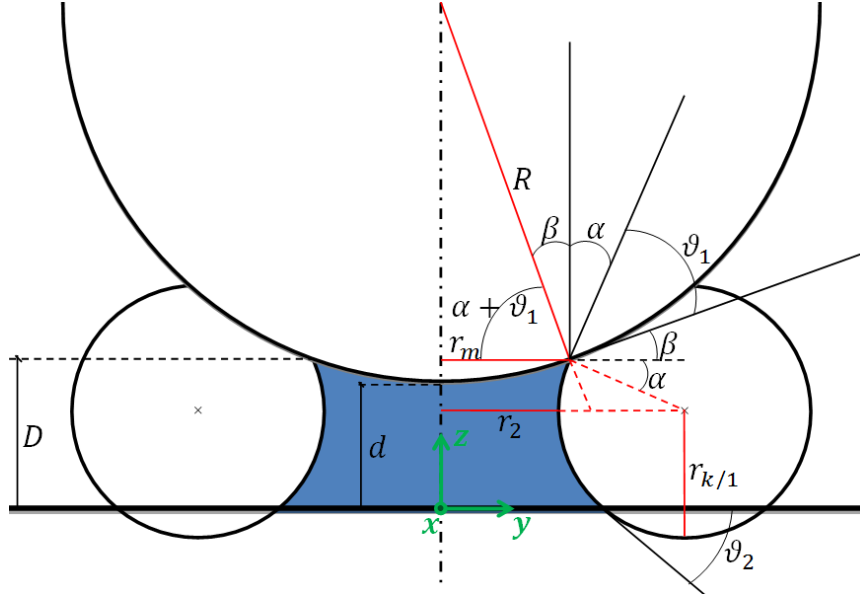


Figura 4.5: Geometria del modello  $M_3$ . Angoli di contatto non nulli.

sul piano  $y - z$  del profilo verticale del menisco rimanga l'arco di una circonferenza ma di raggio  $r_1$ . Con riferimento alla Figura 4.6, considerando come  $r_2$  il segmento indicato,  $r_2 = \overline{AD} + \overline{DB} - r_1$ , in questo caso non è stata trovata un'espressione esatta per la sua lunghezza. Non avendo informazioni sul segmento  $DB$  esso è stato posto pari a  $\overline{DB} \approx r_1 \sin \theta_1$ , osservando che questa scelta consente di ritrovare il valore esatto del caso visto per angoli di contatto nulli. Si ottiene così:

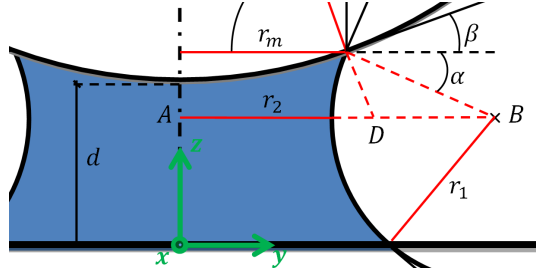


Figura 4.6: Modello  $M_3$ . Stima del raggio  $r_2$ .

$$r_2 = r_1 \left( \sin \theta_1 - \cos \theta_2 \tan \left( \frac{\pi}{2} - \alpha - \theta_1 \right) - 1 \right) + (R + d) \tan \left( \frac{\pi}{2} - \alpha - \theta_1 \right) \quad (4.8)$$

Sostituendo la (4.8) nella (4.3) si ottiene un'equazione nella sola  $r_1$ . Risolta questa si ricalcola la distanza  $D$  come

$$D^{(3)} = r_1 \cos(\theta_1 + \beta) + r_1 \cos \theta_2$$

per poi procedere a valutare le forze.

Si osserverà che questa procedura ha la stessa incoerenza della precedente, ma ancora una volta tale approssimazione si è resa necessaria in quanto altrimenti si sarebbero complicate notevolmente le espressioni analitiche, che già in questo caso non risultano compatte.

### 4.2.6 Risultati

Per i parametri fisici, nelle prove effettuate si sono considerati i seguenti valori:

$$K = 8.314 \left[ \frac{J}{Kmol} \right] \quad T = 293.15[K] \quad V = 18 \cdot 10^{-6}[m^3] \quad \gamma = 72.8 \cdot 10^{-3} \left[ \frac{J}{m^2} \right]$$

#### Tempo di calcolo

Avendo introdotto un modello che richiede una quantità maggiore di calcoli tra cui la soluzione di equazioni scalari non lineari, si ritiene opportuno anzitutto confrontare alcuni tempi di calcolo per i tre modelli  $M_1$ ,  $M_2$  e  $M_3$  a parità di iterazioni da svolgere<sup>1</sup>.

$n_{iter}$	$t_{M_1}(s)$	$t_{M_2}(s)$	$t_{M_3}(s)$
18	0.012	0.013	0.137
171	0.014	0.015	0.541
1701	0.035	0.036	4.564

Non sorprende che il nuovo modello introdotto richieda uno sforzo computazionale decisamente superiore. Tuttavia, per lo meno in questo contesto, tale incremento si ritiene accettabile e giustificato dai risultati ottenuti in termini di stima delle forze che verranno ora presentati.

#### Forza - Distanza

Si presentano ora alcuni andamenti dei contributi delle due forze di attrazione al variare della distanza tra una sfera e una superficie piatta. In generale è possibile osservare come il nuovo modello  $M_3$  si avvicini maggiormente ai risultati numerici ottenuti attraverso il codice FEM, in particolare per valori di  $R \approx 15nm$ , sia per angoli di contatto nulli (Figura 4.8) che non (Figura 4.9); in Figura 4.7 si riporta anche, per tale caso, un'immagine del menisco ottenuto nel caso di angoli di contatto nulli per diversi valori della distanza di separazione. Le maggiori differenze tra il modello  $M_3$  e la predizione del modello ad elementi finiti si riscontrano per valori di  $d$  vicini a  $d_{max}$ , ossia in prossimità della distanza alla quale il menisco non può più essere calcolato. I problemi in corrispondenza di tali valori possono essere dovuti sia a instabilità di tipo meccanico discusse più avanti, sia all'approssimazione  $r_2 \gg r_1$  sulla quale, seppur *parzialmente*, si basa anche il modello  $M_3$ , che qui non è più valida, valendo l'affermazione opposta  $r_1 \gg r_2$ . Quando  $R \approx 100nm$  le differenze tra i modelli sono meno marcate (Figura 4.10) ma ancora si può apprezzare come il modello  $M_3$  si avvicini meglio ai risultati sperimentali, in questi casi anche per valori di  $d$  vicini al limite. Il confronto con i risultati presentati in [Pakarinen et al., 2005], sempre in Figura 4.10, mostra come i due approcci e le simulazioni ad elementi finiti diano risultati molto vicini tra loro.

Per quanto riguarda la stima della forza mediante argomenti energetici, riportata in Figura 4.11, entrambe le metodologie (pressione costante e volume costante) costituiscono sì un miglioramento rispetto alla *standard approximation* ma entrambe sono più

<sup>1</sup>Per numero di iterazioni si intende  $n_{iter} = \frac{d_{max}-d_0}{\Delta d}$ , dove  $d_0$  è la distanza iniziale tra le superfici rigide,  $d_{max}$  è la distanza oltre la quale il modello  $M_3$  non è più in grado di calcolare il menisco,  $\Delta d$  è il passo di avanzamento scelto

lontane dalle simulazioni FEM rispetto a  $M_3$ . Come è ragionevole aspettarsi il caso a pressione costante ha un andamento più simile al modello  $M_3$  che non la variante a volume costante: ciò non sorprende in quanto nel modello  $M_3$  non è imposta la conservazione del volume.

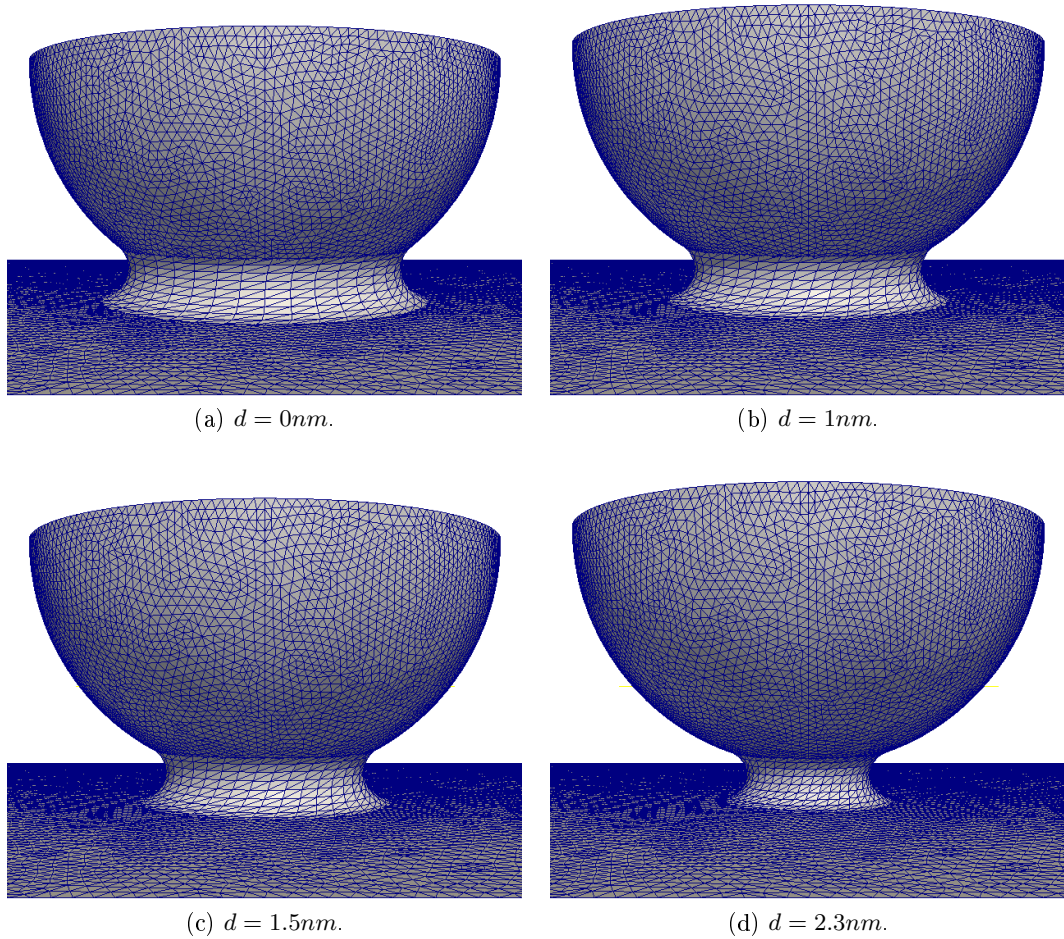


Figura 4.7: Modello FEM: Menisco tra una sfera di raggio  $R = 15\text{nm}$  e una superficie piatta per diversi valori della distanza di separazione.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli.

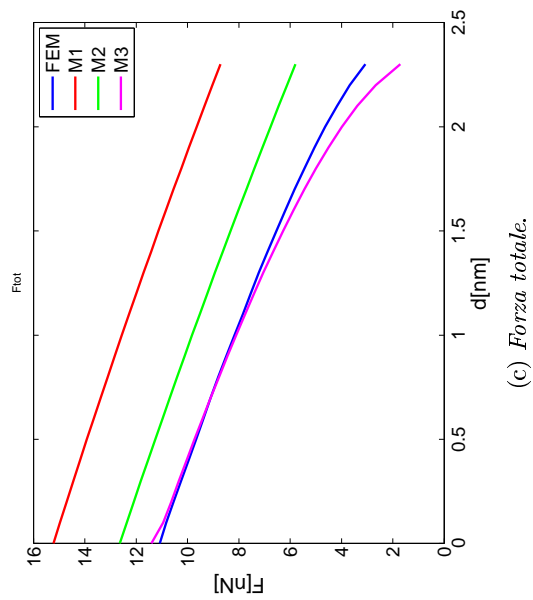
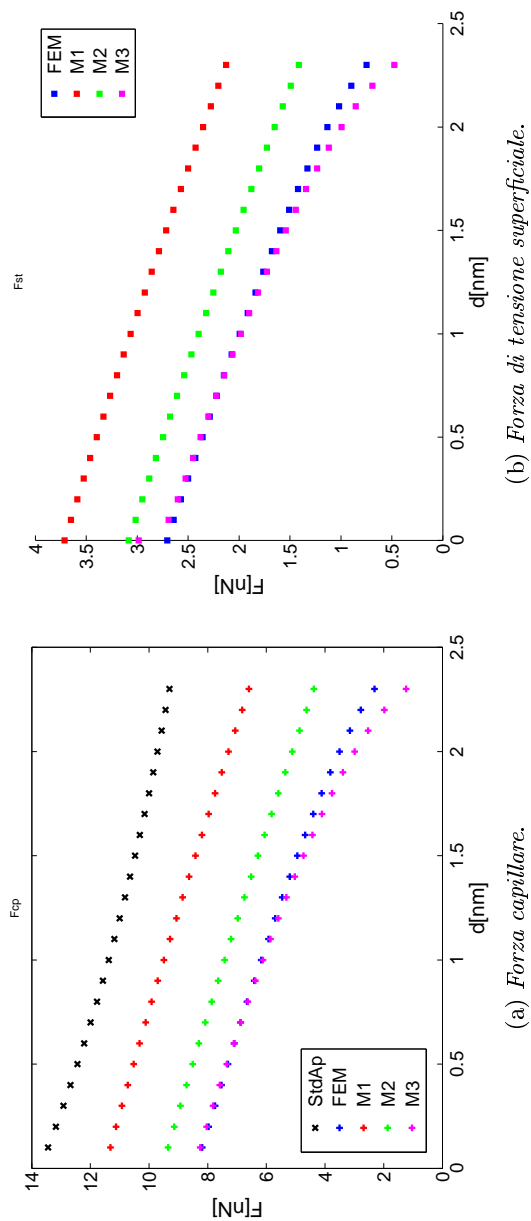
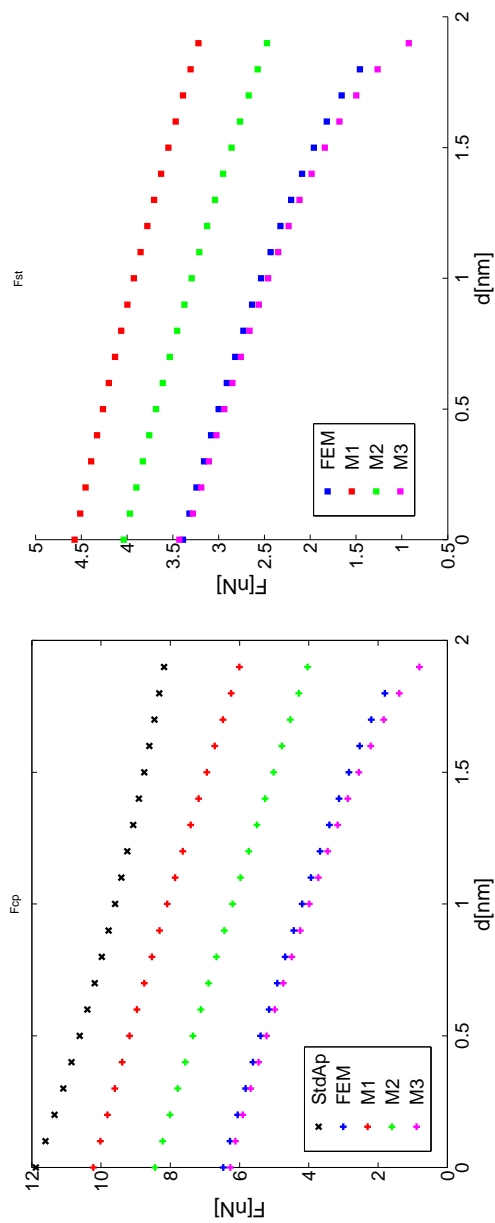
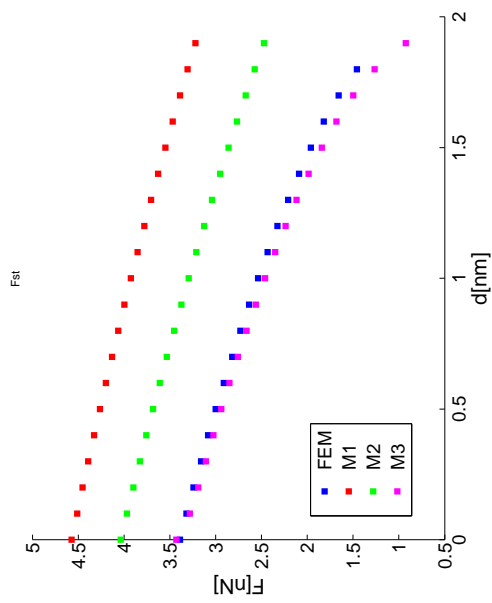


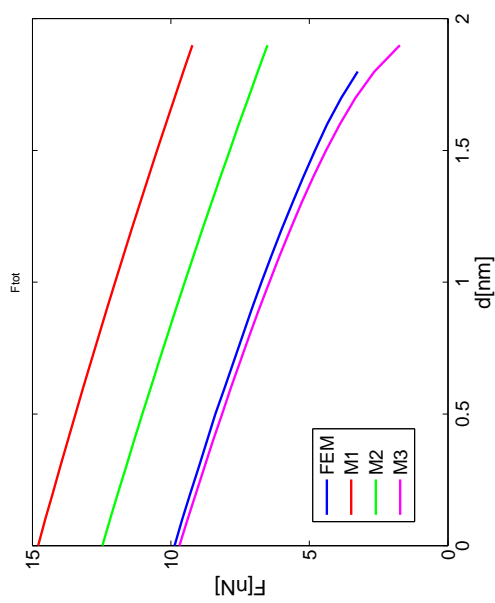
Figura 4.8: Andamento forza - distanza tra una sfera di raggio  $R = 15nm$  e una superficie piatta.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli.



(a) Forza capillare.



(b) Forza di tensione superficiale.



(c) Forza totale.

Figura 4.9: Andamento forza - distanza tra una sfera di raggio  $R = 15nm$  e una superficie piatta.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto:  $\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{6}$



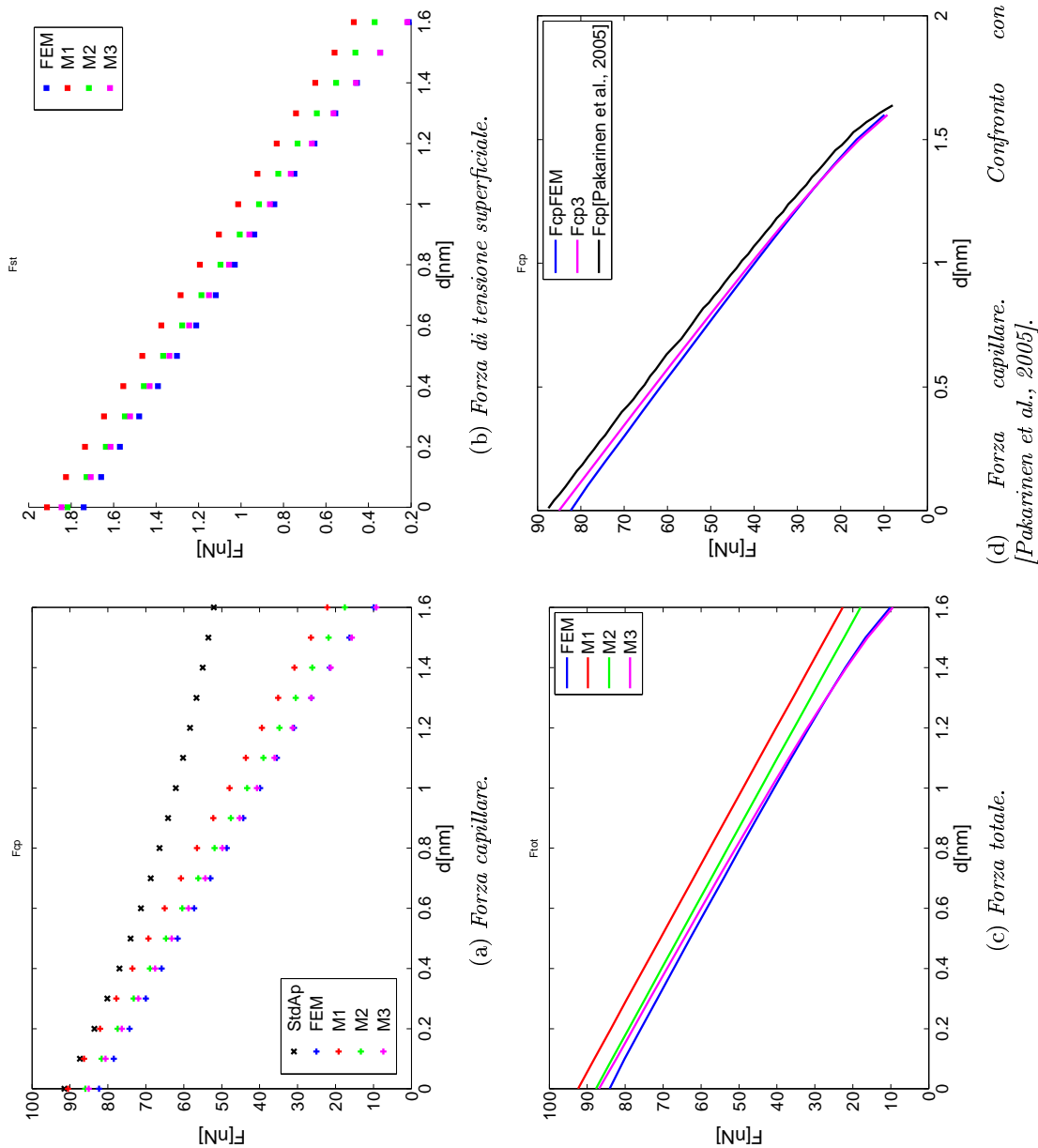
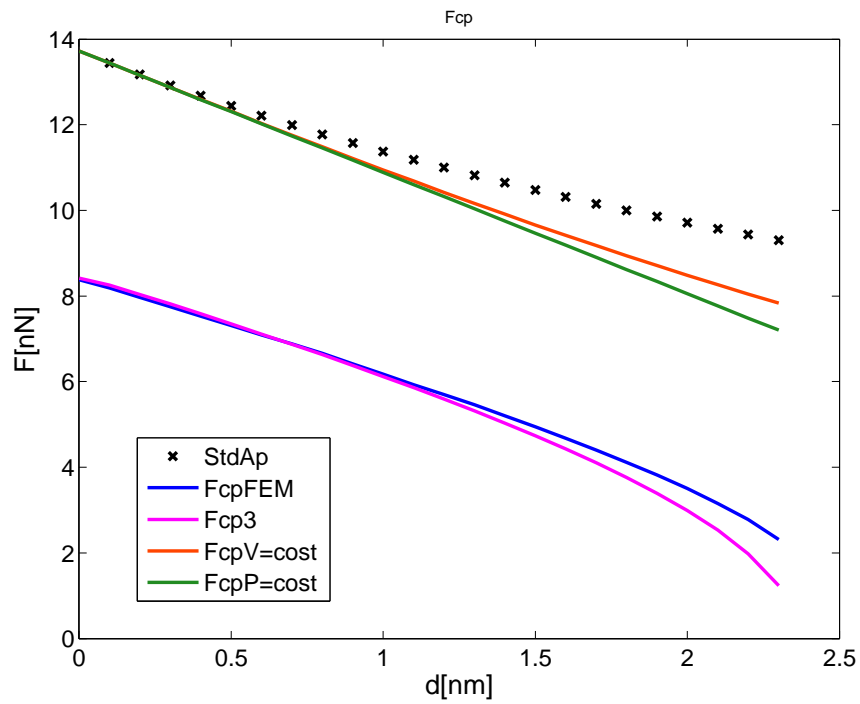


Figura 4.10: Andamento forza - distanza tra una sfera di raggio  $R = 100nm$  e una superficie piatta.  $RH = 0.6$ . Angoli di contatto nulli



(a) Angoli di contatto nulli.

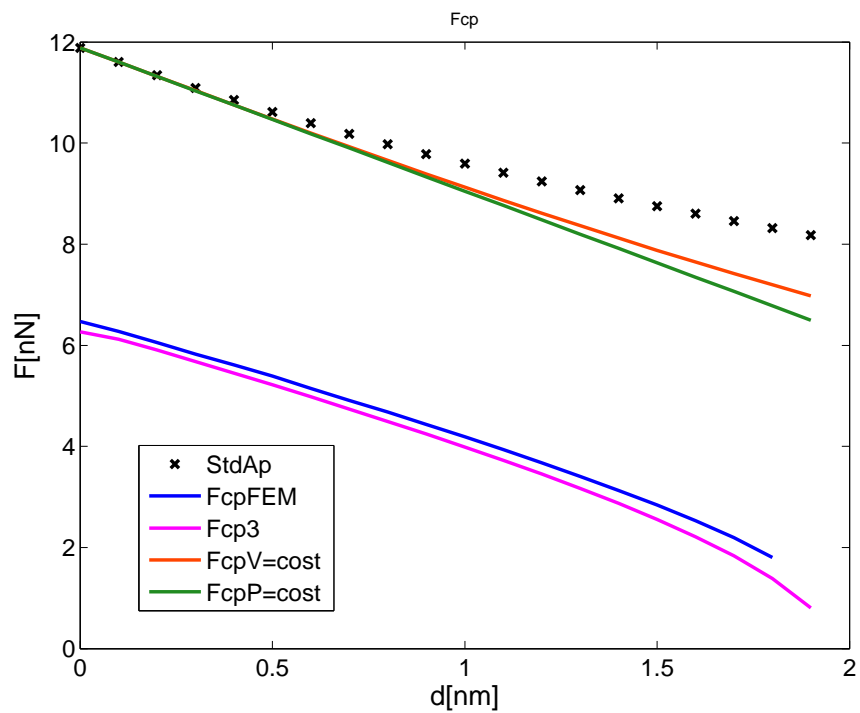
(b) Angoli di contatto:  $\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{6}$ .

Figura 4.11: Andamento forza capillare - distanza tra una sfera di raggio  $R = 15\text{nm}$  e una superficie piatta.  $RH = 0.8$ . Confronto con [de Boer e de Boer, 2007].

### Sensibilità del codice FEM - Dipendenza dal coefficiente di penalizzazione

Come descritto in precedenza (cfr. sezione 3.2.1), la geometria del menisco può essere definita da diverse configurazioni dei nodi e si possono verificare situazioni in cui gli elementi sono estremamente distorti: per questo nel codice è stato introdotto il termine di penalità e in Figura 4.12 viene indagata la stima delle forze in funzione della distanza di separazione, al variare del coefficiente di penalità<sup>2</sup>. Si può osservare come all'aumentare del coefficiente di penalità, per questo caso, si abbia una stima dell'andamento delle forze analoga ma un'intensità che diventa sempre maggiore fino all'ultimo valore considerato  $\lambda = 7 \cdot 10^{-3}$

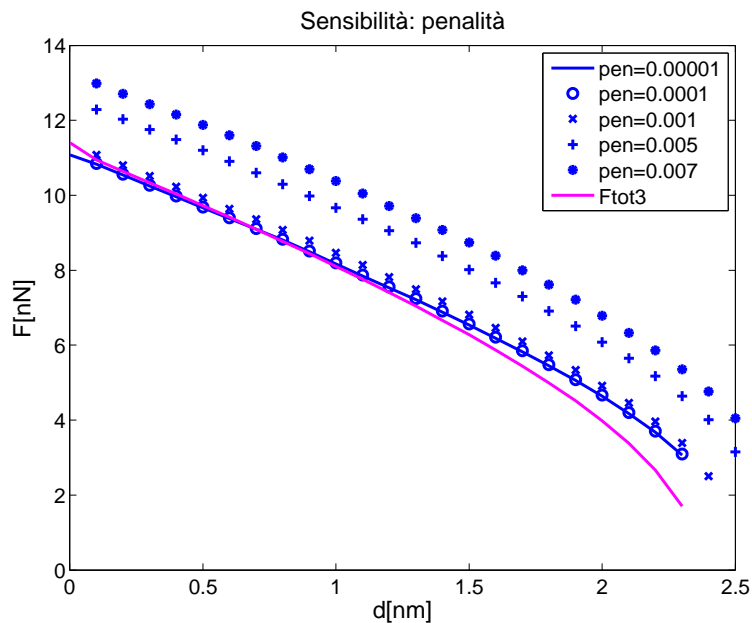


Figura 4.12: Codice FEM: Sensibilità della forza al variare del coefficiente di penalità.  $R = 15nm$ .  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli

### Sensibilità del codice FEM - Dipendenza dalla discretizzazione del menisco

Si vuole qui presentare la stima delle forze in funzione della distanza di separazione, al variare del numero di punti utilizzato nella discretizzazione della superficie del menisco. In Figura 4.13  $n_\theta$  e  $n_z$  indicano rispettivamente il numero di punti della discretizzazione in direzione tangente e verticale. Dalla figura si vede che solamente il grafico relativo alla mesh più rada si differenzia in modo apprezzabile rispetto agli altri, che risultano invece di fatto sovrapposti. Interessante è notare come il modello  $M_3$  segua inizialmente i valori delle mesh più fitte, per poi spostarsi, quando la distanza tra i due corpi si avvicina al limite, alle stime della mesh più rada.

A conclusione di questa breve analisi di sensibilità è doveroso notare che per un

<sup>2</sup>Si osservi che in tutti i grafici precedentemente presentati, e laddove non specificato diversamente, si è preso il valore di penalità pari a  $\lambda = 10^{-5}$ .

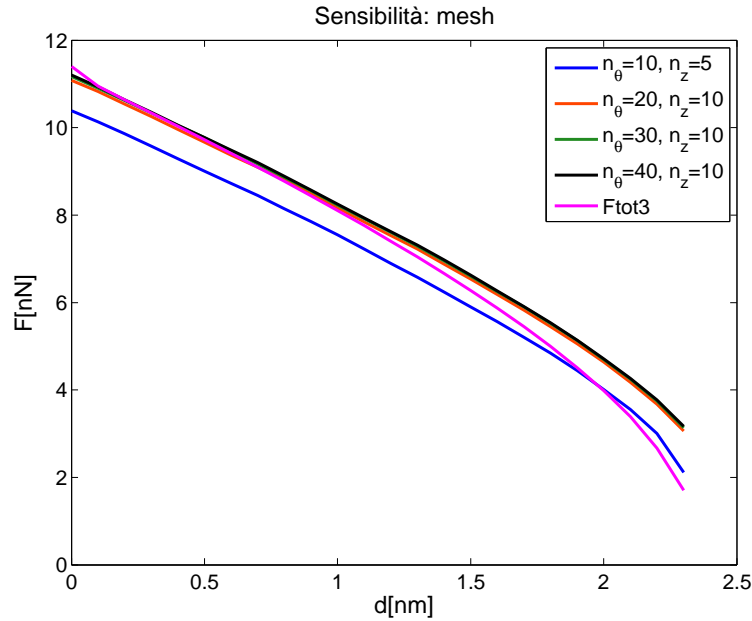


Figura 4.13: Codice FEM: Sensibilità della forza al variare della mesh del menisco.  $R = 15nm$ .  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli

eccessivo aumento del coefficiente di penalità o, alternativamente, del numero di punti della discretizzazione del menisco, il codice o non trova convergenza già alla prima iterazione oppure converge qualche iterazione per poi arrestarsi su un valore critico di  $d$  che risulta notevolmente inferiore rispetto a quelli calcolati in precedenza. Per questo si renderà necessario uno studio approfondito della meccanica di rottura del menisco, che, a quanto risulta, non è ancora completamente risolta in letteratura, al fine di poter stabilire a priori a quale distanza questo non si può più formare, in modo da sapere se le mancata convergenza del codice è dovuta a problemi di natura essenzialmente numerica o se invece rispecchia l'impossibilità fisica del menisco di formarsi a quelle condizioni. Parallelamente si svilupperà una metodologia per cercare di rimuovere dal codice il termine di penalità lavorando su raffinamenti opportuni della mesh.

### Forza - RH

Si presentano in Figura 4.14 e Figura 4.15 alcuni andamenti dei contributi delle due forze di attrazione al variare dell'umidità relativa  $RH$ , tra una sfera e una superficie piatta poste a distanza di  $0nm$  oppure  $0.3nm$ . Valgono le stesse considerazioni viste per l'andamento della forza al variare della distanza di separazione; il modello  $M_3$  meglio si avvicina alle simulazioni ad elementi finiti. Anche in questo caso inoltre, non ci sono evidenti differenze tra l'approccio dei modelli presentati a geometria approssimata e il calcolo esatto della forma del menisco di [Pakarinen et al., 2005]. Si osservi poi come rimanendo lontani da valori di  $d$  prossimi al limite, il modello  $M_3$  e le simulazioni FEM siano visivamente sempre alla stessa distanza senza mostrare zone in cui differiscano maggiormente.

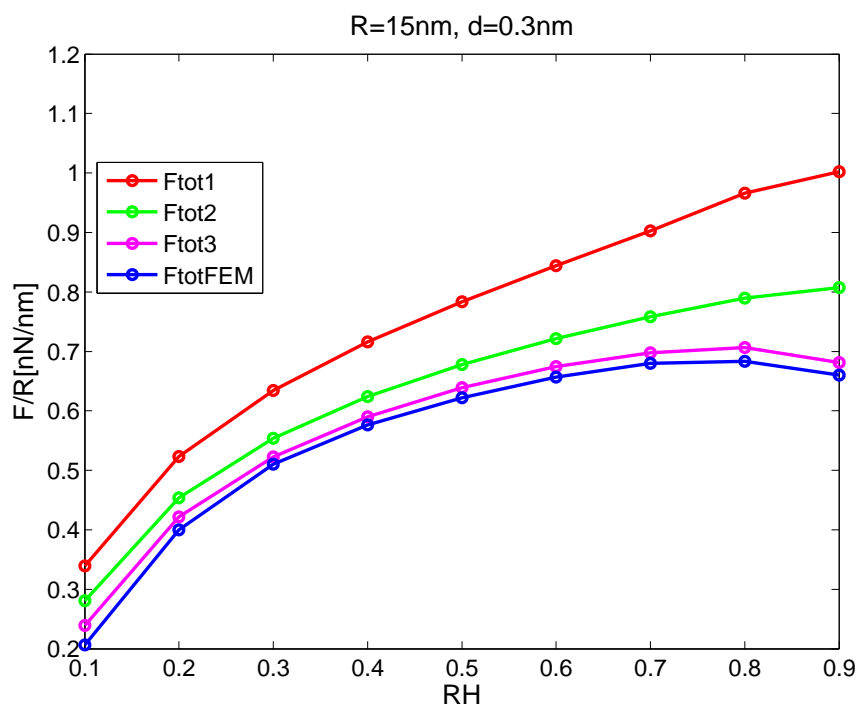
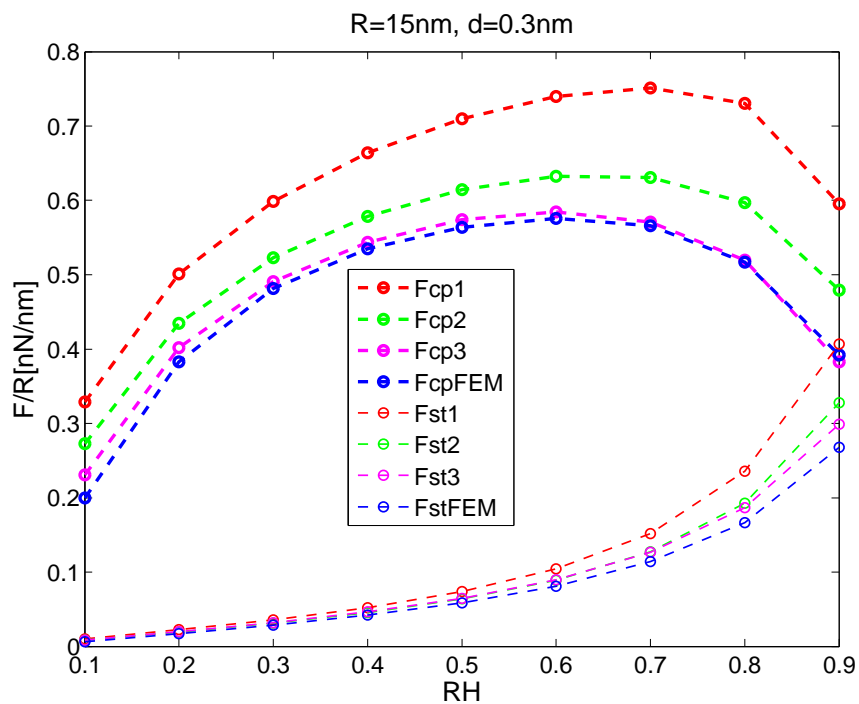
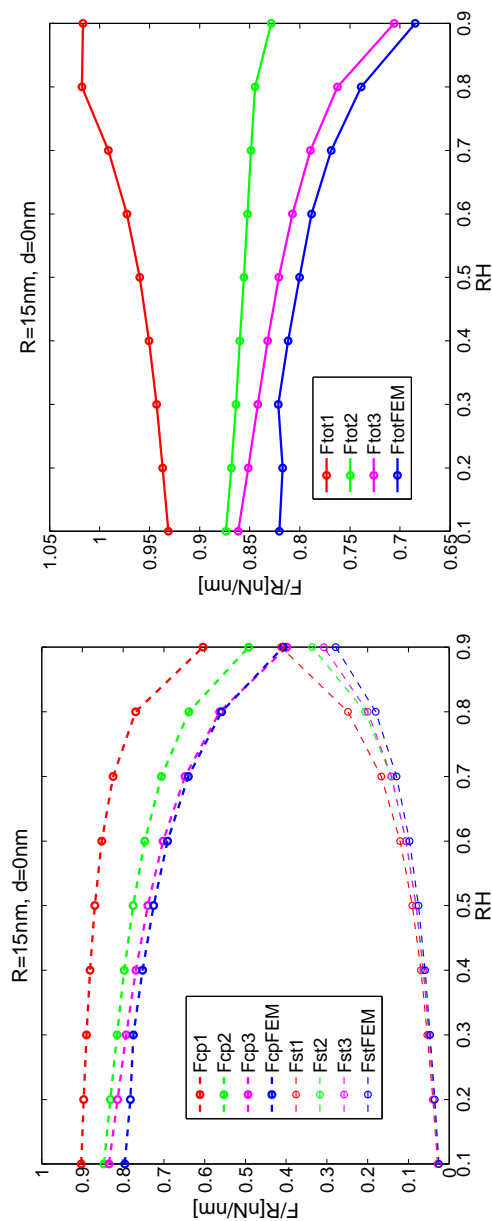
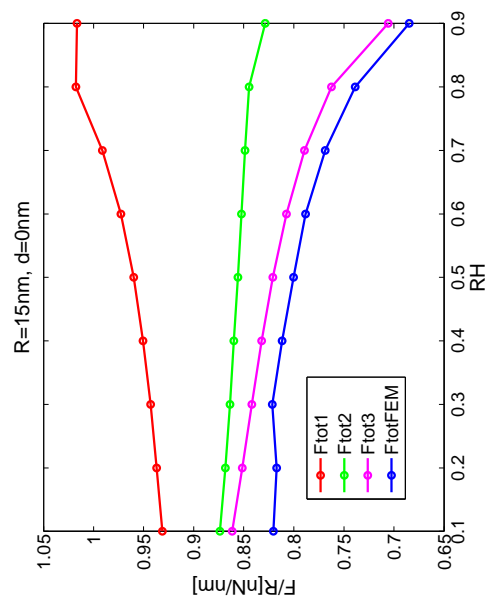


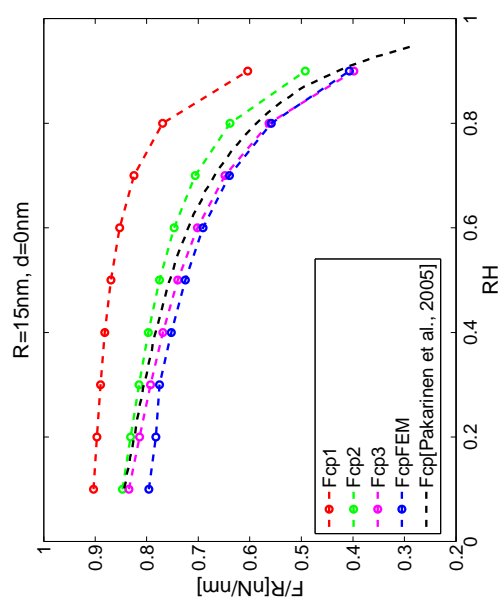
Figura 4.14: Andamento forza/raggio - RH tra una sfera di raggio  $R = 15\text{nm}$  e una superficie piatta.  $d = 0.3\text{nm}$ . Angoli di contatto nulli



(a) Forza capillare e di tensione superficiale.



(b) Forza totale.



(c) Forza capillare. Confronto con [Pakarinen et al., 2005].

Figura 4.15: Andamento forza/raggio - RH tra una sfera di raggio  $R = 15\text{nm}$  e una superficie piatta.  $d = 0\text{nm}$ . Angoli di contatto nulli

### Forza - Angoli di contatto

Si presentano in Figura 4.16 alcuni andamenti dei contributi delle due forze di attrazione al variare dell'angolo di contatto. Sui due assi sono riportati i valori dei due angoli mentre l'intensità della forza di attrazione corrispondente si legge sulla barra collocata sulla destra. Si noti come rispetto ai due modelli  $M_1$  e  $M_2$  che si comportano in maniera asimmetrica, prevedendo un picco della forza a valori  $\theta_2 \neq 0$ , il modello  $M_3$  prevede una distribuzione pressoché simmetrica rispetto alla retta  $\theta_1 = \theta_2$ .

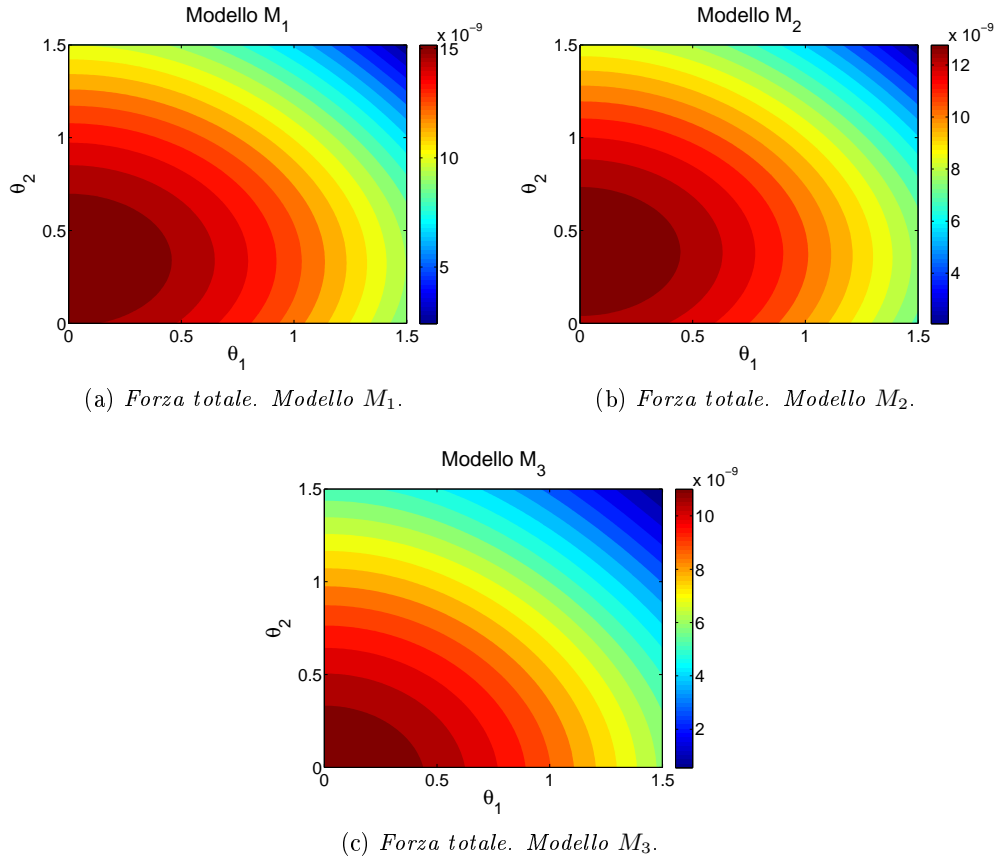


Figura 4.16: Andamento forza - angoli di contatto tra una sfera di raggio  $R = 15nm$  e una superficie piatta.  $d = 0nm$ .  $RH = 0.8$

### 4.3 Rottura del menisco

Come già osservato, un aspetto critico nella modellazione del comportamento di un menisco riguarda la determinazione della distanza alla quale, allontanando progressivamente le due superfici tra cui esso si forma, si arriva ad una situazione di instabilità che porta al suo collasso e alla conseguente distribuzione di liquido sulle due superfici. La prima approssimazione di tale distanza, vista nella *standard approximation* e pari a  $d_{cut} = 2r_k \cos \theta$ , non può essere ritenuta soddisfacente oltre che non giustificata da adeguati argomenti fisici. Un tentativo recente di studio a riguardo si trova in [Yang et al., 2010] dove gli autori, ispirati dai bilanci energetici visti in

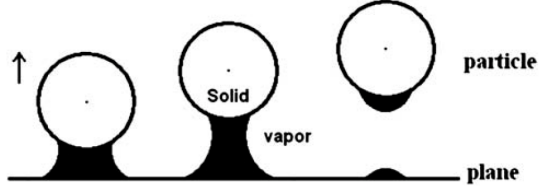


Figura 4.17: Rappresentazione schematica del collasso di un menisco tra una sfera e una superficie piana. In [Yang et al., 2010].

[de Boer e de Boer, 2007] per la stima delle forze di attrazione, hanno formulato le due seguenti condizioni limite di rottura del menisco, per il di pressione e volume costante

$$\delta W = \delta U \quad (\text{volume costante})$$

$$\delta W = dU_s - \Delta P dV = dU_s - \frac{\gamma}{r_k} dV \quad (\text{pressione costante})$$

dove  $\delta W$  rappresenta la variazione totale dell'energia di interfaccia del menisco e  $\delta U$  la variazione totale dell'energia superficiale.

#### 4.3.1 Bilancio energetico per il modello $M_3$

Per il caso di sfera su superficie piatta (Figura 4.5), utilizzando l'equazione di Young-Dupre, il lavoro  $W$  può essere riscritto come segue ([Yang et al., 2010]):

$$W = \gamma 2\pi r_1 \{x_0[\pi - (\xi + \theta_1 + \theta_2) - D]\} - 2\pi\gamma \cos \theta_1 R^2(1 - \cos \xi) - \pi\gamma \cos \theta_2 x_p^2$$

con

$$\xi = \frac{\pi}{2} - (\alpha + \theta_1)$$

$$x_0 = r_1 + r_2$$

$$x_p = r_1 + r_2 - r_1 \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta_2\right)$$

Per quanto riguarda invece l'energia  $U$  gli autori distinguono due casi: se gli angoli di contatto sono entrambi nulli si ha

$$U = \gamma P_2 V^{2/3} (1 + K)^{1/3}$$

mentre se  $\theta_1 = \theta_2 \neq 0$

$$U = \gamma\pi \left( r_m \sqrt{x_p^2 + d^2} - r_m^2 + x_p \sqrt{x_p^2 + d^2} - x_p^2 \right)$$

con

$$P_1 = [9\pi(2 - 3\cos\theta_1 + \cos^3\theta_1)]^{1/3}$$

$$P_2 = [9\pi(2 - 3\cos\theta_2 + \cos^3\theta_2)]^{1/3}$$

$$K = \left(\frac{P_1}{P_2}\right)^3$$

e  $V$ , volume del menisco, calcolato per integrazione numerica come solido di rotazione della curva che lo rappresenta nel piano  $y-z$ .



### 4.3.2 Risultati

In Figura 4.18 si riporta, per il modello  $M3$ , l'andamento della differenza

$$\Delta E = \delta W - dU_s + \frac{\gamma}{r_k} dV$$

al variare della distanza tra le due superfici rigide. La curva termina quando il modello non è più in grado di calcolare le quantità che determinano la geometria approssimata del menisco e la distanza tra le due superfici rigide è presa come punto di rottura, in corrispondenza del quale la modellazione energetica prevederebbe  $\Delta E = 0$ . Come si può notare tale valore non è raggiunto esattamente ma la modesta ampiezza dello scarto ottenuto permette di concludere che la distanza di rottura prevista dal modello  $M_3$  è in accordo con il bilancio energetico formulato. Si osserva infine che se i modelli

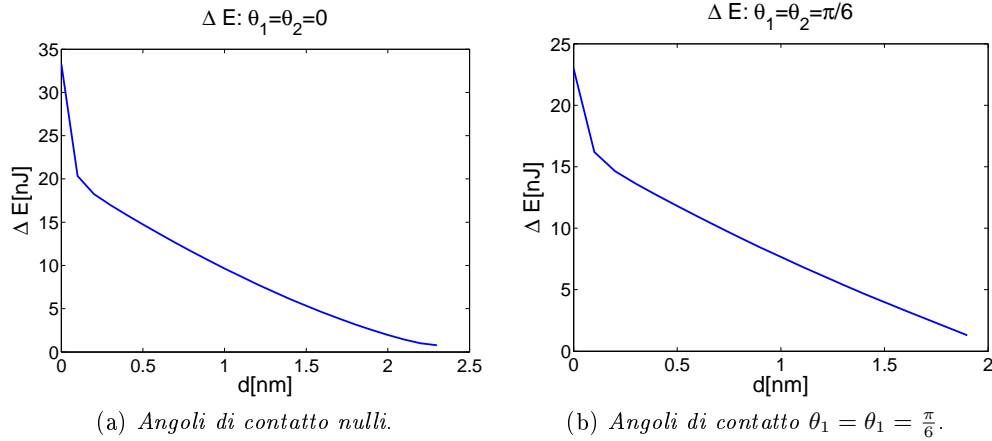


Figura 4.18: Modello  $M3$ : Andamento  $\Delta E$ -distanza tra una sfera di raggio  $R = 15nm$  e una superficie piatta.  $RH = 0.8$ .

$M_1$  e  $M_2$  prevedevano distanze di rottura molto maggiori delle simulazioni FEM e  $M_3$ , questi ultimi due sono invece, a riguardo, qualitativamente in accordo. In tutti i grafici forza - distanza visti fino ad ora, infatti, il valore massimo di separazione è, per i modelli  $M_i$  l'ultimo per cui il modello  $M3$  calcola un menisco e per le simulazioni FEM l'ultimo per cui il codice arriva a convergenza: i due valori sono sempre molto vicini e differiscono al più di un incremento a parità di passo di avanzamento spaziale nel processo di allontanamento della sfera dalla superficie.

### 4.3.3 Simulazione FEM della rottura di menisco

Attraverso il codice ad elementi finiti si è, come detto, trovata una stima della distanza di rottura del menisco: essa è stata posta pari a quel valore di separazione tra le superfici rigide a partire dal quale, nel processo di progressivo allontanamento dell'asperità superiore da quella inferiore, si assiste ad una mancata convergenza dello schema di calcolo. L'obiettivo successivo è stato quello di studiare se e come l'algoritmo potesse modellare il comportamento fisico del menisco durante la rottura o, per lo meno, la sola conseguente formazione di due gocce sulle asperità tra le quali esso si era formato.

La modifica fisica più evidente tra la formazione del menisco e quella delle gocce è essenzialmente un cambio di segno della pressione che non agisce più con direzione opposta alla normale ma diventa ad essa concorde. Dal momento però che la eq. (2.9) e la eq. (2.10) devono valere per una generica interfaccia liquido - aeriforme, ci deve essere un parametro fisico che varia tra quelli che vengono ritenuti i dati del problema e giustifichi l'inversione di segno nella pressione: l'unico che può giocare questo ruolo è  $RH$ , che nella formazione dei menischi viene sempre considerato  $RH < 1$  e, nel caso dell'acqua, assume il significato di umidità relativa. La forma più generale però dell'equazione di Kelvin (si veda [Adamson e Gast, 1997]) è la seguente:

$$RT \log \left( \frac{p}{p_0} \right) = \frac{\gamma_L V}{r_k} \quad (4.9)$$

dove  $p$  è la pressione sulla superficie curva,  $p_0$  la pressione di vapore normale del liquido e gli altri termini hanno lo stesso significato visto per la eq. (2.9). Per una goccia dunque, o più in generale per una interfaccia a curvatura media positiva, si ha che la pressione di vapore è inferiore alla pressione sulla superficie: di conseguenza si ottiene che  $r_k > 0$  e la pressione di Laplace risulta diretta secondo una normale uscente dalla regione liquida.

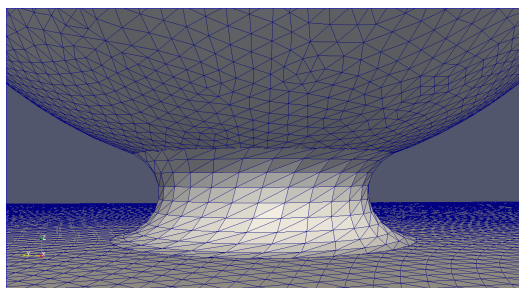
### Simulazione FEM della formazione di due gocce

Per poter utilizzare il codice ad elementi finiti occorre trovare una stima a priori del rapporto  $\frac{p}{p_0}$  che possa fornire il valore della pressione di Laplace che deve essere nota. Una ricerca bibliografica non ha consentito di trovare una legge per determinare tale rapporto conducendo solo a tabelle di valori per diverse dimensioni di una generica goccia d'acqua di raggio assegnato.

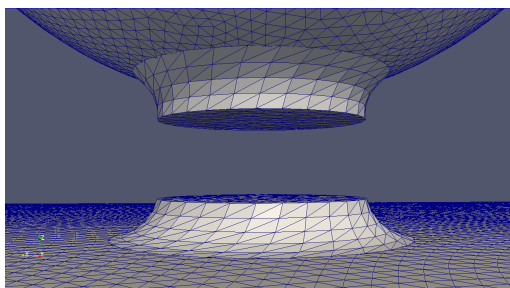
L'idea è stata allora quella di utilizzare il codice per simulare il collasso del menisco imponendo una pressione di vapore relativa, successiva all'istante di rottura, che portasse alla formazione di due gocce in modo tale da ottenere un volume finale complessivo il più vicino possibile a quello del menisco nell'ultima configurazione di equilibrio calcolata. Il codice è stato così strutturato:

- una volta raggiunta la distanza tra le superfici rigide oltre la quale non si ha più convergenza (Figura 4.19(a)), dopo aver calcolato il volume del menisco ottenuto, esso viene diviso all'altezza del punto dove il raggio di curvatura  $r_2$  risulta minimo, nelle due parti inferiore e superiore;
- ciascuna delle due parti in cui il menisco è stato separato viene chiusa in sommità con nuovi elementi della mesh in modo da costituire due regioni chiuse distinte (Figura 4.19(b));
- il valore di  $RH$  viene aggiornato e di conseguenza l'entità della pressione agente sulla membrana;
- sulla configurazione così definita viene riutilizzata la routine per il calcolo del menisco fino ad ottenere una soluzione stabile;
- si confronta il volume delle due gocce ottenute con quello del menisco prima della rottura e se non sono sufficientemente vicini si ripete l'operazione con un nuovo valore di  $RH$ .

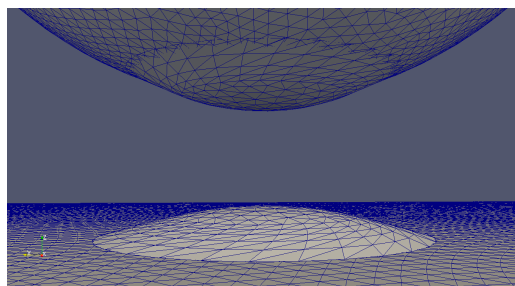
Nonostante il risultato ottenuto per il valore di pressione *ottimo* possa sembrare visivamente soddisfacente (in Figura 4.19(c) si mostra un esempio per il caso di sfera su superficie piatta), il residuo definito nella eq. (3.11) non scende mai, nelle prove effettuate, a valori di tolleranza vicini a quelli utilizzati per la formazione del menisco. Questo dato, unito alla constatazione che in letteratura non si sia trovato un metodo di determinazione della pressione a priori, lascia supporre che il problema così formulato sia mal posto e che non sia possibile modellare la formazione delle gocce con un codice che necessiti a priori del valore di pressione iniziale. Se si abbassa infatti la tolleranza ad un valore pari a quello utilizzato nei menischi, una volta raggiunto il minimo a cui la Figura 4.19(c) si riferisce, le due gocce continuano ad aumentare il proprio volume con una conseguente rapida crescita del residuo lasciando supporre che il valore di pressione imposto non sia ancora quello reale e che anzi, come detto, la formulazione del problema in questi termini non sia adeguata.



(a) *Ultimo menisco calcolato.*



(b) *Partizione del menisco nelle due componenti superiore e inferiore.*



(c) *Configurazione finale delle due gocce, ottenuta per  $tol = 0.1$ .*

Figura 4.19: Codice FEM: Modellazione del processo di collasso di un menisco in due gocce tra una sfera di raggio  $R = 15nm$  e una superficie piatta.

## 4.4 Sfera su sfera

Il secondo caso test considerato, sempre di tipo assialsimmetrico, riguarda lo studio della forza di attrazione capillare tra due superfici rigide di forma sferica.

Rispetto alla precedente, questa seconda configurazione risulta meno studiata in letteratura e non sono stati trovati per essa modelli predittivi delle forze basati su argomentazioni energetiche.

### 4.4.1 Approssimazione standard

Per questo secondo caso esiste una variante della eq. (4.2) nella quale, nell'espressione della forza, si sostituisce al raggio della sfera un'opportuna grandezza equivalente

$$R_{eq} = \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right)^{-1} \stackrel{R_1=R_2}{=} \frac{R}{2}$$

La *standard approximation* diventa dunque:

$$F = \begin{cases} 4\pi R_{eq} \gamma \cos \theta \left( 1 + \frac{d}{2r_k \cos \theta} \right)^{-1} & \text{se } d < d_{cut} \\ 0 & \text{se } d > d_{cut} \end{cases} \quad (4.10)$$

### 4.4.2 Modelli a geometria esatta

Anche lo studio presentato in [Pakarinen et al., 2005] è limitato al solo caso di sfera su superficie piatta. Si è voluto qui estendere lo stesso metodo alla nuova geometria per averlo nuovamente come termine di paragone, sia per quanto riguarda la stima delle forze che la distanza di separazione alla quale il menisco non può più essere calcolato. L'idea è sostanzialmente identica a quella già descritta nel paragrafo 4.2.3. Riguardo l'implementazione, sviluppata in codice *Matlab*<sup>®</sup>, si vuole sottolineare che è stato necessario introdurre una tolleranza sull'angolo di attacco inferiore in quanto il soddisfacimento esatto del suo valore non consentiva al codice di convergere e calcolare il profilo del menisco. Quest'ultimo, si ricorda, viene infatti ottenuto allineando degli elementi di linea infinitesimi, collocando quello iniziale a contatto con una delle due superfici rigide (nel nostro caso, arbitrariamente, quella superiore) in modo da soddisfare in maniera esatta l'angolo desiderato. Quando il profilo corrente interseca poi l'altra superficie rigida, l'angolo di contatto sarà determinato dalla eq. (4.4), da cui si ricava la pendenza dell'ultimo elemento aggiunto al profilo. Se l'angolo ottenuto è pari a quello desiderato la procedura si arresta, altrimenti occorre scegliere un nuovo punto di partenza sulla superficie superiore e ricostruire un nuovo profilo. La tolleranza al soddisfacimento dell'angolo di contatto è probabilmente influenzata dalla procedura che sceglie il punto di partenza per il nuovo profilo che potrebbe saltare valori in grado di garantire un risultato migliore. Nel nostro caso per il primo menisco costruito viene scelto un punto di partenza ad una quota  $z$  sufficientemente bassa per poi alzare progressivamente tale valore fino a quando il profilo ottenuto non soddisfa le condizioni volute. La tolleranza per il soddisfacimento dell'angolo di contatto inferiore è stata posta pari a  $0.05 \text{ rad} \approx 2.8^\circ$  per angoli di contatto non nulli e di  $0.25 \text{ rad} \approx 11.4^\circ$  per  $\theta_i = 0$ . In [Pakarinen et al., 2005] non si fa riferimento a tale questione: probabilmente essa è stata omessa insieme a tutti gli altri dettagli implementativi riguardanti l'integrazione delle equazioni differenziali.

### 4.4.3 Modelli a geometria approssimata. Angoli di contatto nulli.

Di seguito vengono presentati tre modelli che, approssimando la conformazione del menisco, permettono la stima dell'entità delle forze. Tali modelli si possono ritenere l'estensione alla nuova configurazione geometrica di quelli visti in precedenza. Per questo i primi due, proposti in [Arosio, 2009], verranno ancora indicati con  $M_1$  e  $M_2$  mentre il terzo,  $M_3$  viene presentato per la prima volta in questo lavoro.

Si considerano dunque due sfere (Figura 4.20), in generale di raggio diverso  $R_1$  (sfera superiore) e  $R_2$  (sfera inferiore), separate tra loro da una distanza  $d$ . Il menisco è a contatto con le due sfere e assume sulle superfici un profilo circolare di raggio  $r_{m1}$  per la sfera superiore e  $r_{m2}$  per quella inferiore. Per calcolare le forze di adesione è sufficiente conoscere  $r_{m1}$ : una volta noto, infatti, è immediato da esso calcolare le grandezze necessarie:

$$A_{xy} = \pi r_{m1}^2 \qquad L = 2\pi r_{m1} \qquad (4.11)$$

I tre modelli si differenziano nella stima che forniscono per la distanza  $D$  tra i due punti di attacco del menisco sulle sfere, dalla quale è possibile ricavare  $r_{m(i)}$  osservando che

$$d + R_1 - \sqrt{R_1^2 - r_{m1}^2} + R_2 - \sqrt{R_2^2 - r_{m2}^2} = D \qquad (4.12)$$

Nella eq. (4.12) i modelli  $M_1$  e  $M_2$  utilizzeranno la seguente approssimazione

$$r_{m1} = r_{m2} \qquad (4.13)$$

#### Modello M1

Questo primo modello considera ancora come valore di  $D$  quello che si avrebbe tra due superfici piate, trascurando la curvatura orizzontale.

$$D^{(1)} = 2r_k$$

#### Modello M2

In questo caso, osservando ancora che nella realtà si ha  $D < 2r_k$ , con considerazioni analoghe a quelle viste per il caso di una sfera in prossimità di una superficie piate (cfr. sezione 4.2.4), si introducono le seguenti quantità (sempre con riferimento alla Figura 4.20)

$$y_1 = 2r_k \left(1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r_k}{R_1 + d}}\right) \qquad y_2 = 2r_k \left(1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r_k}{R_2 + d}}\right)$$

La distanza  $D$  è pari a

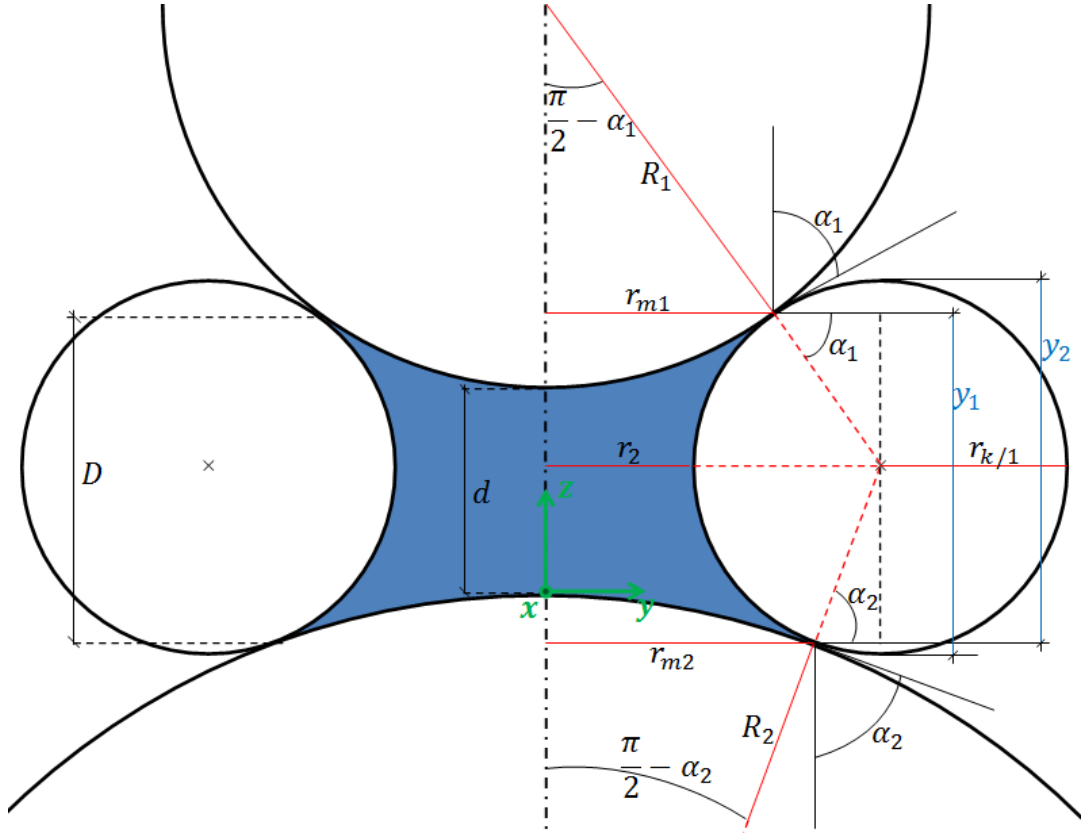
$$D = 2r_k - (2r_k - y_1) - (2r_k - y_2)$$

Si ottiene così

$$D^{(2)} = 2r_k \left(1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r_k}{R_1 + d}} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r_k}{R_2 + d}}\right)$$

Si osserva che se  $R_2 \rightarrow \infty$  si ritrova lo stesso risultato visto per il caso di una sfera su un piano.

## Modello M3

Figura 4.20: Geometria del modello  $M_3$ . Angoli di contatto nulli.

Con riferimento alla Figura 4.20, anche questo modello ipotizza inizialmente  $r_2 \gg r_1$ . La proiezione sul piano  $y - z$  del profilo verticale del menisco è quindi ancora l'arco di una circonferenza di raggio  $r_k$ . Si considera allora il seguente sistema, basato su considerazioni di natura geometrica e senza l'ipotesi (4.13):

$$\begin{cases} r_k \cos \alpha_1 + R_1 \cos \alpha_1 = r_k \cos \alpha_2 + R_2 \cos \alpha_2 \\ R_1 \cos \alpha_1 = r_{m1} \\ R_2 \cos \alpha_2 = r_{m2} \\ D^{(3)} = 2r_k - (2r_k - y_1) - (2r_k - y_2) \\ y_1 = r_k + r_k \sin \alpha_1 \\ y_2 = r_k + r_k \sin \alpha_2 \\ d + R_1 - \sqrt{R_1^2 - r_{m1}^2} + R_2 - \sqrt{R_2^2 - r_{m2}^2} = D \end{cases} \quad (4.14)$$

Combinando opportunamente le diverse equazioni si riesce a scriverne una nella sola incognita  $\cos \alpha_1$  la cui espressione, seppur non compatta, consente di trovare il valore di  $\alpha_1$  e conseguentemente di  $\alpha_2$ . Una volta noti gli angoli, l'intenzione è ancora quella di rilassare l'ipotesi  $r_2 \gg r_1$  cercando di stimare i valori  $r_1$  e  $r_2$  utilizzando la eq. (4.3). Si suppone che la proiezione sul piano  $y - z$  del profilo verticale del menisco rimanga comunque l'arco di una circonferenza ma di raggio  $r_1$ . Con riferimento alla

Figura 4.20, se si considera il triangolo rettangolo di ipotenusa  $R_1 + r_1$  e cateto minore  $(r_2 + r_1)$ , si può scrivere

$$r_2 = (R_1 + r_1) \sin\left(\frac{\pi}{2} - \alpha_1\right) - r_1 \quad (4.15)$$

Sostituendo la (4.15) nella (4.3) si ottiene un'equazione nella sola  $r_1$ . Risolta questa si ricalcola la distanza  $D$  come

$$D^{(3)} = 2r_1 - (2r_1 - y_1) - (2r_1 - y_2)$$

questa volta con

$$y_1 = r_1 + r_1 \sin \alpha_1 \qquad y_2 = r_1 + r_1 \sin \alpha_2$$

per poi procedere a valutare le forze riconsiderando la eq. (4.12).

Si osserverà che questa procedura non è nuovamente corretta dal punto di vista logico in quanto utilizza l'ipotesi  $r_2 \gg r_1$  per ricavare il valore di  $\alpha_i$  dalla (4.14) per poi rilassarla nella calcolo delle forze andando a stimare i due valori di  $r_1$  e  $r_2$ . Ancora una volta il miglioramento della capacità predittiva giustificherà inizialmente tale incongruenza.

Il codice di calcolo, che allontana progressivamente la sfera superiore da quella inferiore a partire dalla distanza  $d = 0$ , utilizza, per il calcolo di  $\alpha_i$ , il sistema (4.14) solo per la prima iterazione mentre successivamente ne considera uno analogo dove al posto di  $r_k$  viene sostituito il valore di  $r_1$  calcolato al passo precedente.

#### 4.4.4 Modelli a geometria approssimata. Angoli di contatto non nulli.

Si consideri ora una situazione analoga al caso visto per angoli di contatto nulli, in cui venga appunto rimossa questa ipotesi. I tre modelli si differenziano nuovamente nella stima che danno della lunghezza  $D$ .

##### Modello M1

In questo primo modello si pone

$$D^{(1)} = r_k(\cos \theta_1 + \cos \theta_2)$$

##### Modello M2

In analogia a quanto già mostrato, tale modello definisce la seguente

$$D^{(2)} = r_k(\cos \theta_1 + \cos \theta_2) \left(1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r_k}{R_1 + d}} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r_k}{R_2 + d}}\right)$$

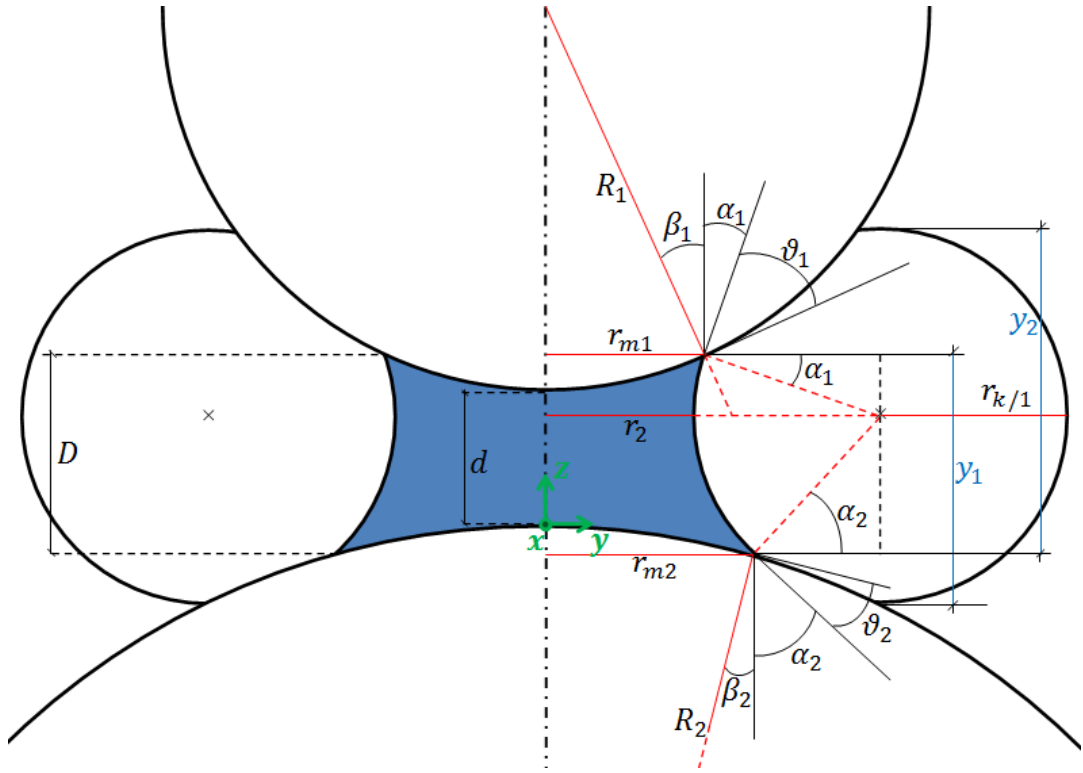


Figura 4.21: Geometria del modello  $M_3$ . Angoli di contatto non nulli.

### Modello M3

Con riferimento alla Figura 4.21, sulla base di considerazioni più volte introdotte, si perviene al seguente sistema:

$$\begin{cases} R_1 \cos(\alpha_1 + \theta_1) + r_k \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta_1 - \beta_1\right) = R_2 \cos(\alpha_2 + \theta_2) + r_k \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta_2 - \beta_2\right) \\ R_1 \cos(\alpha_1 + \theta_1) = r_{m1} \\ R_2 \cos(\alpha_2 + \theta_2) = r_{m2} \\ D^{(3)} = 2r_k - (2r_k - y_1) - (2r_k - y_2) \\ \left. \begin{aligned} y_1 &= r_k + r_k \sin\left(\frac{\pi}{2} - \theta_1 - \beta_1\right) \\ y_2 &= r_k + r_k \sin\left(\frac{\pi}{2} - \theta_2 - \beta_2\right) \end{aligned} \right\} \\ d + R_1 - \sqrt{R_1^2 - r_{m1}^2} + R_2 - \sqrt{R_2^2 - r_{m2}^2} = D \end{cases} \quad (4.16)$$

Dalla complementarità di angoli uguali si ha che

$$\frac{\pi}{2} - \theta_i - \beta_i = \alpha_i \quad i = 1, 2$$

Risolvendo il sistema 4.16 si ottiene il valore di  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ . Ancora una volta, noti gli angoli  $\alpha_i$ , l'intenzione è quella di rilassare l'ipotesi  $r_2 \gg r_1$ . Con riferimento alla Figura 4.22, considerando come  $r_2$  il segmento indicato,  $r_2 = \overline{AD} + \overline{DB} - r_1$ , in questo caso non è stata trovata un'espressione esatta per la sua lunghezza. Ancora una volta, non avendo informazioni sul segmento DB esso è stato posto pari a  $\overline{DB} \approx r_1 \sin \theta_1$ ,



osservando che questa scelta consente di ritrovare il valore esatto trovato per angoli di contatto nulli. Si ottiene così:

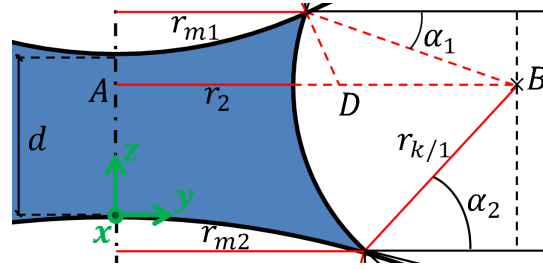


Figura 4.22: Modello  $M_3$ . Stima del raggio  $r_2$ .

$$r_2 = wr_1 + q \quad (4.17)$$

con

$$w = \sin \theta_1 - \sin \alpha_2 \tan \left( \frac{\pi}{2} - \alpha_1 - \theta_1 \right) - 1$$

$$q = R_1 + d + R_2 - R_2 \sin(\alpha_2 + \theta_2) \tan \left( \frac{\pi}{2} - \alpha_1 - \theta_1 \right)$$

Sostituendo la (4.17) nella (4.3) si ottiene un'equazione nella sola  $r_1$ . Risolta questa si ricalcola la distanza  $D$  come

$$D^{(3)} = 2r_1 - (2r_1 - y_1) - (2r_1 - y_2)$$

questa volta con

$$y_1 = r_1 + r_1 \sin \alpha_1 \quad y_2 = r_1 + r_1 \sin \alpha_2$$

#### 4.4.5 Risultati

Per questo secondo caso test si sceglie di non riproporre l'approfondita esposizione vista precedentemente in quanto molte considerazioni sarebbero, di fatto, ripetute. Per questo verranno solo mostrati di seguito alcuni grafici relativi agli andamenti forza - distanza di separazione con maggiore attenzione per il confronto rispetto ai risultati ottenuti attraverso la modellazione a geometria esatta.

Per le simulazioni effettuate si sono considerati gli stessi parametri fisici già visti per il caso di sfera su superficie piatta.

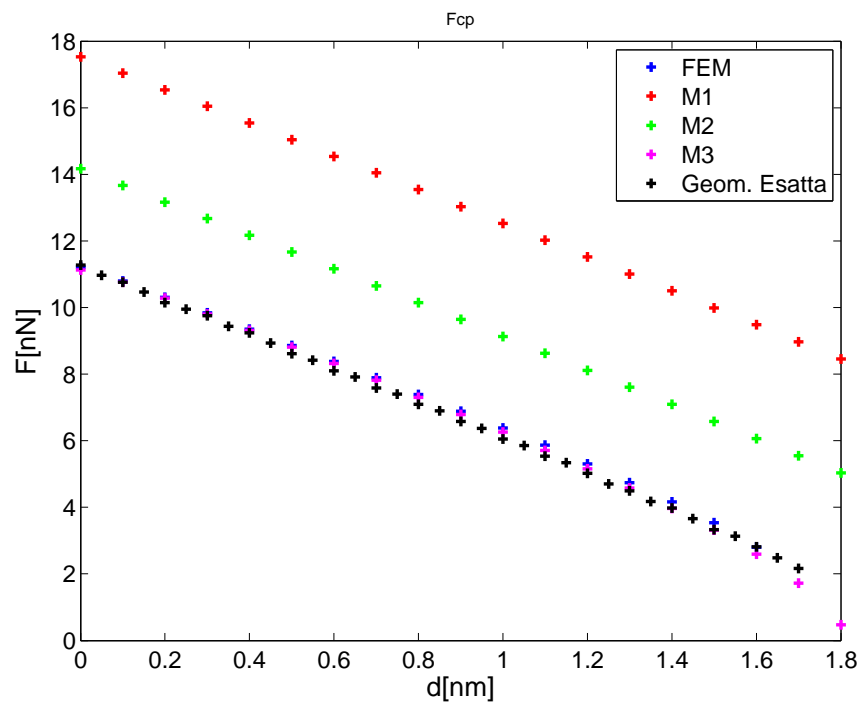
#### Forza - Distanza. Angoli di contatto non nulli

In generale è possibile osservare come, anche per questa configurazione, il modello  $M_3$  si avvicini maggiormente ai risultati numerici ottenuti attraverso il codice FEM, in particolare per valori di  $R_i$  nell'ordine dei nanometri (Figura 4.23, Figura 4.24 e Figura 4.25). Si può inoltre apprezzare come anche l'andamento previsto dal codice a geometria esatta sia in accordo ottimale sia con il modello  $M_3$  che con le simulazioni ad elementi finiti. In questi casi tale accordo si mantiene anche in corrispondenza di valori di distanza tra i corpi rigidi prossimi a quelli limite di rottura per il menisco.

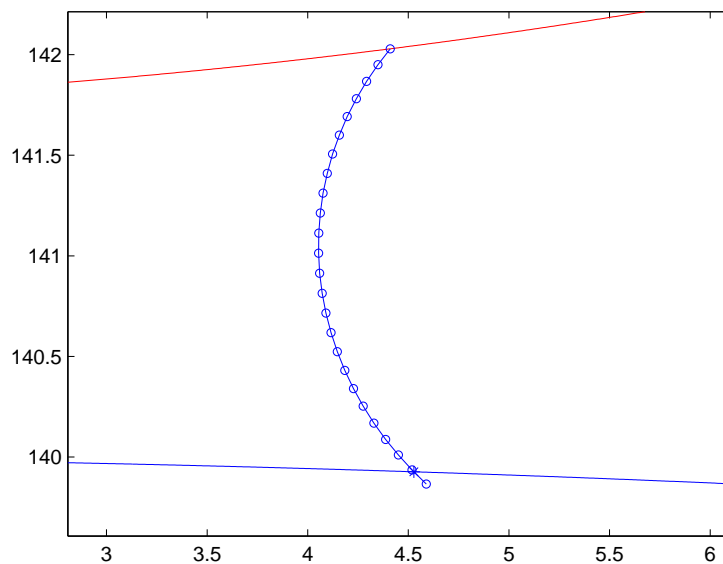
Per ciascuno dei tre casi è riportato, oltre all'andamento delle forze, anche il profilo *esatto* tracciato in prossimità di tale distanza: si noti come l'approssimazione del modello  $M_3$ , che considera il profilo come l'arco di un'unica circonferenza di raggio  $r_k$ , sia qui sempre soddisfacente.

#### **Forza - Distanza. Angoli di contatto nulli**

Come mostrano i grafici in Figura 4.26 e Figura 4.27, anche in questi casi il nuovo modello  $M_3$  si avvicina maggiormente ai risultati numerici ottenuti attraverso il codice FEM e quello a geometria esatta. Interessante è notare come per valori di  $d$  vicini a  $d_{max}$ , ossia in prossimità della distanza alla quale il menisco non può più essere calcolato, nel caso  $R_1 = 35nm$ ,  $R_2 = 140nm$  gli andamenti delle forze previste con  $M_3$  si discostino in modo significativo da quelli relativi a FEM e simulazione a geometria esatta. Ciò non deve sorprendere se si osserva il profilo *esatto* tracciato in questo caso (Figura 4.26(b)): si può infatti notare come, anche solo visivamente, l'approssimazione su cui si fonda il modello semianalitico  $M_3$  riguardo l'arco di circonferenza, non sia qui più soddisfacente a causa del tratto in prossimità della superficie inferiore che diventa quasi rettilineo interrompendo la curvatura *circolare* del restante profilo superiore. Infine, per il codice a geometria esatta, occorre evidenziare come esso necessiti, ai fini della convergenza, di una tolleranza meno stringente per l'angolo di contatto inferiore, mediamente quattro volte superiore che per un generico caso ad angolo non nullo. Nonostante questo i profili tracciati risultano qualitativamente soddisfacenti con uno scarto nell'ordine di  $0.2rad$ .

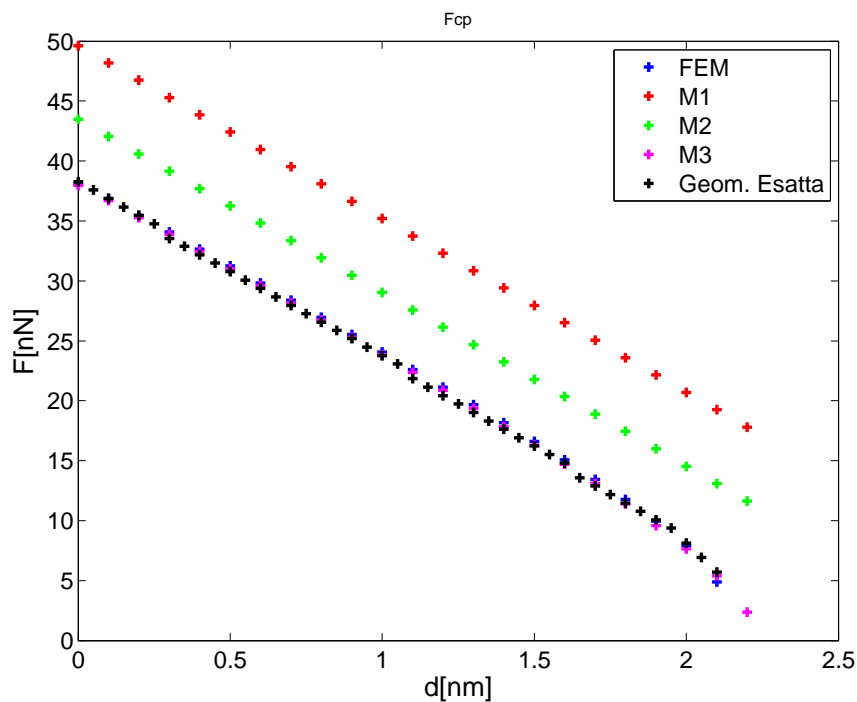


(a) Forza capillare. I dati contrassegnati con “Geom. Esatta” si riferiscono alla procedura descritta in sezione 4.4.2.

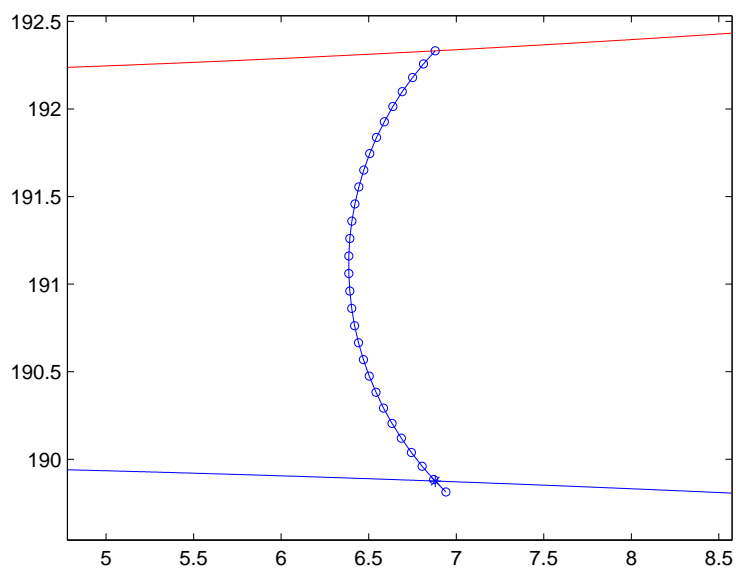


(b) Profilo del menisco, prossimo alla rottura.

Figura 4.23: Andamento forza - distanza tra due sfere di raggio  $R_1 = 35\text{nm}$  e  $R_2 = 140\text{nm}$ .  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto:  $\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{4}$ . Tolleranza angolo di contatto:  $0.05\text{rad}$

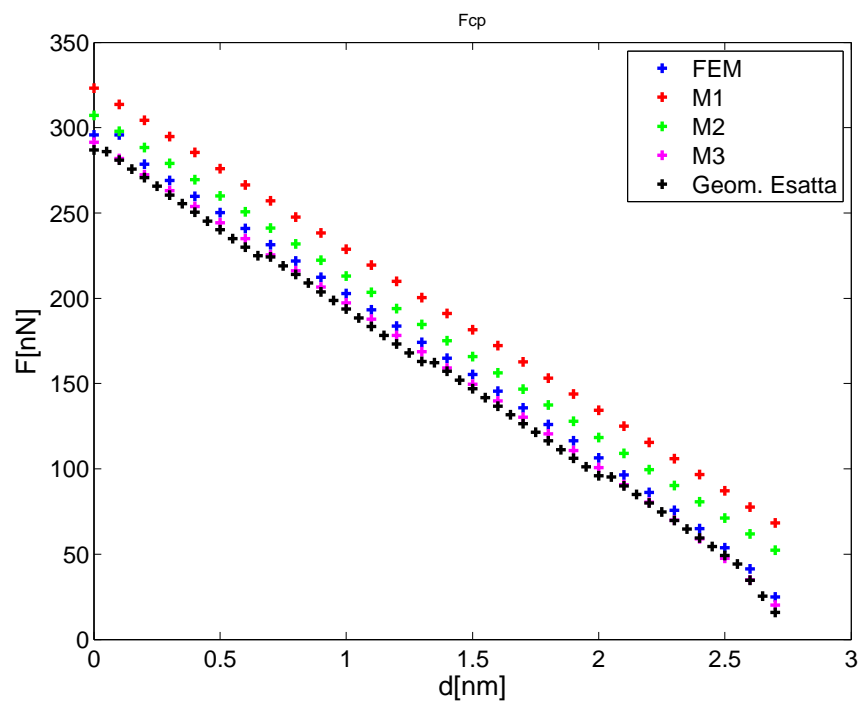


(a) Forza capillare. I dati contrassegnati con “Geom. Esatta” si riferiscono alla procedura descritta in sezione 4.4.2.

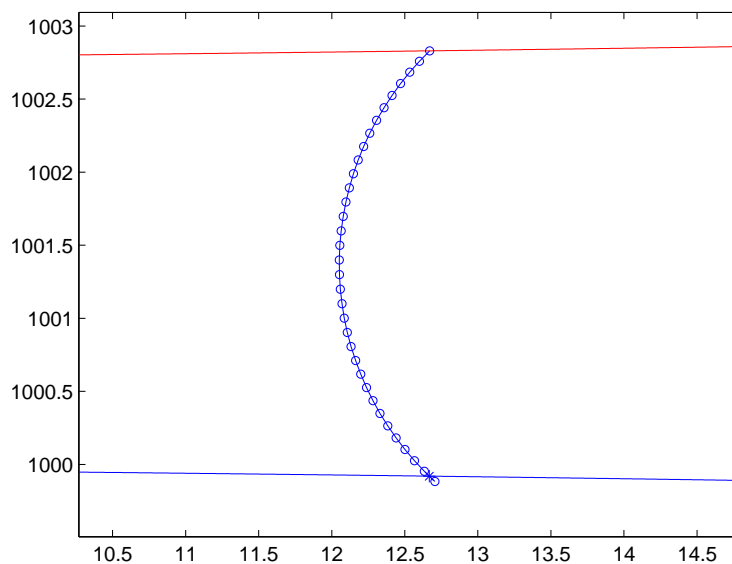


(b) Profilo del menisco, prossimo alla rottura.

Figura 4.24: Andamento forza - distanza tra due sfere di raggio  $R_1 = 130nm$  e  $R_2 = 190nm$ .  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto:  $\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{4}$ . Tolleranza angolo di contatto:  $0.05rad$

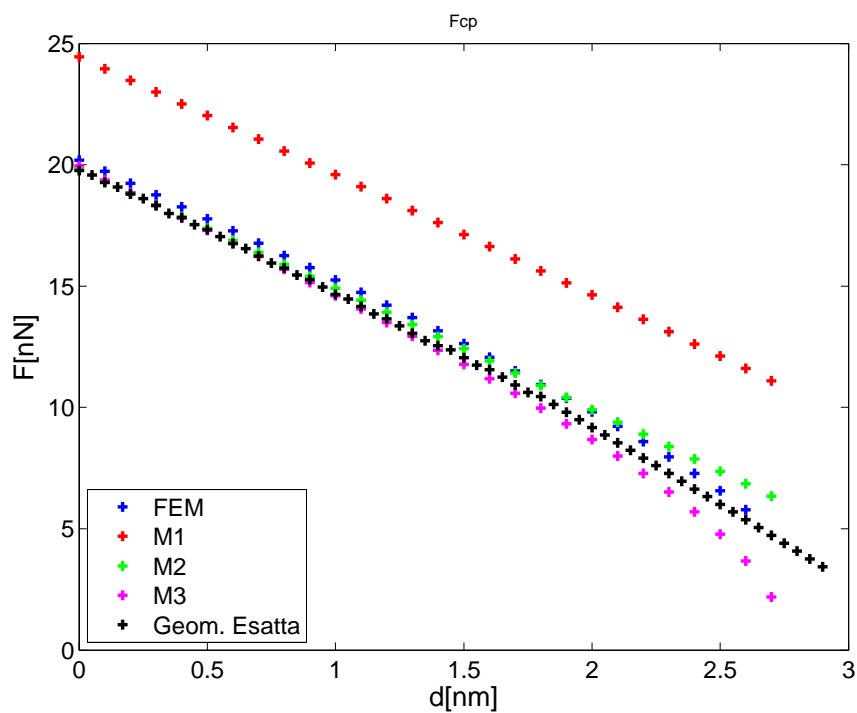


(a) Forza capillare. I dati contrassegnati con “Geom. Esatta” si riferiscono alla procedura descritta in sezione 4.4.2.

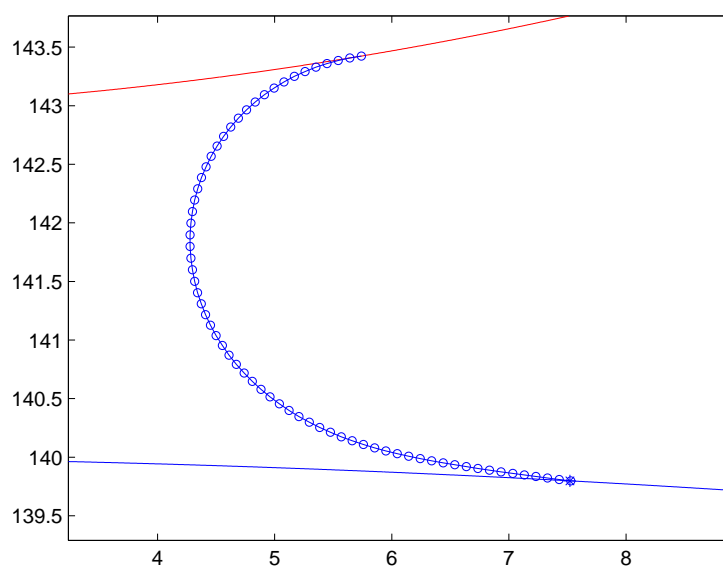


(b) Profilo del menisco, prossimo alla rottura.

Figura 4.25: Andamento forza - distanza tra due sfere di raggio  $R_i = 1000\text{nm}$ .  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto:  $\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{4}$ . Tolleranza angolo di contatto:  $0.05\text{rad}$

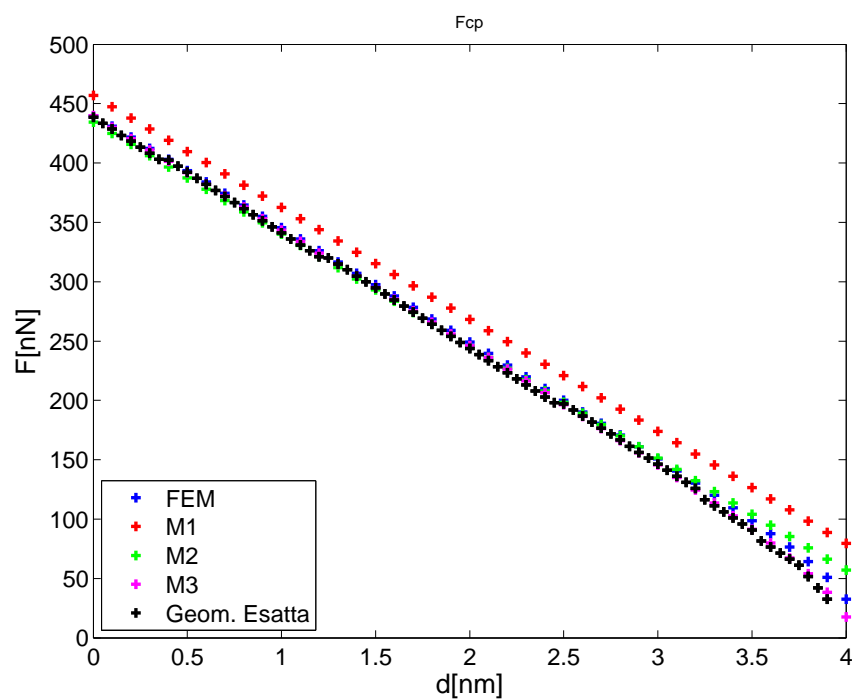


(a) Forza capillare. I dati contrassegnati con "Geom. Esatta" si riferiscono alla procedura descritta in sezione 4.4.2.

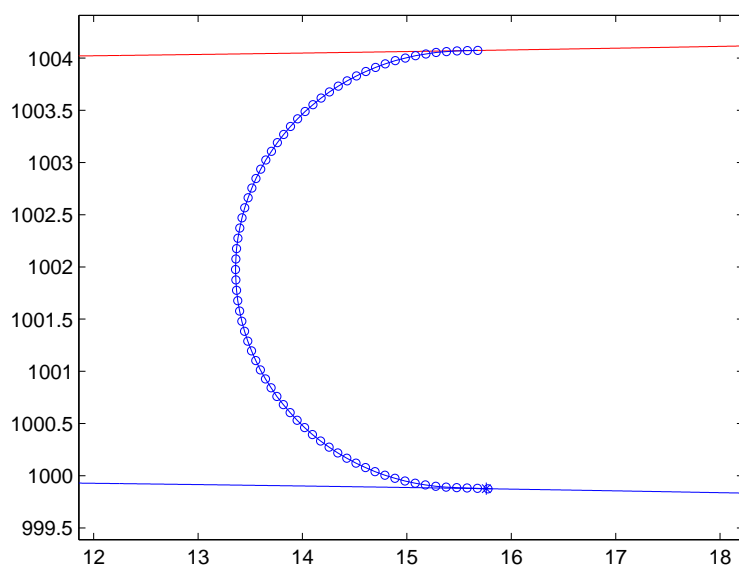


(b) Profilo del menisco, prossimo alla rottura.

Figura 4.26: Andamento forza - distanza tra due sfere di raggio  $R_1 = 35\text{nm}$  e  $R_2 = 140\text{nm}$ .  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Tolleranza angolo di contatto:  $0.2\text{rad}$



(a) Forza capillare. I dati contrassegnati con “Geom. Esatta” si riferiscono alla procedura descritta in sezione 4.4.2.



(b) Profilo del menisco, prossimo alla rottura.

Figura 4.27: Andamento forza - distanza tra due sfere di raggio  $R_i = 1000nm$ .  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Tolleranza angolo di contatto:  $0.25rad$





## Capitolo 5

# Generazione numerica di superfici rugose

I nuovi modelli  $M_i$  introdotti, presentati nel capitolo 4, hanno permesso di ottenere miglioramenti in termini di capacità predittiva della forza di attrazione capillare per i casi test. Tali modelli sono stati quindi utilizzati in contesti più realistici come la stima della forza capillare tra due generiche superfici rugose. In questo capitolo si presentano alcune tecniche di generazione numerica di tali superfici che verranno poi utilizzate per la stima delle forze di attrazione.

Il riferimento per questa sezione è [Arosio, 2009, cp.3] dove viene affrontata un'introduzione alla rugosità che caratterizza le superfici alla microscala, per poi presentare lo stato dell'arte degli algoritmi volti alla generazione numerica di superfici con una rugosità desiderata, oltre che un'analisi dei medesimi. Per ulteriori approfondimenti si rimanda a [Bhushan, 2001].

### 5.1 Rugosità superficiale

Le superfici solide presentano una struttura e delle proprietà complesse che sono cruciali nell'interazione tra di esse, soprattutto per applicazioni ingegneristiche alla microscala. Tali proprietà possono dipendere dalla natura del solido, dall'interazione tra la superficie e l'ambiente circostante e dal metodo di preparazione. Nessuna tecnica di fabbricazione, per quanto precisa, può produrre una superficie piatta a livello molecolare. Le irregolarità possono quindi spaziare da deviazioni di forma macroscopica a imperfezioni nell'ordine delle distanze interatomiche, e proprio queste ultime saranno l'oggetto principale dello studio e delle modellazioni proposte.

Con *rugosità* di una superficie si intende la variazione dell'altezza della superficie rispetto a un piano di riferimento: si misura lungo un singolo profilo lineare oppure su di un insieme di profili lineari paralleli tra loro.

Si consideri un profilo  $z(x)$  (Figura 5.1) le cui altezze sono misurate rispetto ad una linea di riferimento (*mean-line*) tale per cui l'area che sta sopra tale linea e sotto il profilo è uguale all'area che sta sotto la linea e sopra il profilo. Detta  $L$  la lunghezza della proiezione del profilo sul piano  $x - y$ , la rugosità viene caratterizzata attraverso

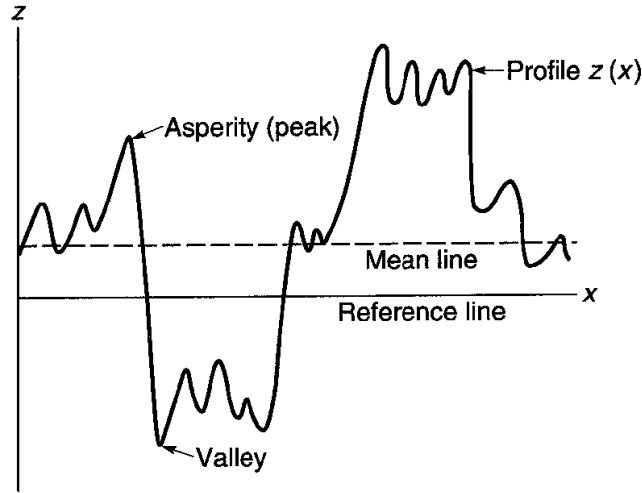


Figura 5.1: Esempio di un profilo  $z(x)$ . Da [Arosio, 2009].

alcuni indicatori statistici, definiti come segue.

$$m = \frac{1}{L} \int_0^L z \, dx \quad \text{mean-line}$$

$$R_a = CLA = AA = \frac{1}{L} \int_0^L |z - m| \, dx \quad \text{center-line average}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{L} \int_0^L (z - m)^2 \, dx \quad \text{standard deviation}$$

$$R_q^2 = RMS^2 = \frac{1}{L} \int_0^L z^2 \, dx \quad \text{root mean square}$$

$$Sk = \frac{1}{\sigma^3 L} \int_0^L (z - m)^3 \, dx \quad \text{skewness}$$

$$K = \frac{1}{\sigma^4 L} \int_0^L (z - m)^4 \, dx \quad \text{kurtosis}$$

Dalle misurazioni effettuate si è osservato come molte superfici di interesse ingegneristico abbiano una distribuzione delle altezze Gaussiana simmetrica, anche se alcuni processi di fabbricazione generano superfici con distribuzioni non-Gaussiane.

Un'ulteriore descrittore statistico utilizzato per rappresentare le proprietà di tutte le lunghezze d'onda, o scale spaziali della superficie, è la funzione spaziale *ACF* (*auto-correlation function*) che può essere interpretata come la misura di quanto accuratamente si possono predire valori futuri della funzione sulla base delle osservazioni passate. L'*ACF* per una separazione spaziale  $\tau$  è la media integrale del prodotto di due misure prese sul profilo ad una distanza pari a  $\tau$ , opportunamente centrate:

$$ACF(\tau) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L\sigma^2} \int_0^L [z(x) - m][z(x + \tau) - m] \, dx$$

Per una funzione casuale,  $ACF(\tau)$  assume valore massimo (unitario) in  $\tau = 0$ . Tra le  $ACF$  più diffuse vi è sicuramente quella di tipo esponenziale definita da

$$ACF(\tau) = \exp(-\tau/\beta)$$

Usualmente si definisce lunghezza di correlazione la distanza oltre la quale la funzione di autocorrelazione si riduce ad una piccola frazione del suo valore all'origine<sup>1</sup>. La forma esponenziale (Figura 5.2) presenta una lunghezza di correlazione  $\beta^* = 2.3\beta$  ( $ACF(\beta^*) = 0.1$ ). La lunghezza di corre-

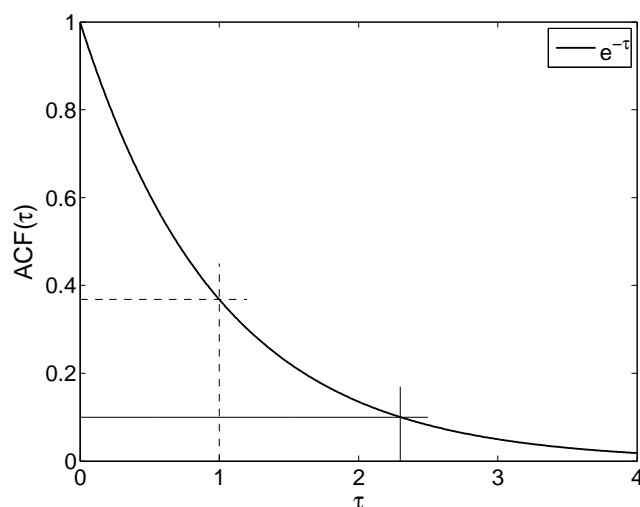


Figura 5.2: Funzione di correlazione esponenziale  $ACF(\tau) = \exp(-\tau/\beta)$ . Sono indicati, rispettivamente con una linea continua e una tratteggiata, le distanze di correlazione  $\beta^* = 2.3\beta$  e  $\beta^* = \beta$

lazione può essere interpretata come la distanza alla quale due punti della funzione possono essere considerati indipendenti. Questo segue dal fatto che quando  $ACF(\tau)$  è vicino all'unità, due punti della funzione a distanza  $\tau$  sono fortemente interdipendenti. Viceversa, quando  $ACF(\tau)$  assume valori prossimi allo zero, due punti della funzione a distanza  $\tau$  sono debolmente correlati. La lunghezza di correlazione  $\beta^*$  può quindi essere vista come misura della casualità della superficie, che cresce al crescere di  $\beta^*$ .

In sintesi, una superficie casuale e isotropa può essere descritta completamente in senso statistico da due funzioni: la distribuzione delle altezze e la funzione di autocorrelazione. Una superficie casuale con una distribuzione Gaussiana delle altezze e una funzione di autocorrelazione esponenziale può essere semplicemente caratterizzata da due parametri: la deviazione standard delle altezze della superficie ( $\sigma$ ) e la distanza di correlazione ( $\beta^*$ ).

<sup>1</sup>In alternativa, si può definire come la lunghezza alla quale la funzione di autocorrelazione vale  $1/e$ , ed è quindi pari a  $\beta^* = \beta$  per  $ACF$  esponenziali.

## 5.2 Algoritmo di Hu-Tonder

Per poter utilizzare i modelli semianalitici presentati si rende necessario modellare la rugosità delle superfici in maniera molto semplificata, attraverso l'utilizzo di calotte sferiche. Come vedremo, pur garantendo a posteriori il soddisfacimento di alcune delle proprietà statistiche volute, il metodo che introdurremo non rappresenta ad oggi lo stato dell'arte per tale modellazione. Esistono, infatti, tecniche più raffinate in grado di generare superfici caratterizzate da una *texture*<sup>2</sup> molto vicina a quella che è possibile misurare con il microscopio a forza atomica per i normali materiali utilizzati nella nano-ingegneria.

Gli algoritmi in questione consentono di creare una distribuzione di punti equispaziata nel piano  $xy$ , ciascuno con una propria quota  $z(x, y)$  tale da soddisfare sia il valore di  $RMS$  desiderato sia la funzione di autocorrelazione. Nonostante il soddisfacimento delle proprietà statistiche<sup>3</sup> sia chiaramente da intendersi con un certo margine di errore, la generazione di superfici rugose casuali utilizzando strumenti numerici è, a differenza della misurazione sperimentale, molto più semplice e offre numerosi vantaggi: oltre all'eliminazione di tutta l'apparecchiatura hardware necessaria, viene meno anche la necessità di filtrare le lunghezze d'onda non volute.

Per generare una sequenza di output  $z(x, y)$  con autocorrelazione imposta sono state utilizzate due tecniche alternative: una si basa su una trasformazione lineare l'altra invece su un filtraggio digitale bidimensionale: sulla base dell'analisi sviluppata in [Arosio, 2009], l'algoritmo scelto per questo lavoro è basato sulla seconda; l'aver preferito tale metodo è il risultato di un compromesso tra oneri computazionali e *qualità* della superficie generata. Riguardo quest'ultima, si segnala anche l'analisi riportata in [Baldassarre, 2011, cp.8] dove le simulazioni numeriche relative a tale algoritmo sono confrontate con le misurazioni sperimentali ottenute per mezzo del microscopio a forza atomica. Riportiamo a titolo di esempio, in Figura 5.3, 5.4 e 5.5 il risultato per una superficie quadrata di silicio - tra i materiali più diffusi nelle micro-nano tecnologie - di lato  $L = 5\mu m$  caratterizzata da una distribuzione delle altezze gaussiana di  $RMS = 0.1542nm$  e da una funzione di correlazione esponenziale con  $\beta^* = 147.06nm$ .

### 5.2.1 Descrizione dell'algoritmo

Per la generazione delle superfici viene dunque utilizzato l'algoritmo di Hu-Tonder [Hu e Tonder, 1992], nella variante computazionalmente più efficiente dove la convoluzione nel dominio del tempo, necessaria all'operazione di filtraggio, è affrontata tramite la trasformata rapida di Fourier (per una trattazione dell'algoritmo si veda, ad esempio, [Salinelli e Tomarelli, 2008]). In questo contesto ci si limita a descrivere di seguito i passi necessari ricordando che l'intento qui non è quello di una trattazione esaustiva dell'argomento.

<sup>2</sup>Con *texture* di una superficie si intende la deviazione, ripetitiva o casuale, dalla superficie nominale che forma la topografia tridimensionale della superficie.

<sup>3</sup>Per le superfici generate numericamente valgono le definizioni viste in sezione 5.1 opportunamente adattate alla descrizione discreta.

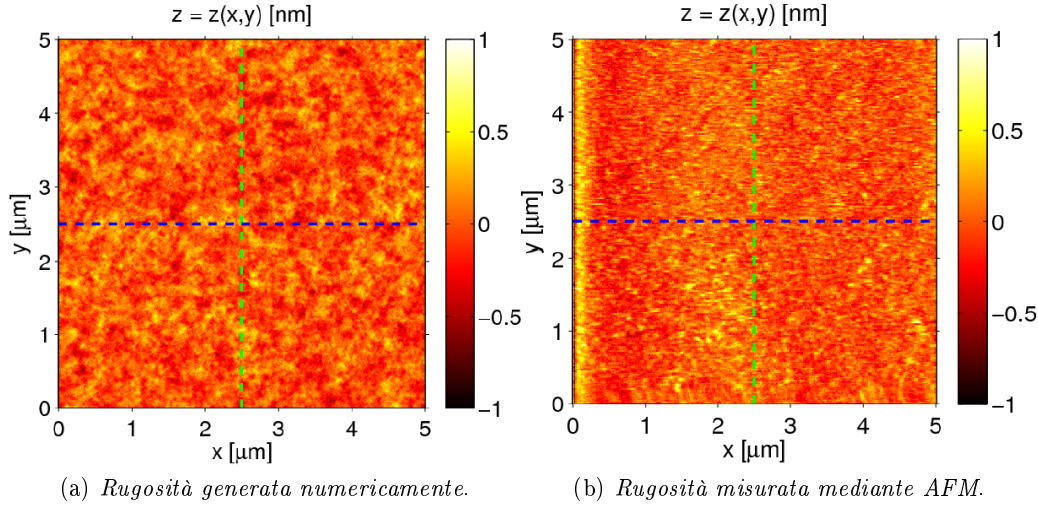


Figura 5.3: Confronto tra la rugosità di un cristallo di silicio generata numericamente e misurata per mezzo del microscopio a forza atomica. Da [Baldassarre, 2011].

1. Scelto il numero di punti da utilizzare nella discretizzazione, che nel seguito verranno indicati con  $N$  per la dimensione orizzontale e  $M$  per quella verticale, si genera una sequenza di input  $\eta(r, s)$ , con  $r = 1, \dots, N$  e  $s = 1, \dots, M$  di numeri casuali con distribuzione Gaussiana di media nulla e varianza unitaria.
2. Posto  $n = N/2$  e  $m = M/2$ , si genera la *ACF* desiderata  $R(k, l)$  con  $k = 1, \dots, n/2$  e  $s = 1, \dots, m/2$ .
3. Siano ora  $L_x$  e  $L_y$  le minime potenze di 2 maggiori rispettivamente di  $N + n - 1$  e  $M + m - 1$ : è possibile implementare la generazione della superficie rugosa nel dominio delle frequenze utilizzando la procedura che viene descritta di seguito. Questa trasformazione consentirà di semplificare notevolmente l'operazione di convoluzione.

- (a) Si costruisce una nuova sequenza  $\eta_f(r, s)$  con  $r = 1, \dots, L_x$  e  $s = 1, \dots, L_y$  così definita:

$$\eta_f(r, s) = \begin{cases} \eta(r, s) & r = 1, \dots, N \\ 0 & s = 1, \dots, M \end{cases}$$

- (b) Si costruisce una nuova *ACF*  $R_f(r, s)$  di dimensione  $L_x \times L_y$ :

$$\begin{cases} R_f(r, s) = R(r, s) \\ R_f(L_x - r + 1, s) = R(r, s) \\ R_f(r, L_y - s + 1) = R(r, s) \\ R_f(L_x - r + 1, L_y - s + 1) = R(r, s) \end{cases}$$

con  $r = 1, \dots, n/2$  e  $s = 1, \dots, m/2$ .

- (c) Si calcola la FFT di  $\eta_f(r, s)$  ottenendo la sequenza  $A_f(\omega_x, \omega_y)$  con  $\omega_x = 1, \dots, L_x$  e  $\omega_y = 1, \dots, L_y$ .

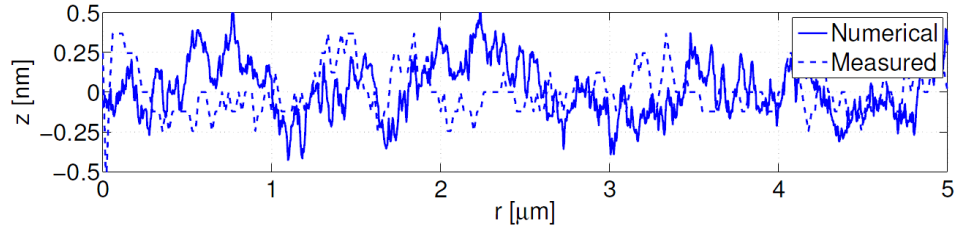
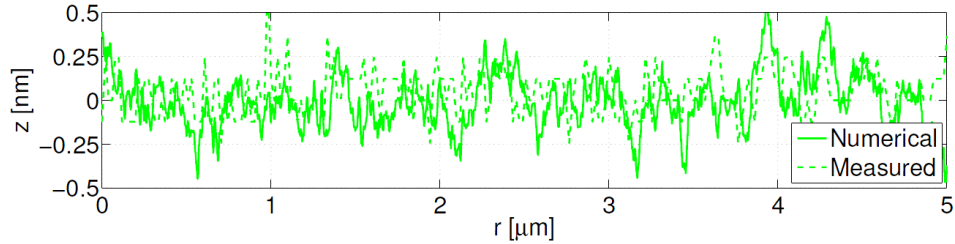
(a) Profilo delle altezze in direzione  $x$ .(b) Profilo delle altezze in direzione  $y$ .

Figura 5.4: Confronto tra i profili delle altezze misurati e quelli ricavati dalla simulazione numerica per il cristallo di silicio. Da [Baldassarre, 2011].

- (d) Si calcola la FFT di  $R_f(r, s)$  ottenendo la sequenza  $S_z(\omega_x, \omega_y)$  con  $\omega_x = 1, \dots, L_x$  e  $\omega_y = 1, \dots, L_y$ .
- (e) Si determina la risposta in frequenza del filtro  $H(\omega_x, \omega_y)$  con  $\omega_x = 1, \dots, L_x$  e  $\omega_y = 1, \dots, L_y$ , utilizzando la relazione:

$$H(\omega_x, \omega_y) = (S_z(\omega_x, \omega_y)/C)^{1/2}$$

con  $C$  costante arbitraria che, nelle simulazioni effettuate, è stata posta  $C = 1$ .

- (f) Si calcola la sequenza  $Z(\omega_x, \omega_y)$  con  $r = 1, \dots, L_x$  e  $s = 1, \dots, L_y$ :

$$Z(\omega_x, \omega_y) = H(\omega_x, \omega_y)A_f(\omega_x, \omega_y)$$

Si osservi che, come è noto, l'operazione di convoluzione che sarebbe qui richiesta nel dominio del tempo - computazionalmente complessa e onerosa - si trasforma in una semplice moltiplicazione nel dominio delle frequenze.

- (g) Si calcola la trasformata di Fourier inversa della sequenza  $Z(\omega_x, \omega_y)$  ottenendo la sequenza di output  $z(r, s)$  con  $r = 1, \dots, N$  e  $s = 1, \dots, M$ .

### Nota all'implementazione

L'algoritmo descritto è stato implementato in *Matlab*® dal prof. R. Ardito. Per gli scopi di questo lavoro ne è stata sviluppata anche una copia in *Fortran90* che, per le caratteristiche intrinseche del linguaggio che passa da interpretato a compilato, risulta computazionalmente più efficiente.

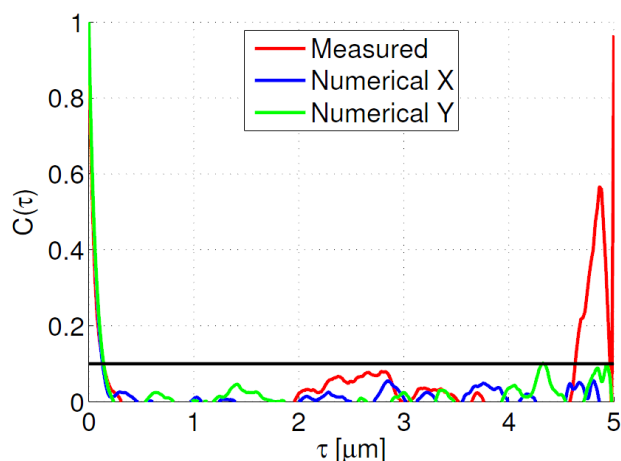
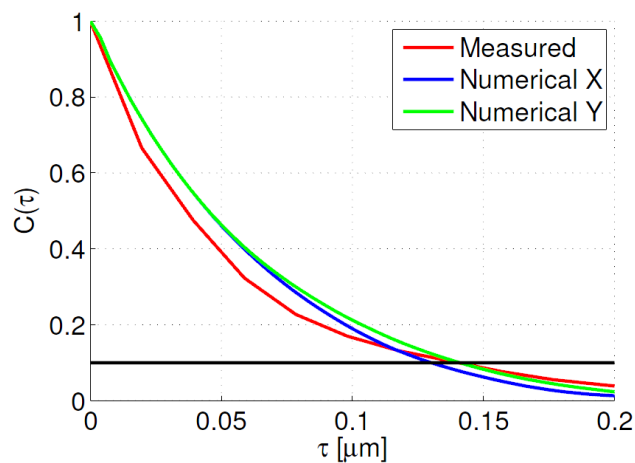
(a) *Andamento per l'intera lunghezza della superficie.*(b) *Dettaglio dell'andamento fino alla distanza di correlazione.*

Figura 5.5: Confronto tra le funzioni di correlazione misurate e quelli ricavate dalla simulazione numerica per il cristallo di silicio. Da [Baldassarre, 2011].

### 5.2.2 Esempi

Si riportano in Figura 5.6 e Figura 5.7 alcuni esempi di superfici generate con il codice descritto. Le immagini sono puramente a titolo di esempio dal momento che per l'analisi e la discussione dettagliata dei risultati si è rimandato a [Arosio, 2009] dove l'algoritmo è stato per la prima volta presentato.

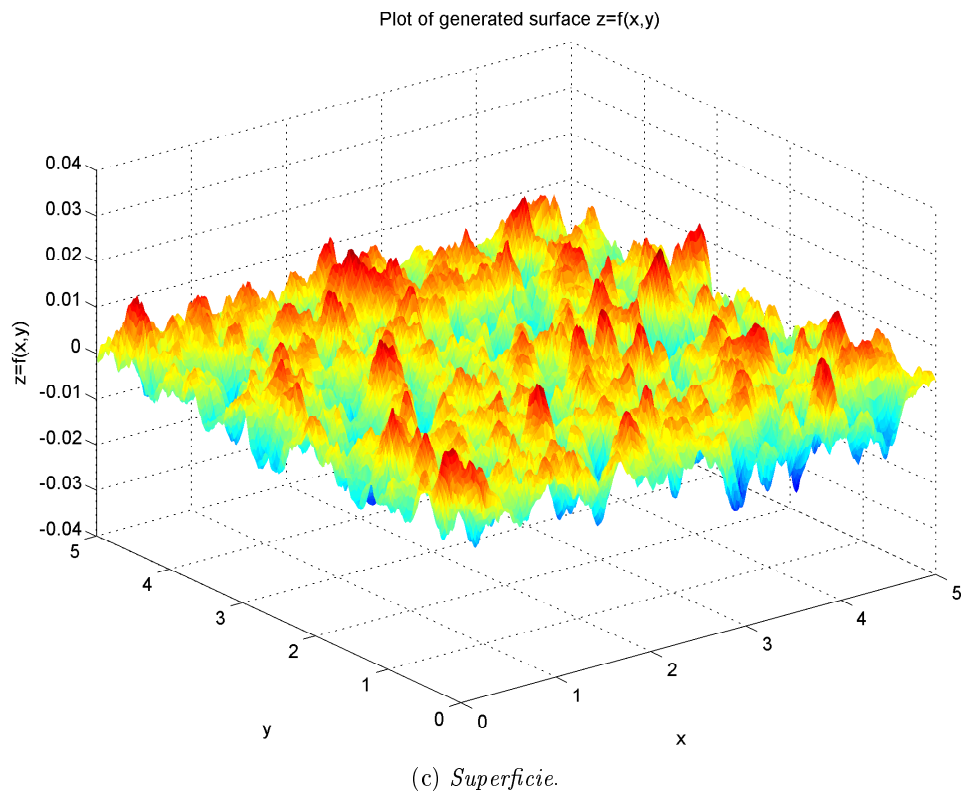
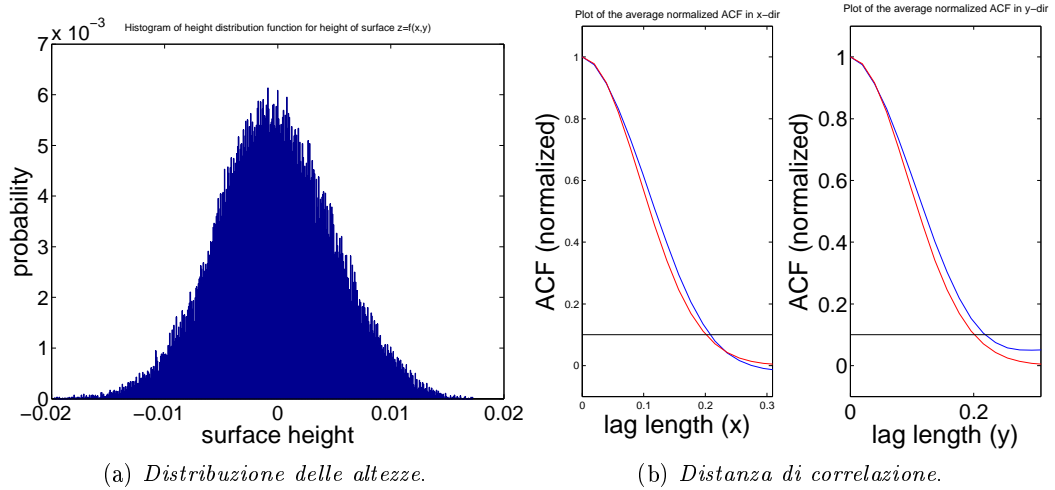


Figura 5.6: Superficie rugosa di lato  $5\mu m$ .  $\sigma = 5nm$ .  $\beta_x^* = \beta_y^* = 200nm$ .



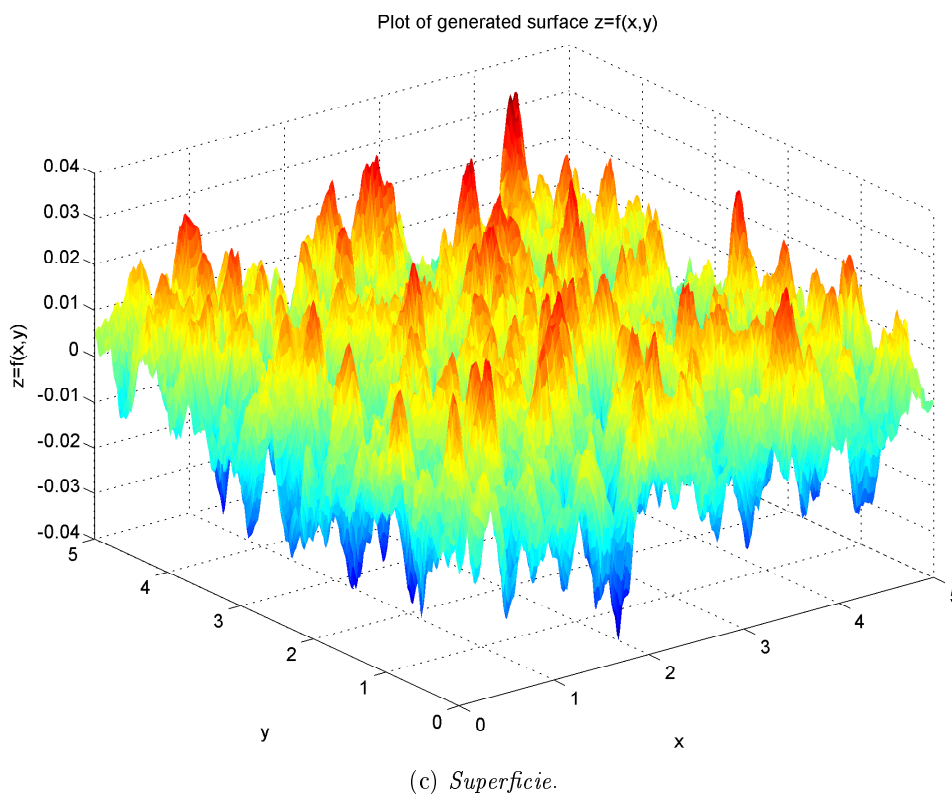
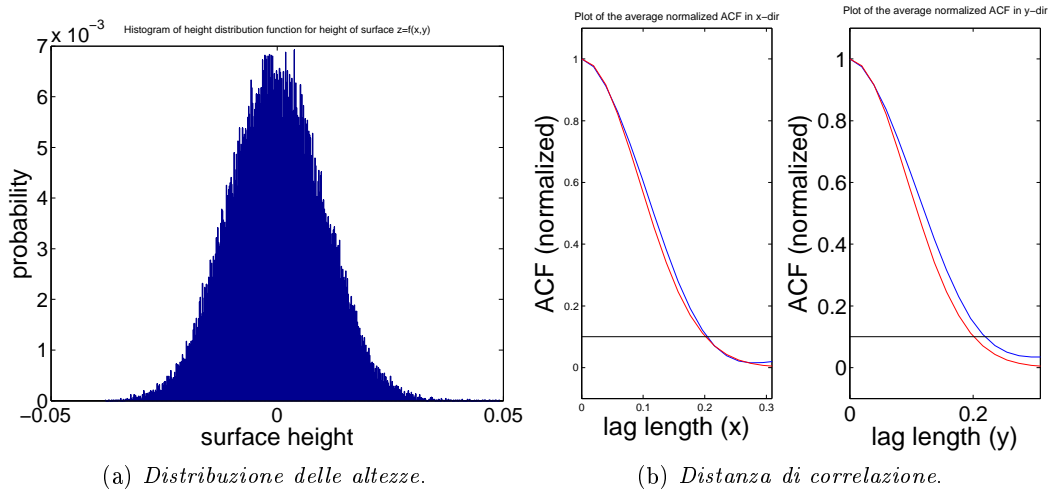


Figura 5.7: Superficie rugosa di lato  $5\mu\text{m}$ .  $\sigma = 10\text{nm}$ .  $\beta_x^* = \beta_y^* = 200\text{nm}$ .

### 5.3 Algoritmi a geometria semplificata

Come detto, al fine di utilizzare i modelli semianalitici visti in precedenza per asperità di forma geometrica regolare, si è reso necessario modellare la rugosità mediante enti geometrici basilari, quali emisfere e/o calotte sferiche, in quanto l'operatività dei modelli è appunto limitata al caso in cui le asperità tra le quali si prevede possa formarsi o meno un menisco siano di forma sferica. In letteratura non sono stati trovati lavori specifici a riguardo ad eccezione di un breve cenno in [Dadgour et al., 2011] e [Greenwood e Williamson, 1966] dove però, oltre a non essere riportati né possibili algoritmi di generazione né un'analisi della superficie generata in termini di proprietà statistiche soddisfatte, l'obiettivo era solo quello di stimare l'area di contatto e non l'utilizzo di modelli per la stima di alcune forze di interazione.

#### 5.3.1 Algoritmo 1

Si è cercato dunque di generare una superficie caratterizzata da una rugosità RMS assegnata anche se, come sarà chiaro a breve, tale proprietà statistica non sarà in realtà imposta a priori per tutti i punti che compongono la superficie ma solo ad un ristretto sottoinsieme. La procedura adottata è descritta di seguito.

Mediante un generatore di numeri casuali si estraggono valori da una gaussiana di media 0 e deviazione standard  $\sigma$ . Tali realizzazioni, sommate ad un valore costante  $d$ , che vorrebbe rappresentare la quota media della superficie misurata dallo 0 di riferimento, costituiscono i raggi delle sfere con cui verrà modellata la rugosità (Figura 5.8). Segue che il valore  $d$  rappresenta anche la media (limite) dei raggi che verranno utilizzati. Al fine di evitare di ottenere dei raggi negativi è stata scelta la quota  $d$  pari a  $d = 2\sigma$  unita ad un controllo di confidenza sui valori estratti dalla gaussiana che, anche per non avere raggi di dimensioni troppo estreme, sono tutti presi appartenenti ad un intervallo centrato di ampiezza  $\pm 2\sigma$ . Scelta allora la dimensione della superficie voluta (inizialmente un quadrato di lato  $1\mu m$ ) si costruisce una griglia di punti equispaziata (Figura 5.9) nelle due direzioni: ciascuno di essi sarà il centro di una emisfera. Come valore di spaziatura è stato preso il doppio del raggio medio con l'intenzione di evitare eccessive sovrapposizioni tra le calotte sferiche. Si è così generata una distribuzione strutturata di emisfere le cui sole sommità sono a quote che variano con l'RMS voluto. Si osserverà come il valore scelto per la spaziatura della griglia, possa essere considerato ragionevole ma non giustificato, a priori, dalla fisica della superficie. La sua scelta, per altro, influenza in modo significativo l'intensità della forza prevista in quanto diminuendo la spaziatura, a parità di area, aumenteranno sia le sfere utilizzate sia, particolare non secondario, la sovrapposizione tra esse. La forza non può però che aumentare perché ora è probabilisticamente maggiore il numero di sfere che possono contribuire. Dopo alcune prove dove si è progressivamente ridotto il valore della spaziatura si è visto che la percentuale di sfere interessate non cambia e che le forze previste aumentano, ma in maniera proporzionale in tutti i modelli. Per questo si rende necessario trovare un modo per determinare l'effettiva rugosità ottenuta nella superficie generata così da giustificare o meno il valore di spaziatura scelto.

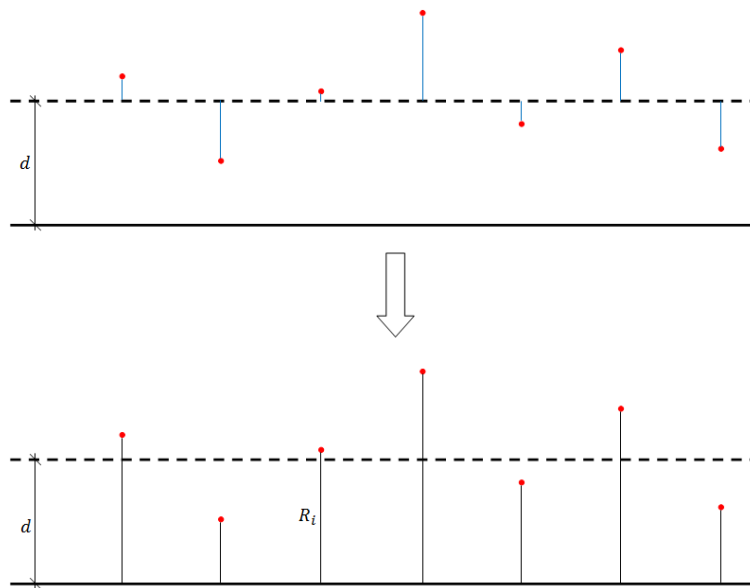


Figura 5.8: I raggi delle sfere sono ottenuti sommando realizzazioni campionarie da una gaussiana di media nulla e deviazione standard assegnata (in alto) ad una quota costante  $d$  (in basso).

### Analisi a posteriori della superficie generata

Come descritto nella procedura di modellazione della rugosità, solo un ristretto numero di punti (le asperità delle sfere) hanno una deviazione standard pari all'RMS desiderato. Si è ritenuto opportuno indagare a posteriori l'RMS della superficie realmente ottenuta per valutare quanto tale limitazione si ripercuotesse nella differenza rispetto alle rugosità volute. A tale scopo si è generata nel piano  $xy$  una griglia di punti molto più fitta di quella dei centri delle sfere (qualitativamente, di un fattore 0.01) e per ciascuno di essi si è calcolata la rispettiva quota  $z$  sulla superficie rugosa. Quest'ultima operazione merita particolare attenzione in quanto bisogna correttamente selezionare, tra tutte le sfere a cui ciascuno dei punti in esame appartiene, non quella

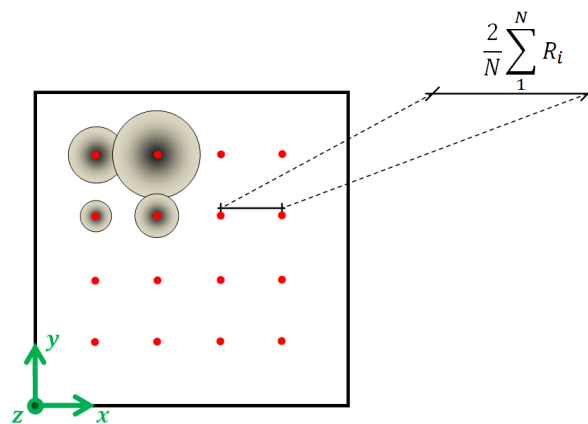


Figura 5.9: Griglia dei centri dei raggi delle sfere.

di raggio massimo ma quella per cui il punto ha quota massima (cfr. Figura 5.10). Un dettaglio della superficie *ricostruita* è mostrato in Figura 5.11. Si ottiene così

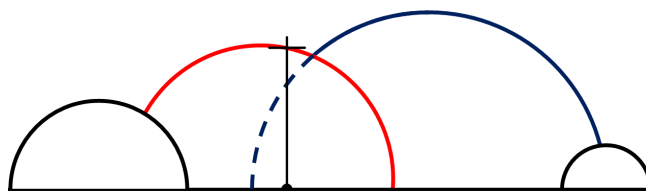


Figura 5.10: Esempio di un caso in cui un punto della griglia di valutazione appartiene a due sfere e quella di raggio massimo (in blu) non è quella per cui (in rosso) tale punto ha quota massima.

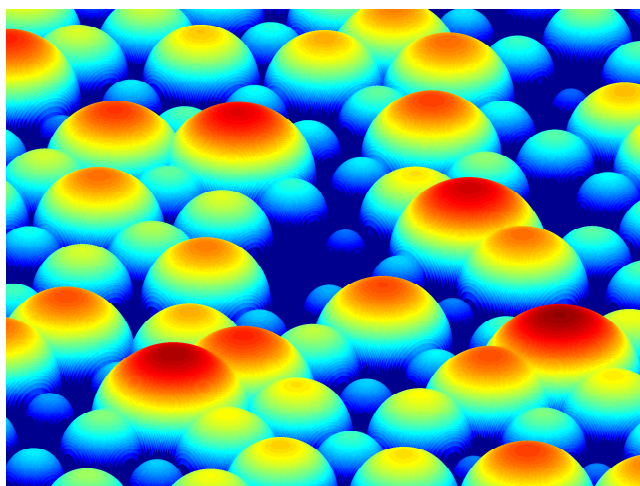


Figura 5.11: Dettaglio di una superficie generata dall'algoritmo 1.

una distribuzione di altezze *semicontinua* la cui deviazione standard fornisce l'RMS della superficie ottenuta. In tabella 5.1 si riassume un'analisi delle proprietà statistiche ottenute dalle superfici generate al variare della spaziatura (e conseguentemente del numero di sfere utilizzate). Come si può osservare, il valore di RMS ottenuto si discosta dal valore desiderato di una quantità tollerabile mentre non è così per gli indicatori di simmetria della distribuzione: la differenza riscontrata trova giustificazione nella distribuzione delle altezze riportata in Figura 5.13 e 5.14 dove l'istogramma mostra chiaramente una maggiore frequenza per i punti ad altezza minima che corrispondono a quelle aree della superficie generata che non sono ricoperte da emisfere. In Figura 5.12 viene riportato l'istogramma delle altezze per il caso  $\sigma = 5nm$  dove come valore di spaziatura per la griglia dei centri delle sfere è stato preso il solo raggio medio: come si può notare si ha una diminuzione del picco di frequenza per le altezze minime ma il valore dell'RMS ottenuto è, in questo caso, più lontano da quello desiderato.

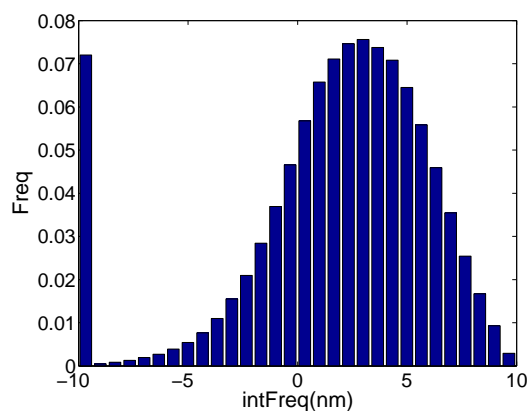
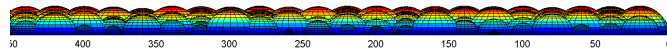
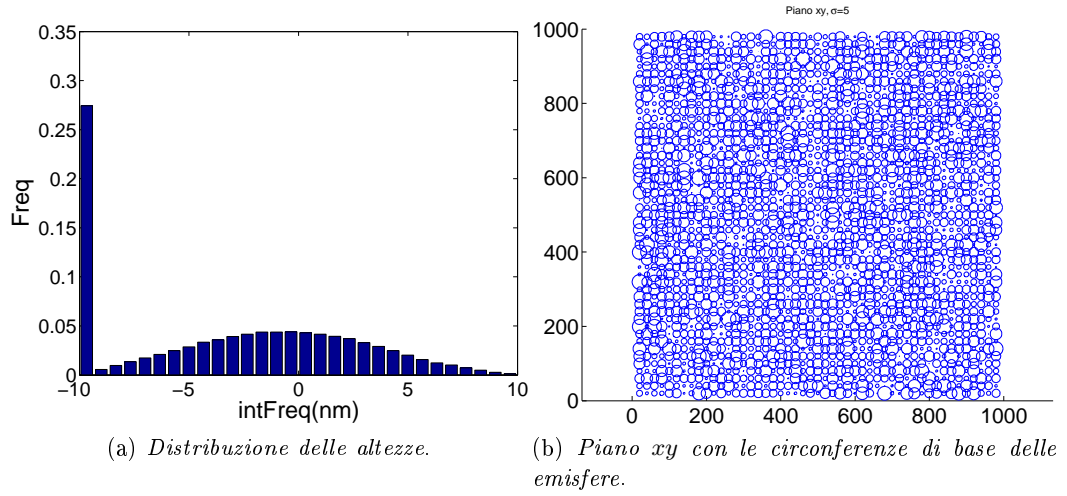
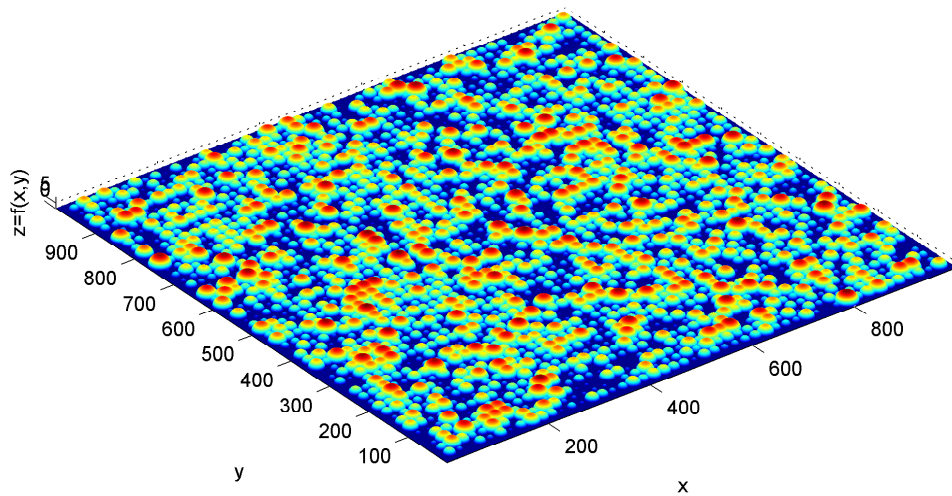
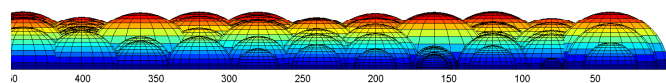
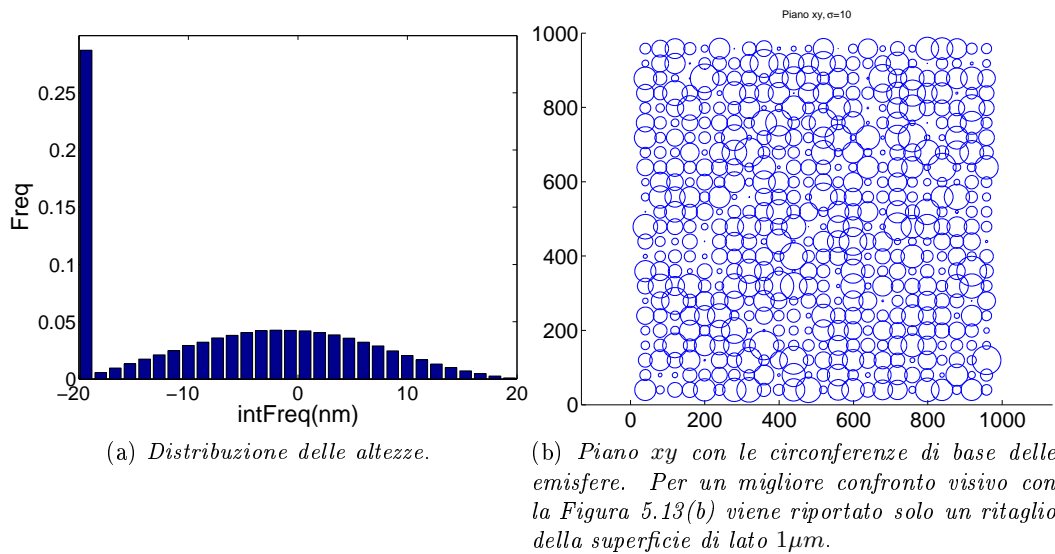
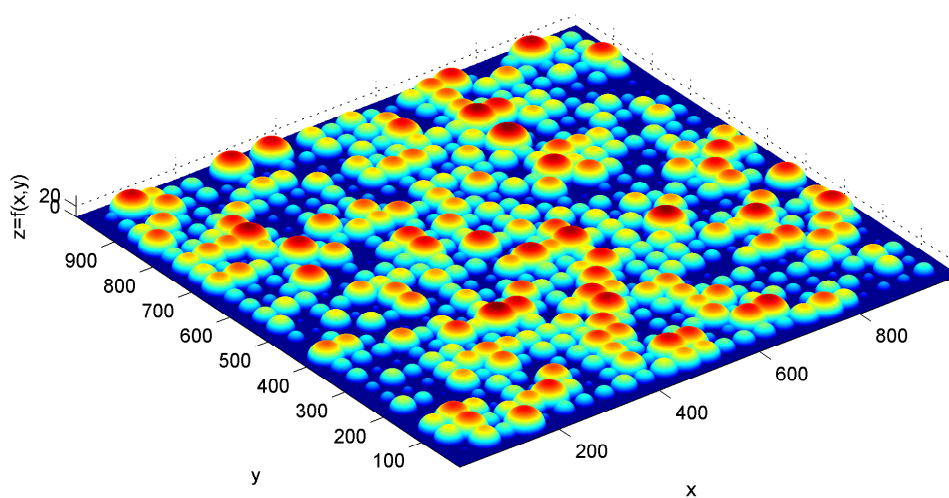


Figura 5.12: Distribuzione delle altezze per una superficie di  $\sigma = 5nm$  e  $dx = dy = 2rm$

$\sigma_{ex}$ (nm)	$dx$	num. sfere	$\sigma_{num}$ (nm)	$Sk$	$K$	% sfere coperte
5	$rm$	9025	4.4	-1.14	4.18	11.6
	$1.5rm$	3844	5.3	-0.31	2.04	11.9
	$2rm$	2304	5.4	0.10	1.80	0
	$2.5rm$	1521	5.3	0.63	2.09	0
	$3rm$	1024	4.6	1.14	2.07	0
10	$rm$	9025	8.8	-1.15	4.3	11.9
	$1.5rm$	3844	10.5	-0.30	2.06	1.01
	$2rm$	2401	10.6	0.05	1.86	0
	$2.5rm$	1521	10.7	0.59	2.02	0
	$3rm$	1024	9.8	1.20	3.16	0
15	$rm$	9216	12.9	-1.13	4.35	11.9
	$1.5rm$	3844	5.3	-0.35	2.11	1.17
	$2rm$	2401	15.9	0.10	1.87	0
	$2.5rm$	1521	18.1	0.05	1.83	0
	$3rm$	1024	20.8	0.15	1.79	0

Tabella 5.1: Proprietà statistiche delle superfici generate.

(c) *Vista laterale.*(d) *Superficie.*Figura 5.13: Superficie rugosa di lato  $1\mu m$ .  $\sigma = 5nm$

(c) *Vista laterale.*(d) *Superficie. Per un migliore confronto visivo con la Figura 5.13 viene riportato solo un ritaglio della superficie di lato  $1\mu m$ .*Figura 5.14: Superficie rugosa di lato  $3\mu m$ .  $\sigma = 10nm$ .

### 5.3.2 Algoritmo 2

Come si sarà osservato, in una prima fase l'intento principale è stato quello di ricreare una *texture* che potesse consentire l'utilizzo dei modelli semianalitici descritti senza avere però troppa cura di riprodurre in essa molti dei parametri statistici descrittivi che vengono oggi utilizzati nel caratterizzare la rugosità e limitandosi di fatto al solo soddisfacimento del valore di RMS voluto. In particolare, come si è visto, la distribuzione non è caratterizzata dalla simmetria tipica gaussiana presentando un picco di valori nelle altezze corrispondenti a tutti quei punti sul piano di riferimento che non vengono ricoperti da almeno una semisfera. Inoltre, nulla si è detto riguardo alle funzioni di correlazione ottenute che sono state, in un primo momento, ignorate. Tuttavia i risultati ottenuti che verranno presentati più avanti, in particolare per quanto riguarda il confronto con le superfici generate mediante algoritmi più raffinati, hanno dato riscontri in generale soddisfacenti che, almeno in una prima analisi, non hanno reso necessario uno sviluppo del modello di rugosità.

L'intento ultimo del presente lavoro però, sarà quello di confrontare i risultati ottenuti con alcuni dati sperimentali, con particolare riferimento a [de Boer et al., 1999]. Nell'articolo tutte le prove sono state effettuate con superfici di silicio aventi una rugosità pari a  $\sigma = 2 - 3nm$ , valore più basso di quelli utilizzati inizialmente e che ha generato una riflessione su come il modello utilizzato si comportasse al progressivo diminuire della rugosità. Per come è stato implementato, infatti, una superficie con basso RMS viene riprodotta dal modello con un numero sempre maggiore di semisfere di raggio medio sempre più piccolo dando quindi origine ad una superficie caratterizzata dall'RMS voluto ma con una *texture* molto più *nervosa* quando invece si dovrebbe tendere ad una superficie sempre più liscia e regolare. Inoltre, elemento ancor più grave, al diminuire della dimensione delle semisfere il modello semianalitico andrà ad individuare un numero sempre minore di menischi quando invece la predizione dovrebbe avvicinarsi progressivamente al caso di due piani lisci paralleli. Si è sviluppata così un'alternativa al modello presentato che potesse rappresentare una soluzione alle problematiche descritte, in particolare cercando di considerare la distanza di correlazione e il limite ideale al diminuire della rugosità.

Il nuovo approccio prevede di definire a priori la spaziatura della griglia dei centri delle sfere in rapporto alla distanza di correlazione che si vuole rappresentare, che sarà quindi indipendente dall'RMS che si vuole riprodurre e solo legata alla proprietà fisica del materiale. Il valore dei raggi delle sfere viene poi scelto secondo una procedura simile al modello già utilizzato con l'estrazione di valori da una gaussiana centrata e deviazione standard pari all'RMS voluto che si differenzia però nella scelta del valor medio dei raggi. Se in precedenza quest'ultimo, lo ricordiamo, era stato scelto arbitrariamente pari al doppio della deviazione standard con l'intento di evitare valori dei raggi delle sfere negativi<sup>4</sup>, in questa variante esso non viene più fissato a priori ma è il codice stesso a scegliere il valore più opportuno che consenta di ottenere l'RMS desiderato. A partire da un valore iniziale, che dovrà essere scelto in maniera opportuna, il raggio medio delle sfere verrà progressivamente incrementato: proporzionalmente crescerà così la percentuale di punti sul piano di riferimento coperti da più di una sfera e, crescendo le sovrapposizioni, si andrà così a diminuire il valore dell'RMS corrente

<sup>4</sup>I raggi delle sfere erano infatti ottenuti sommando alla quota media le diverse estrazioni casuali



che viene valutato di volta in volta. La procedura si arresta quando l'RMS ottenuto si discosta da quello voluto meno di una tolleranza prefissata. In questo modo quella che si ottiene sarà una distribuzione ancora di semisfere che però *emergono* solo per una calotta sferica che diventa sempre più limitata al diminuire della rugosità voluta e al conseguente aumento del raggio medio e quindi della sovrapposizione tra le semisfere stesse.

In sintesi, l'algoritmo si può riassumere nei seguenti punti:

1. inizializzazione dei parametri geometrici della superficie, nonché delle proprietà fisiche del materiale che si vuole riprodurre (distanza di correlazione, rugosità media);
2. generazione della griglia di centri delle sfere con spaziatura proporzionale alla distanza di correlazione;
3. estrazione casuale da una gaussiana centrata di deviazione standard pari all'RMS di un numero di valori pari al numero di sfere da utilizzare;
4. scelta del nuovo raggio medio e costruzione dei raggi delle singole sfere sommando a tale valore le realizzazioni estratte al punto precedente;
5. valutazione dell'RMS della superficie ottenuta con la procedura descritta in sezione 5.3.1;
6. se l'RMS è sufficientemente vicino a quello desiderato la procedura si arresta altrimenti si ritorna al punto 4 aumentando il valore del raggio medio di una quantità prefissata.

In precedenza si è detto che il valore iniziale del raggio medio delle sfere deve essere scelto opportunamente. Esso non potrà infatti essere troppo piccolo altrimenti si corre il rischio di ottenere una soluzione non accettabile in quanto l'RMS desiderato può essere ottenuto anche con dei raggi molto piccoli e buona parte della superficie libera da sfere. Più precisamente, il valore iniziale scelto in tutte le prove, che ha consentito di evitare sempre di incorrere in soluzioni non accettabili, è stato pari alla metà della spaziatura della griglia di centri delle sfere così da avere una situazione iniziale caratterizzata già da pochi punti del piano che non sono ricoperti da almeno una sfera e da un RMS iniziale superiore a quello desiderato. In Figura 5.15 si riporta l'andamento dell'RMS ottenuto al crescere delle iterazioni, a partire da un valore di raggio medio più piccolo di quello in realtà utilizzato: come si osserva, dopo poche iterazioni si raggiunge rapidamente un valore di RMS sufficientemente vicino a quello voluto ma caratterizzato da una superficie non accettabile dove quasi nessun punto del piano medio risulta ricoperto da almeno una sfera. La soluzione corretta è invece quella che viene raggiunta dopo che l'RMS ha raggiunto un picco - che si è osservato essere realizzato circa in corrispondenza del raggio medio poi utilizzato nelle prove e prima descritto - successivamente al quale ha inizio un decremento progressivo fino alla soglia desiderata.

L'andamento illustrato in Figura 5.15 mette anche in luce un limite della procedura implementata che non sembra in grado di rappresentare, almeno per la distanza di correlazione utilizzata, un valore di RMS superiore a quello di circa  $18nm$ . Tale limite non è per i nostri scopi particolarmente significativo dal momento che le rugosità di interesse sono molto più basse.

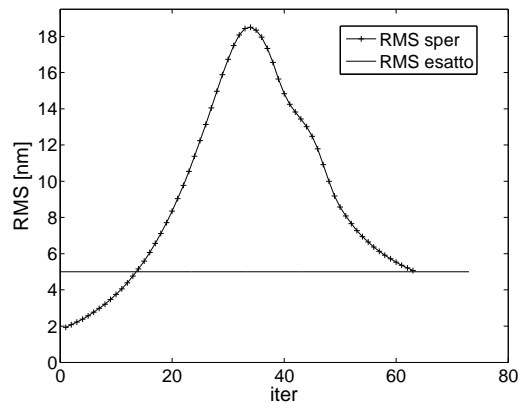
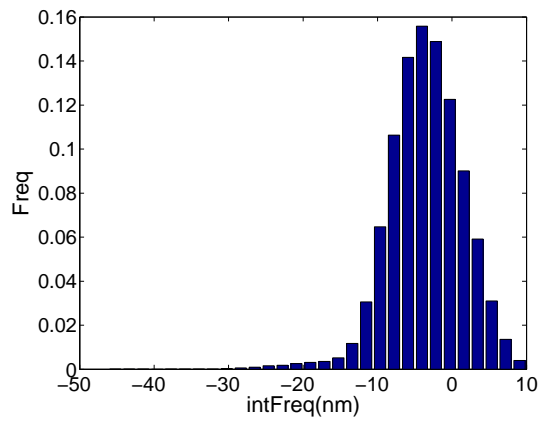
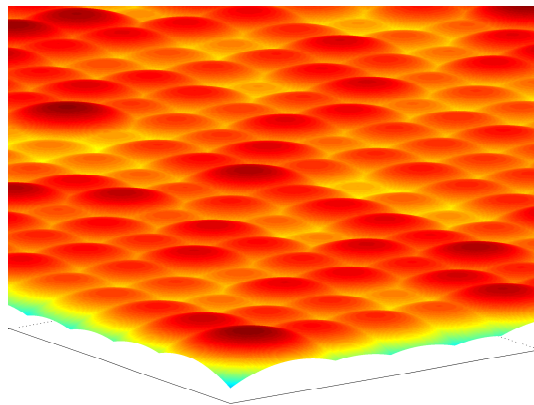
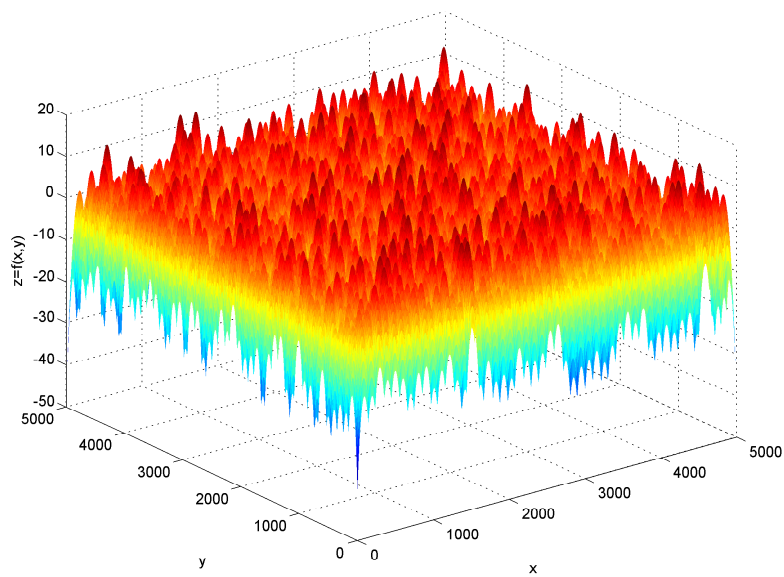
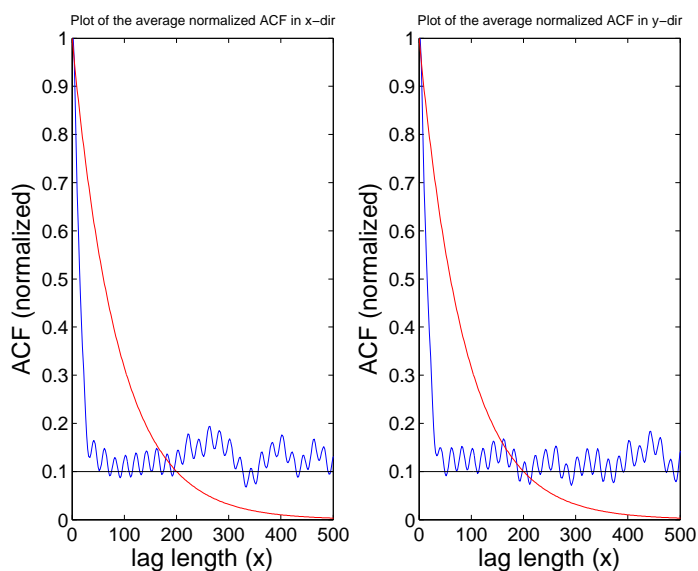


Figura 5.15: Evoluzione del valore di RMS ottenuto dall’algoritmo nel corso delle iterazioni.

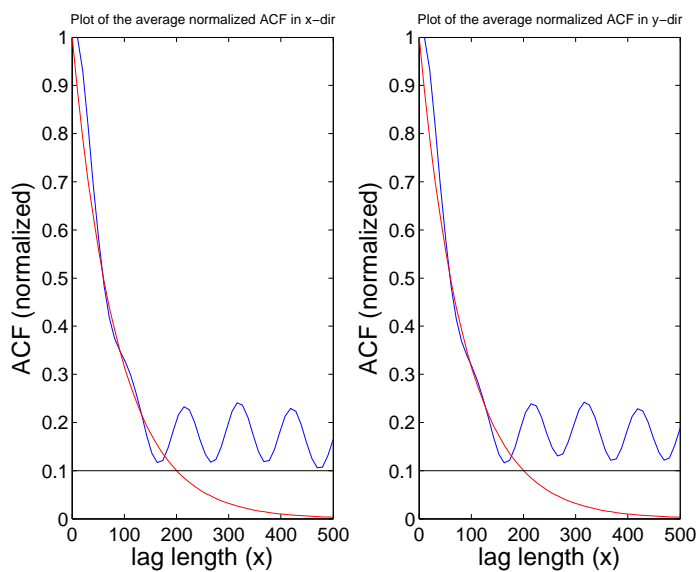
### Analisi a posteriori della superficie generata

Con la stessa procedura descritta in sezione 5.3.1 si sono analizzate le distribuzioni ottenute e di seguito vengono proposti alcuni dei risultati con particolare riferimento alla funzione di correlazione e all’andamento di un singolo profilo. In Figura 5.16 sono riportate la distribuzione delle altezze e la superficie ottenuta per un caso  $\sigma = 5nm$ . Nello specifico, gli indicatori di gaussianità ottenuti sono pari a  $Sk = -0.66$  e  $K = 5.18$  e da questo preciso punto di vista non si riscontrano particolari differenze rispetto all’algoritmo precedente. Tuttavia, come mostra l’istogramma, rispetto a quello di Figura 5.13 il picco di valori minimi è stato eliminato: la concentrazione di altezze è tutta nell’intervallo  $\pm 2\sigma$  con una limitata residua presenza di valori minimi che, come si può intuire dalla Figura 5.16(b)-(c) sono in gran parte concentrati in prossimità dei bordi del piano medio. Dal punto di vista invece della distanza di correlazione, in Figura 5.17 si riportano gli andamenti della funzione  $ACF$  sia per una superficie generata con l’algoritmo precedente (nel seguito indicato con 1) che per una, a parità di rugosità, relativa alla nuova procedura (indicata invece con algoritmo 2). Si può notare come la nuova spaziatura adottata consenta di raggiungere un notevole miglioramento rispetto all’andamento teorico. Infine, riguardo i singoli profili rugosi, in Figura 5.18 si riporta il confronto, a parità di rugosità, tra i due algoritmi basati sull’utilizzo di semisfere con le superfici generate mediante il metodo di Hutonder. Come si nota, l’algoritmo 1 è caratterizzato da un profilo che, da un punto di vista dell’escursione rispetto al piano medio, non presenta particolari differenze rispetto agli altri ma la frequenza di picchi è notevolmente più elevata rispetto invece a quanto ottenuto con l’algoritmo 2 che, concordemente alla funzione di correlazione calcolata, presenta un profilo caratterizzato da una frequenza nelle altezze più vicina a quella rilevata nelle superfici generate con il filtro digitale. In Figura 5.19 si riportano invece tre profili per delle superfici ottenute attraverso l’algoritmo 2 al diminuire della rugosità, per mostrare come questa nuova modellazione non sia più soggetta alla problematica descritta per rugosità basse che era invece evidente nell’algoritmo 1: al diminuire della rugosità, in questo caso, vanno ad aumentare sia il raggio medio che la sovrapposizione tra le semisfere, con una conseguente progressiva riduzione dell’escursione dei picchi rispetto al piano medio senza variarne però la frequenza.

(a) *Distribuzione delle altezze.*(b) *Particolare della superficie con gli assi alla stessa scala.*(c) *Vista d'insieme della superficie. Si noti la forte differenza nella scala in direzione  $z$ .*Figura 5.16: Superficie rugosa di lato  $5\mu m$ .  $\sigma = 5nm$

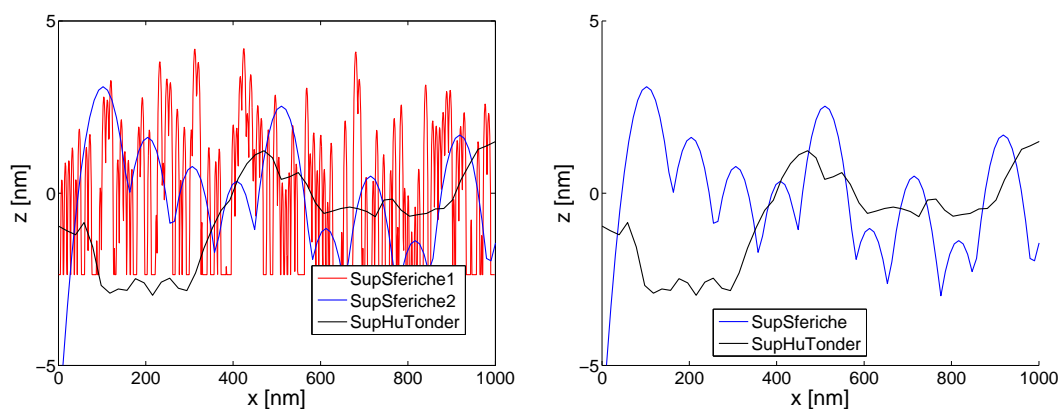


(a) *Funzione di correlazione per una superficie generata con l'algoritmo 1 (blu) a confronto con il valore teorico (rosso).*



(b) *Funzione di correlazione per una superficie generata con l'algoritmo 2 (blu) a confronto con il valore teorico (rosso).*

Figura 5.17: Confronto tra le funzioni di correlazione ottenute con i due algoritmi e l'andamento *esatto* per una superficie rugosa di lato  $5\mu m$ .  $\sigma = 5nm$



(a) Confronto tra i profili relativi agli algoritmi basati su semisfere (1 e 2) e quello relativo all'utilizzo del filtro digitale (Hu-Tonder).

(b) Confronto tra i profili relativi all'algoritmo 2 e l'algoritmo Hu-Tonder.

Figura 5.18: Confronto tra singoli diversi profili per gli algoritmi per una superficie rugosa di lato  $5\mu m$ .  $\sigma = 2nm$

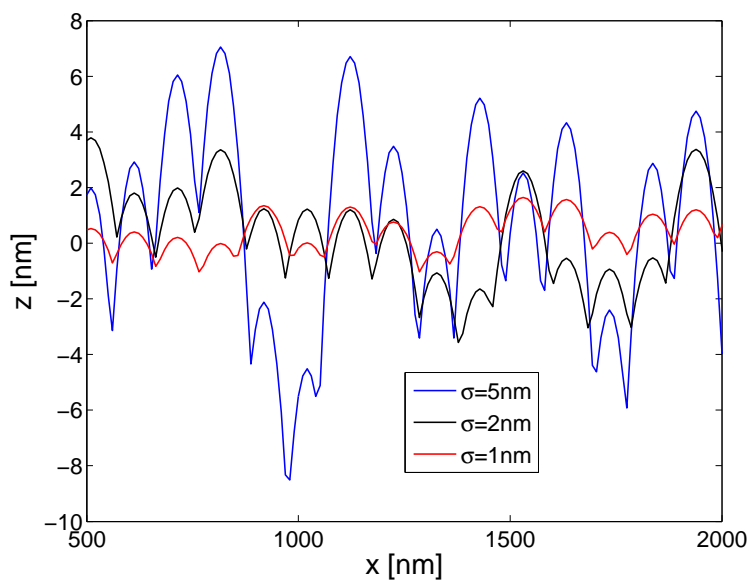


Figura 5.19: Singoli profili di rugosità ottenuti con l'algoritmo 2 al diminuire della rugosità.



## Capitolo 6

# Stima dell'adesione per superfici rugose

In questo capitolo si propone l'utilizzo dei modelli predittivi presentati in precedenza, in un contesto più prettamente di interesse ingegneristico come quello dello studio della forza di adesione tra generiche superfici rugose.

### 6.1 Assemblaggio delle superfici

Per poter procedere alla simulazione occorre considerare due superfici rugose poste in prossimità tra loro: sono state fatte per questo due diverse scelte di assemblaggio.

#### Assemblaggio speculare

In un primo caso si è considerata, sopra la superficie generata, una seconda superficie ad essa speculare collocata ad un'altezza tale per cui le due emisfere (superiore e inferiore) di raggio massimo generate con gli algoritmi 1 e 2 fossero in contatto tra loro in corrispondenza delle rispettive sommità. Riportiamo in Figura 6.1 il confronto, per un assemblaggio simmetrico, di due superfici generate con l'algoritmo 1 con due generate mediante l'algoritmo 2. Le superfici generate con l'algoritmo di Hu-Tonder, anch'esse per questo caso una speculare dell'altra, sono state collocate alla stessa distanza media ottenuta per quelle generate con gli algoritmi 1 e 2.

#### Assemblaggio non speculare

La scelta appena descritta produce evidentemente due superfici esattamente identiche, non solo per quanto riguarda le proprietà statistiche ma anche da un punto di vista morfologico. Tale configurazione non può considerarsi rappresentativa per le applicazioni ingegneristiche di interesse e per questo si è voluto considerare una diversa distribuzione delle asperità superiori. Nel caso delle superfici modellate con emisfere si è operata una rotazione delle medesime rispetto ad un asse di simmetria della superficie. In realtà quello che viene cambiato è solo il valore del raggio dell'emisfera mentre la concavità e i centri rimangono analoghi al caso speculare. Riportiamo nuovamente in Figura 6.2 il confronto, per un assemblaggio non simmetrico, di due superfici generate con l'algoritmo 1 con due generate mediante l'algoritmo 2.

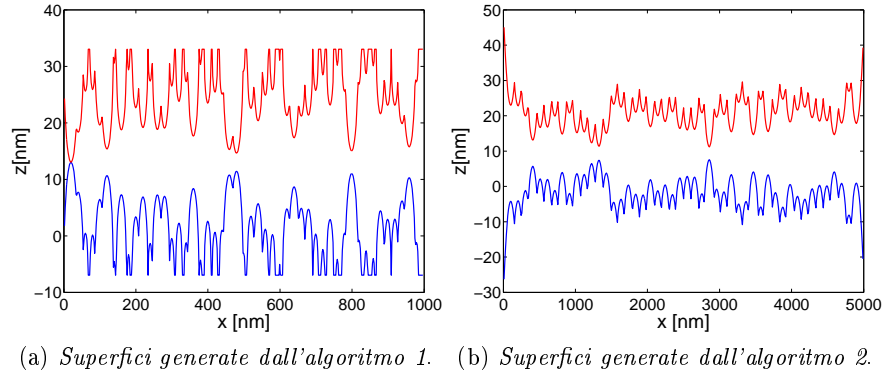


Figura 6.1: Assemblaggio simmetrico per due superfici generate dall'algoritmo 1, confrontato con lo stesso per due superfici generate dall'algoritmo 2. Rugosità  $\sigma = 5nm$ . Si osservi la diversa scala delle ascisse tra i due grafici.

Per quanto riguarda le superfici generate con algoritmo di Hu-Tonder, invece, si

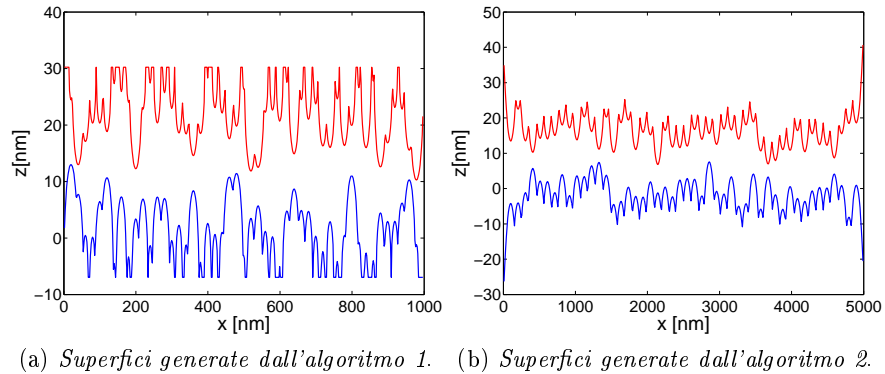


Figura 6.2: Assemblaggio non simmetrico per due superfici generate dall'algoritmo 1, confrontato con lo stesso per due superfici generate dall'algoritmo 2. Rugosità  $\sigma = 5nm$ . Anche per questo caso si vuole rimarcare la diversa scala delle ascisse tra i due grafici.

è scelto di generare due distribuzioni di altezze una l'esatta copia dell'altra: la prima costituisce la superficie inferiore mentre quella superiore è ottenuta mediante una rotazione di  $180^\circ$  lungo l'asse  $y$  della seconda. Questa scelta, che rende le superfici maggiormente scorrelate rispetto alla rotazione dei soli raggi delle sfere, era possibile anche per le superfici generate con gli algoritmi 1 e 2 dove si sarebbe potuta ruotare l'intera texture (ricavabile attraverso la procedura descritta in sezione 5.3.1): in questo modo però sarebbe potuta venir meno la condizione che ogni coppia di sfere (superiore e inferiore) avesse le coordinate dei due centri esattamente speculari, ipotesi su cui si fondano tutti i modelli  $M_i$ .



## 6.2 Adesione capillare

Dopo aver assemblato le due superfici, si può procedere applicando i diversi modelli predittivi per la forza di attrazione capillare. Di seguito presentiamo alcuni andamenti della forza prevista al variare di alcuni parametri fisici, per le tre diverse tipologie di superfici rugose e per i due diversi assemblaggi descritti.

### 6.2.1 Forza - Rugosità. Superfici correlate.

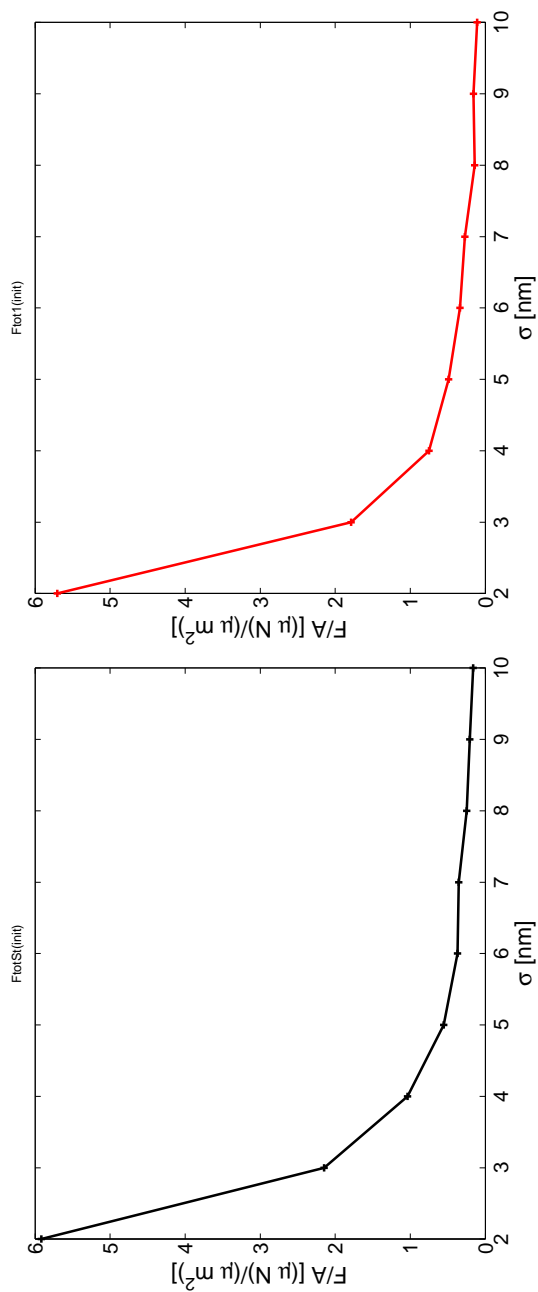
#### Superfici algoritmo 1

Si riporta in Figura 6.3 l'andamento dell'intensità della forza al variare della rugosità per i quattro modelli  $M_i$ . La distanza tra le due superfici è di volta in volta pari a quella per cui le due sfere di raggio massimo sono a contatto in corrispondenza delle sommità. L'andamento della forza che qualitativamente ci si aspetterebbe, con un'intensità che diminuisca monotonamente all'aumentare della rugosità, è riscontrato nei modelli meno raffinati mentre per  $M_2$  e  $M_3$  è sorprendentemente disatteso per rugosità  $\sigma > 5nm$ . Non è del tutto chiaro al momento, causa eccessivo onere computazionale, se tale andamento sia solo dovuto all'unicità della realizzazione campionaria. I grafici mostrati, infatti, si riferiscono ad una singola simulazione e, all'aumentare della rugosità, diminuisce il numero di sfere utilizzate per la modellazione con la possibile conseguenza che i modelli più raffinati, maggiormente sensibili alla dimensione delle sfere, possano essere in questi casi troppo influenzati dai singoli valori dei pochi raggi considerati. A sostegno di questa ipotesi, si riportano in Figura 6.4, gli andamenti della forza al variare della rugosità per una superficie di area  $9\mu m^2$  (per i già citati oneri computazionali, solo a partire da  $\sigma = 5nm$ ). Aumentando il numero di sfere utilizzate, a parità di rugosità rispetto al caso precedente, si vede come anche per i modelli  $M_2$  e  $M_3$  si recuperi qui la monotonia. Si osservi altresì che l'ordine di grandezza della forza non cambia<sup>1</sup>, lasciando supporre che anche la previsione con un numero di sfere minore sia, seppur meno precisa, comunque accettabile.

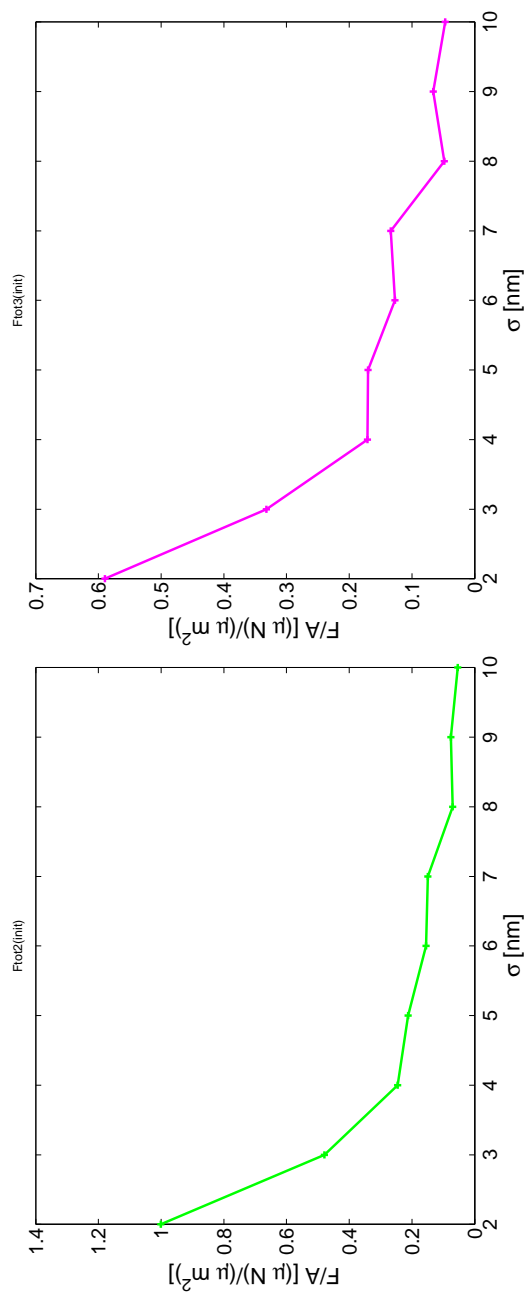
Si riportano in Figura 6.5 gli andamenti sovrapposti dei quattro modelli per la distanza di separazione prima descritta, ai quali è aggiunta l'analoga previsione del modello *puntuale* descritto dalla eq. (2.13) in sezione 2.4 applicato a superfici rugose generate con l'algoritmo di Hu-Tonder. Come in precedenza, in Figura 6.6 viene riproposto l'andamento per delle superfici di dimensioni maggiori al fine di recuperare quella monotonia che può essere persa a causa della non sufficiente rappresentazione statistica.

In entrambi i grafici si può apprezzare come la forza prevista dal modello *puntuale* sia in buon accordo con quelle ottenute dai modelli sfera-sfera, nonostante le superfici su cui essi vengono testati siano, come già ampiamente discusso, marcatamente diverse. Come ci si può aspettare, inoltre, la previsione del modello *puntuale* è più vicina a quella dei modelli  $M1$  e *standard-approximation*: del resto, quest'ultimo applicato alle asperità sferiche non è nient'altro, come già detto, che una particolarizzazione del modello eq. (2.13).

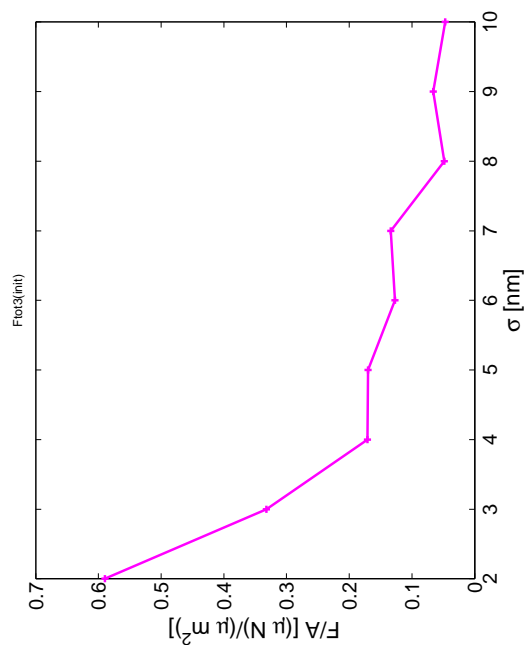
<sup>1</sup>Si ricorda che in tutti i grafici si riporta sempre l'intensità della forza riscalata sull'area



(b) Forza totale per unità di superficie. Modello M1.

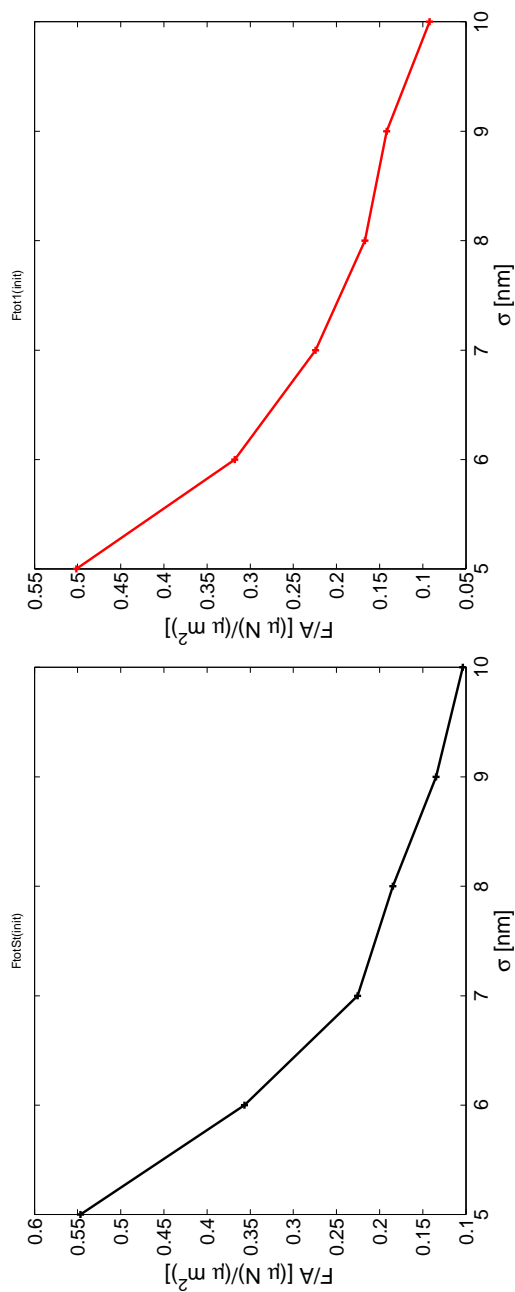


(d) Forza totale per unità di superficie. Modello M3.

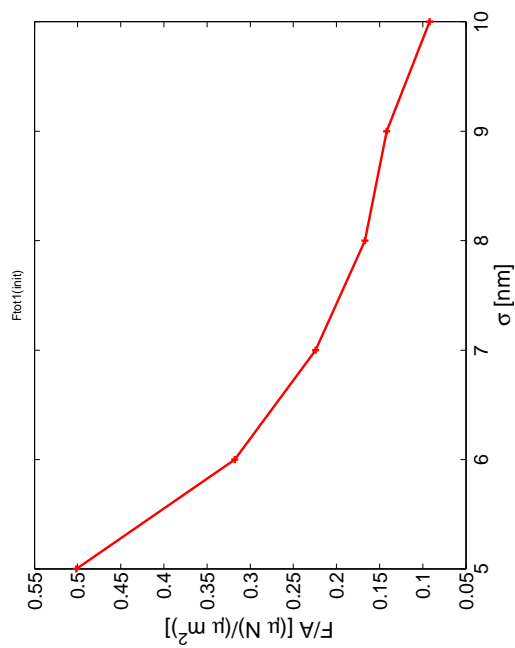


(d) Forza totale per unità di superficie. Modello M3.

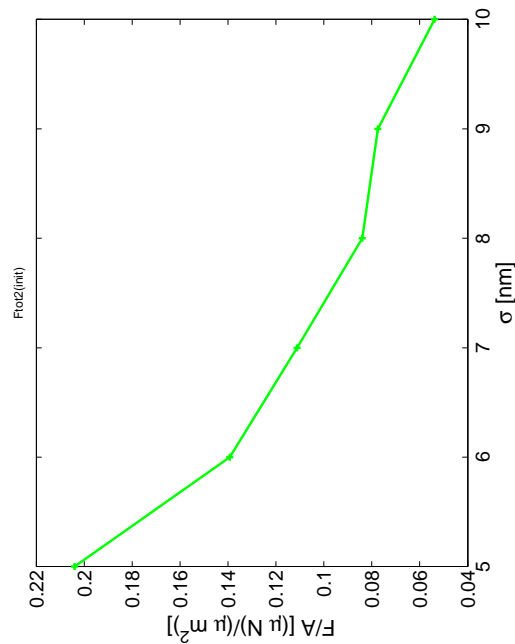
Figura 6.3: Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $1\mu\text{m}^2$ .



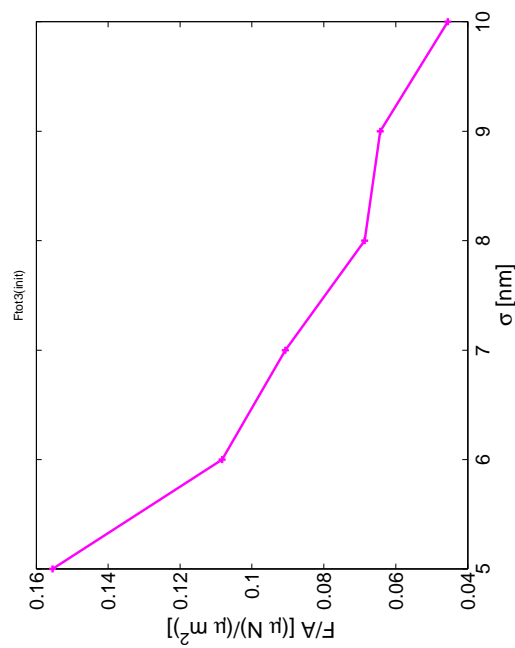
(a) Forza totale. Modello standard-approximation.



(b) Forza totale. Modello M1.



(c) Forza totale. Modello M2.



(d) Forza totale. Modello M3.

Figura 6.4: Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $9\mu\text{m}^2$ .

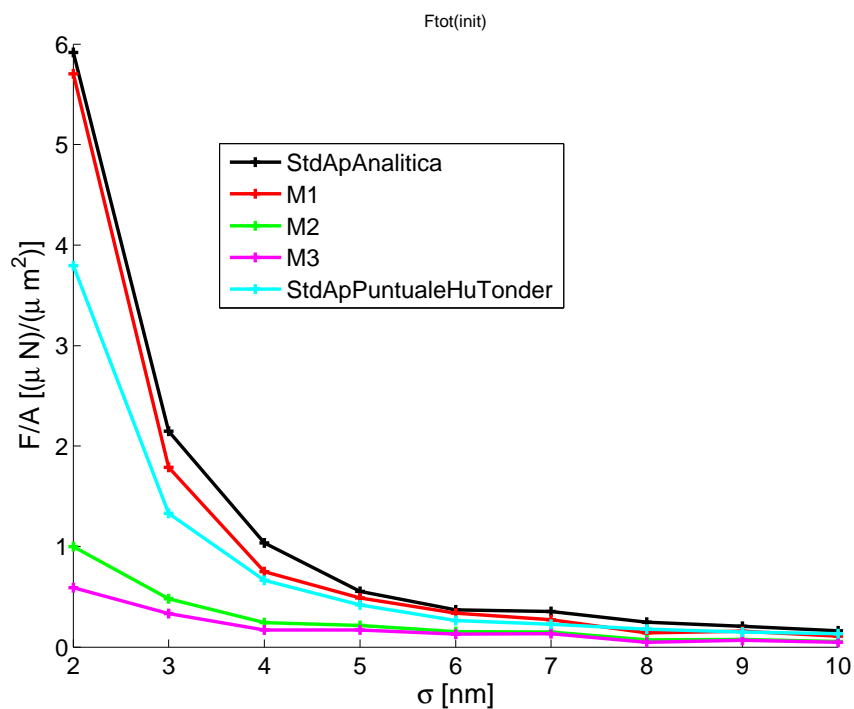


Figura 6.5: Andamento forza-rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $1 \mu\text{m}^2$ .

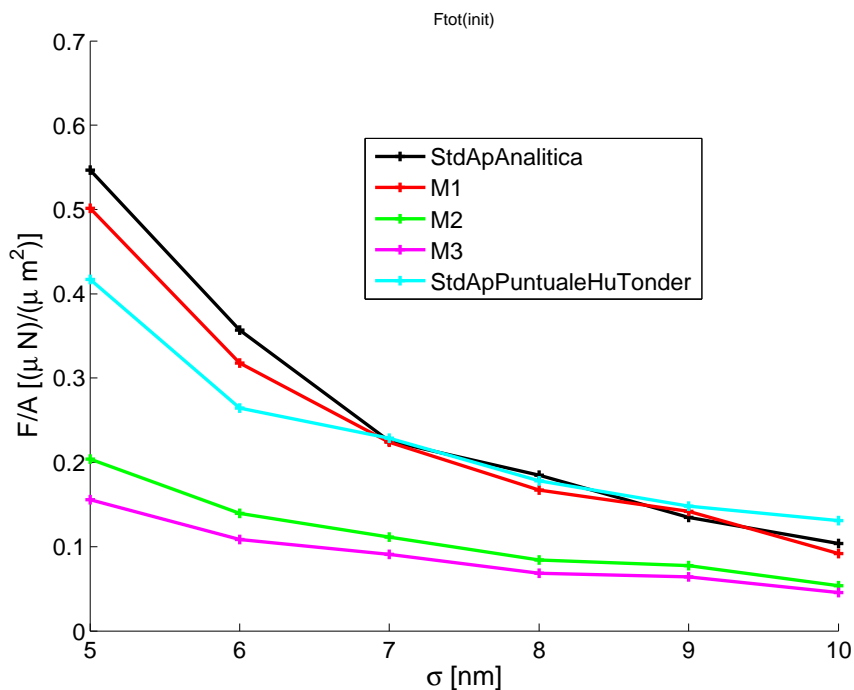


Figura 6.6: Andamento forza-rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $9 \mu\text{m}^2$ .

### Superfici algoritmo 2

Si riporta in Figura 6.7 l'andamento dell'intensità della forza al variare della rugosità per i tre modelli semianalitici: i risultati sono anche confrontati con quelli ottenuti attraverso il modello puntuale sulle stesse superfici e su quelle generate attraverso l'algoritmo di Hu-Tonder. Confrontando il grafico con quello di Figura 6.5 si può notare come al diminuire della rugosità i modelli siano ora più vicini. Se per le superfici generate con l'algoritmo 1 non si era ritenuto necessario scendere oltre la soglia di rugosità  $\sigma = 2nm$ , in Figura 6.8 riportiamo invece lo stesso andamento ma a partire dal valore  $\sigma = 1nm$ : come si può osservare c'è un forte incremento della forza, per tale valore di rugosità, comune a tutti i modelli ad eccezione della *standard-approximation* dove esso viene ulteriormente accentuato. Di particolare interesse è infine la Figura 6.9 dove viene mostrato l'andamento della forza al variare della rugosità per il solo modello  $M_3$  a confronto sui due diversi algoritmi di modellazione della rugosità: come si può osservare, se per valori di  $\sigma$  superiori a  $5nm$  il modello non dà risultati molto diversi sulle due superfici (Figura 6.9(b)), così non si può dire per rugosità più basse (Figura 6.9(a)) dove combinato con l'algoritmo 1 dà origine ad un andamento non accettabile da un punto di vista fisico, con una forza quasi nulla per  $\sigma = 1nm$  causata dal fatto, come già discusso, che le sfere utilizzate hanno dimensioni molto piccole; tale problematica non si riscontra invece con il nuovo algoritmo di modellazione che presenta un andamento decisamente più verosimile.

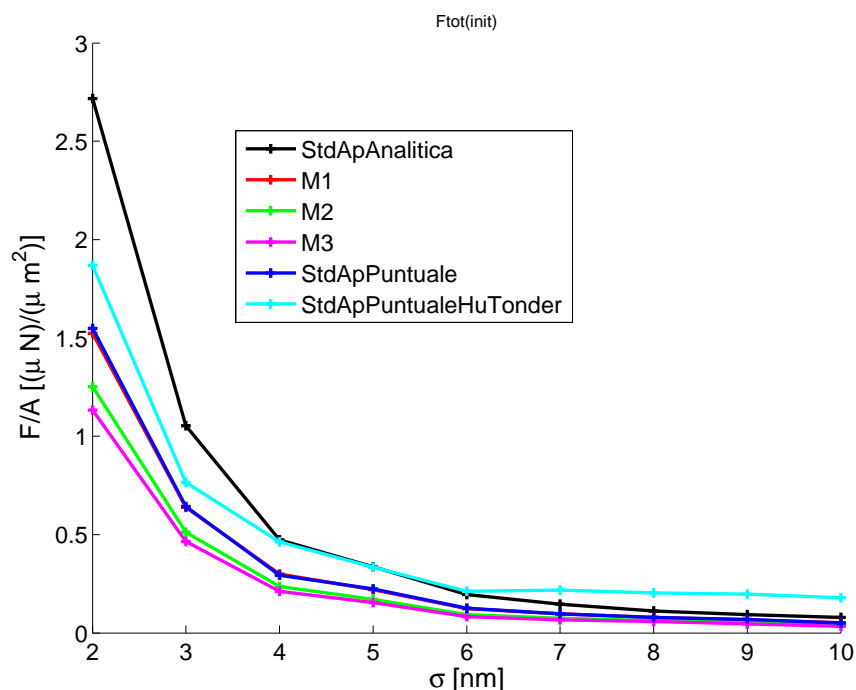


Figura 6.7: Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli.  $\sigma_{\min} = 2nm$ . Area superficie:  $25\mu m^2$ .

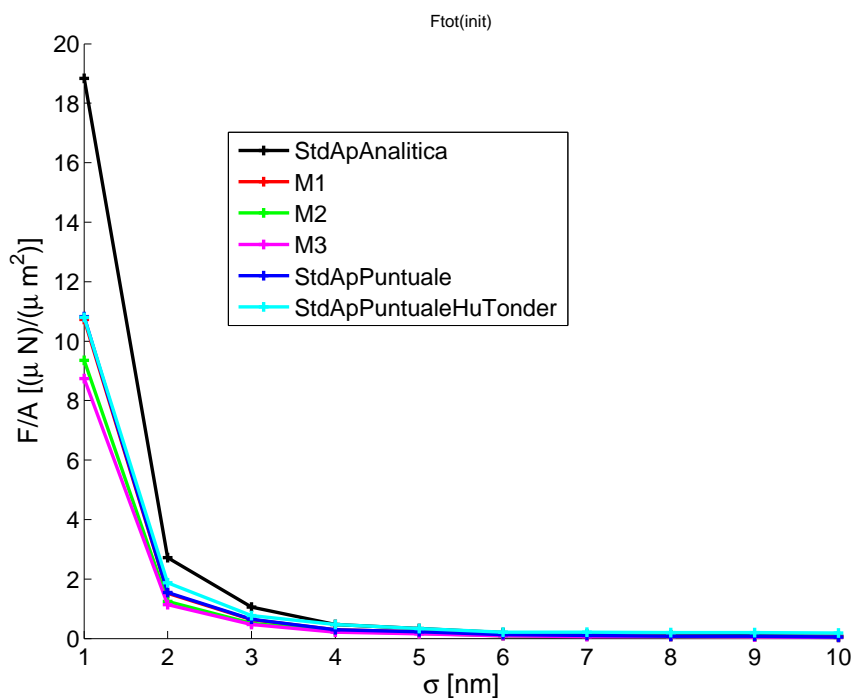


Figura 6.8: Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli.  $\sigma_{\min} = 1nm$ . Area superficie:  $25\mu m^2$ .

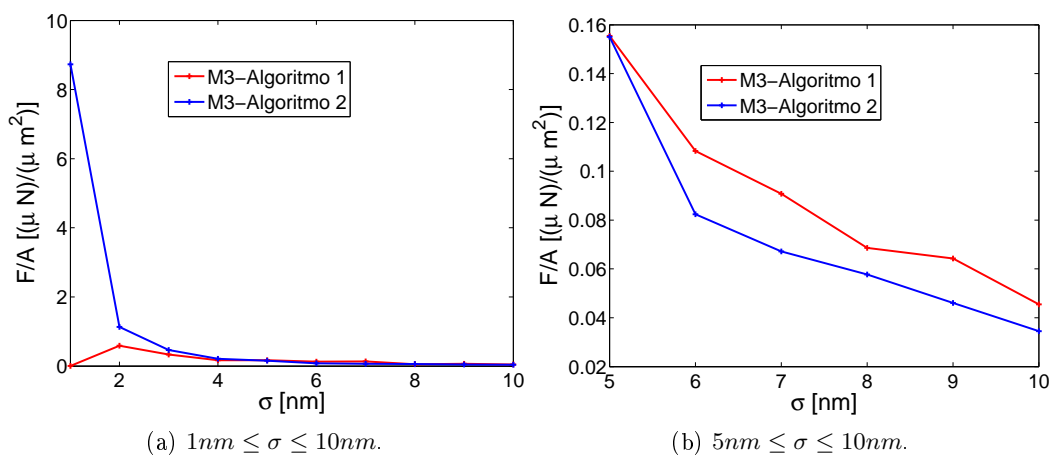


Figura 6.9: Andamento forza per unità di superficie - rugosità per il solo modello  $M_3$  sulle due diverse superfici rugose modellate con semisfere generate dai due algoritmi implementati.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $25\mu m^2$ .

## 6.2.2 Forza - Rugosità. Superfici non correlate

### Superfici algoritmo 2

Si riporta in Figura 6.10 l'andamento dell'intensità della forza al variare della rugosità per i tre modelli semianalitici sulle superfici generate con l'algoritmo 2 e per il modello puntuale sulle superfici di tipo Hu-Tonder. Come in precedenza riportiamo, in Figura 6.11 lo stesso grafico a partire dal valore di rugosità  $\sigma = 1nm$ . Rispetto alla Figura 6.7 non ci sono grossi cambiamenti se non una comune modesta diminuzione dell'intensità per tutti i modelli. Anche se verrà dedicato più spazio in seguito, occorre premettere che gli andamenti presentati sono in realtà la media di 10 realizzazioni statistiche per i modelli per sfere, e di 15 realizzazioni per quello puntuale sulle superfici di Hu-Tonder. Rispetto all'assemblaggio speculare, infatti, questa variante si è mostrata molto più sensibile alla singola realizzazione, tanto che sulla singola realizzazione o su un numero comunque non sufficiente, si perde l'atteso andamento monotono decrescente all'aumentare della rugosità, come mostra la Figura 6.12 che si riferisce ad una media di 5 realizzazioni.

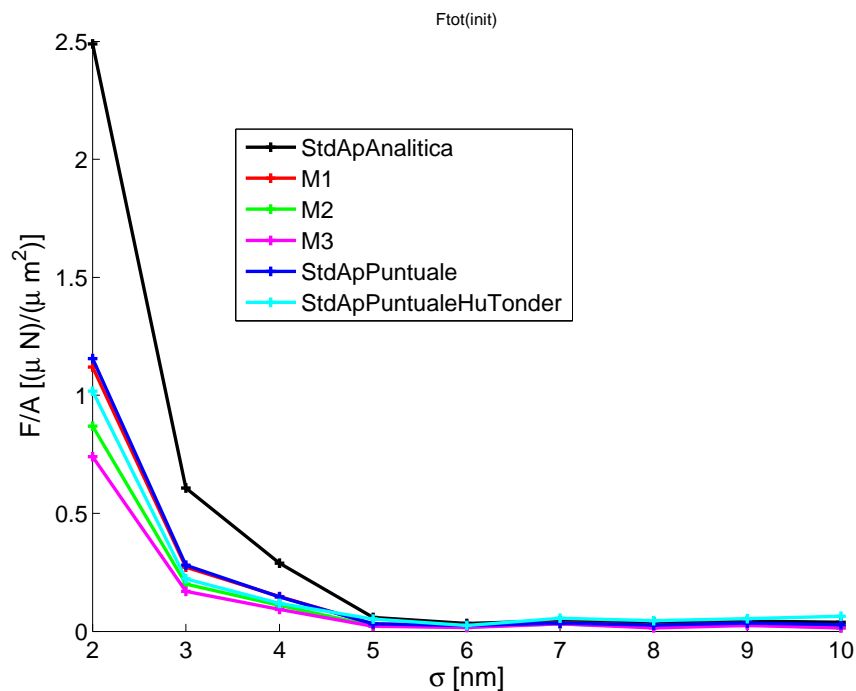


Figura 6.10: Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli.  $\sigma_{\min} = 2nm$ . Area superficie:  $25\mu m^2$ .

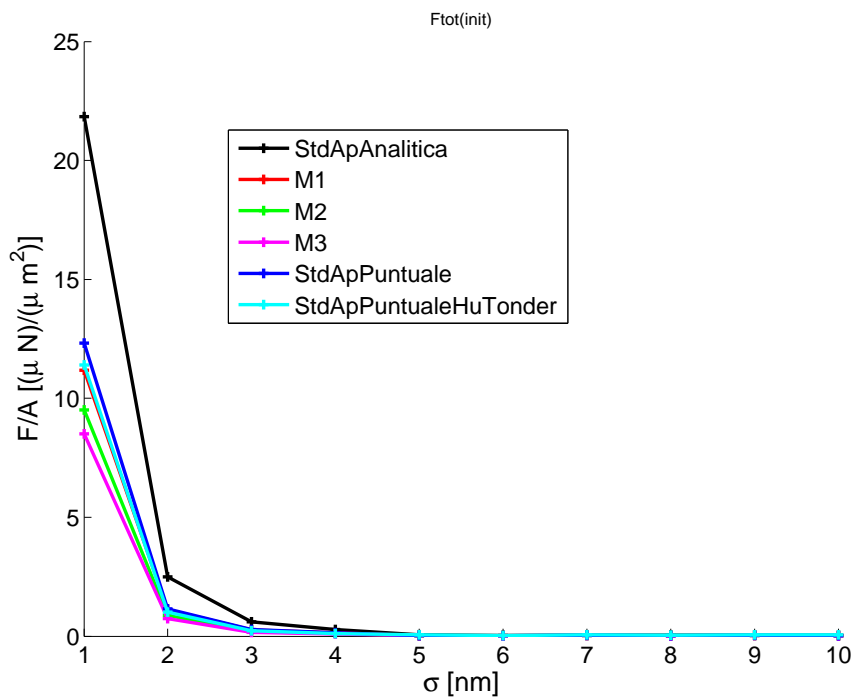


Figura 6.11: Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici, alla distanza iniziale.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli.  $\sigma_{\min} = 1nm$ . Area superficie:  $25\mu m^2$ .

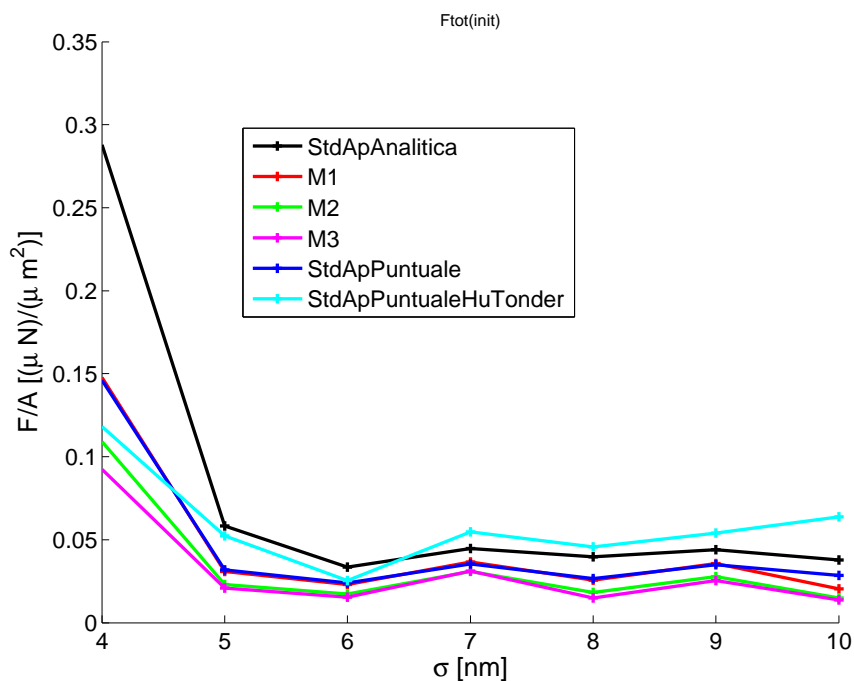


Figura 6.12: Andamento forza per unità di superficie - rugosità tra due superfici con un numero insufficiente di realizzazioni statistiche, alla distanza iniziale.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli.  $\sigma_{\min} = 4nm$ . Area superficie:  $25\mu m^2$ .



### 6.2.3 Forza - RH. Superfici correlate

#### Superfici algoritmo 1

Si riporta in Figura 6.13 l'andamento dell'intensità della forza al variare dell'umidità relativa per i quattro modelli. La distanza tra le due superfici è sempre ancora pari a quella per cui le due sfere di raggio massimo sono a contatto in corrispondenza delle sommità. Gli andamenti non presentano particolari sorprese rispetto alle attese, se non per quanto riguarda l'intensità della forza che verrà discussa più avanti. Per valori di  $RH < 50\%$  i quattro modelli non presentano sostanziali differenze mentre è per valori successivi, quando l'intensità delle forze e il numero di menischi aumentano, che le forze previste si discostano in modo considerevole.

In Figura 6.14 invece, analogamente a quanto visto per la forza al variare della rugosità, si propone il confronto tra la predizione dei modelli per sfere con quella del modello puntuale su superfici generate con l'algoritmo di Hu-Tonder. Anche qui valgono considerazioni analoghe a quanto visto in precedenza, con il modello *puntuale* che si avvicina maggiormente alla *standard approximation* per valori di RH sufficientemente elevati e si mantiene invece in linea anche con tutti gli altri per umidità relative basse dove la forza capillare risulta, di fatto, trascurabile. In Figura 6.15 viene riportato lo stesso andamento privato del valore della forza per  $RH = 0.9$  dove si assiste ad un picco molto elevato in modo da migliorare la leggibilità per umidità inferiori: si può osservare come ci sia una differenza del modello *puntuale* che prevede una forza non nulla pressoché costante (o comunque caratterizzata da un incremento trascurabile) fino a valori di  $RH \approx 0.5$  contrariamente a tutti gli altri modelli che partono invece da valori di forza prossimi allo zero per crescere monotonamente in modo più marcato in tutto l'intervallo.

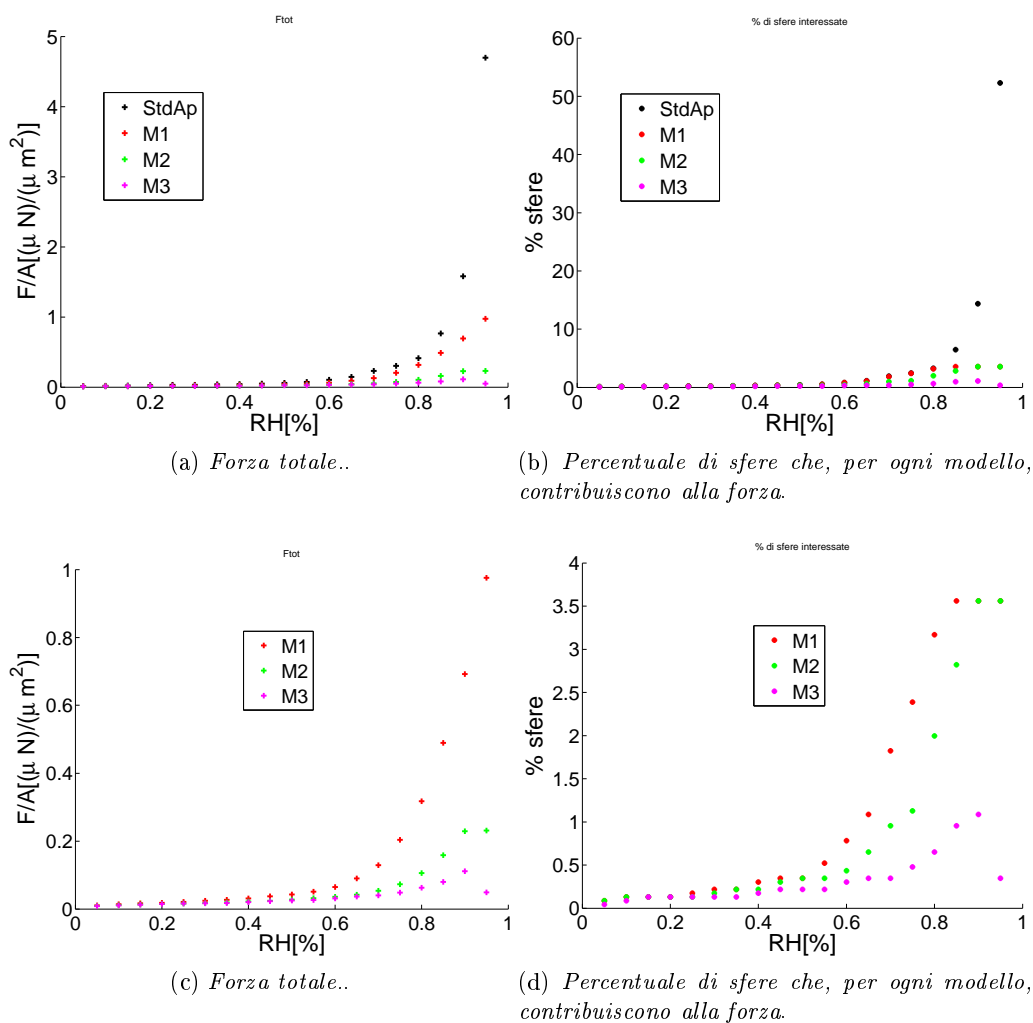


Figura 6.13: Andamento forza per unità di superficie - RH tra due superfici, alla distanza iniziale.  $\sigma = 5nm$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $1\mu m^2$ . Per lo stesso caso, oltre ai plot relativi ai quattro modelli, si riportano gli stessi grafici senza i dati relativi alla *standard-approximation* per migliorare la leggibilità.

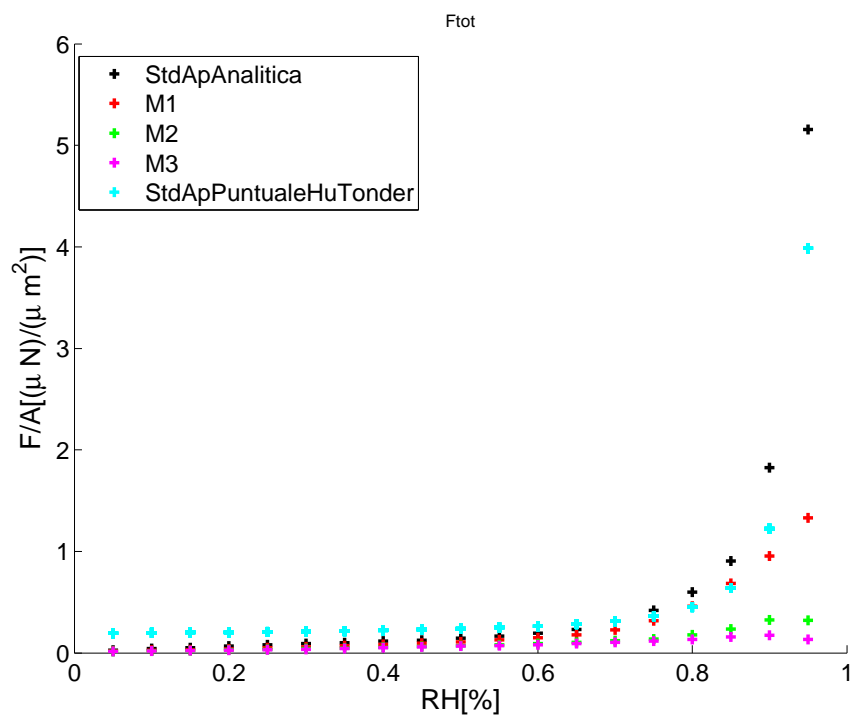


Figura 6.14: Andamento forza per unità di superficie - RH tra due superfici, alla distanza iniziale.  $\sigma = 5nm$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $1\mu m^2$ .

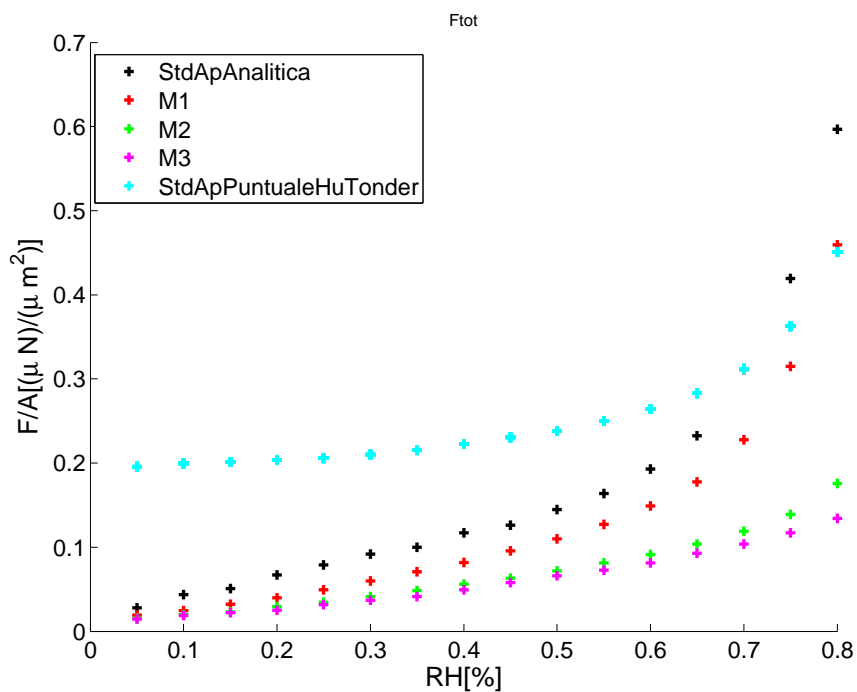


Figura 6.15: Andamento forza per unità di superficie - RH(0:0.8) tra due superfici, alla distanza iniziale.  $\sigma = 5nm$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $1\mu m^2$ .

## Superfici algoritmo 2

Si riporta in Figura 6.16 l'andamento dell'intensità della forza al variare dell'umidità relativa per i quattro modelli sempre alla stessa distanza iniziale. Gli andamenti presentano un comportamento analogo a quelli visti per le superfici generate con l'algoritmo 1 con un'intensità globale ridotta. Come mostrano, inoltre, gli andamenti riportati in Figura 6.16(c)-(d) dei soli modelli  $M_i$ , si osserva un avvicinamento generale delle tre previsioni: in particolare non è più presente il picco a RH elevati per il modello  $M_1$  e, ancor più significativo, non si assiste nei modelli  $M_2$  e  $M_3$  ad un innaturale decremento della forza e delle sfere interessate da un menisco per valori di  $RH = 0.9$ , come invece accadeva per le superfici relative all'algoritmo 1 (cfr. Figura 6.13(c)-(d)).

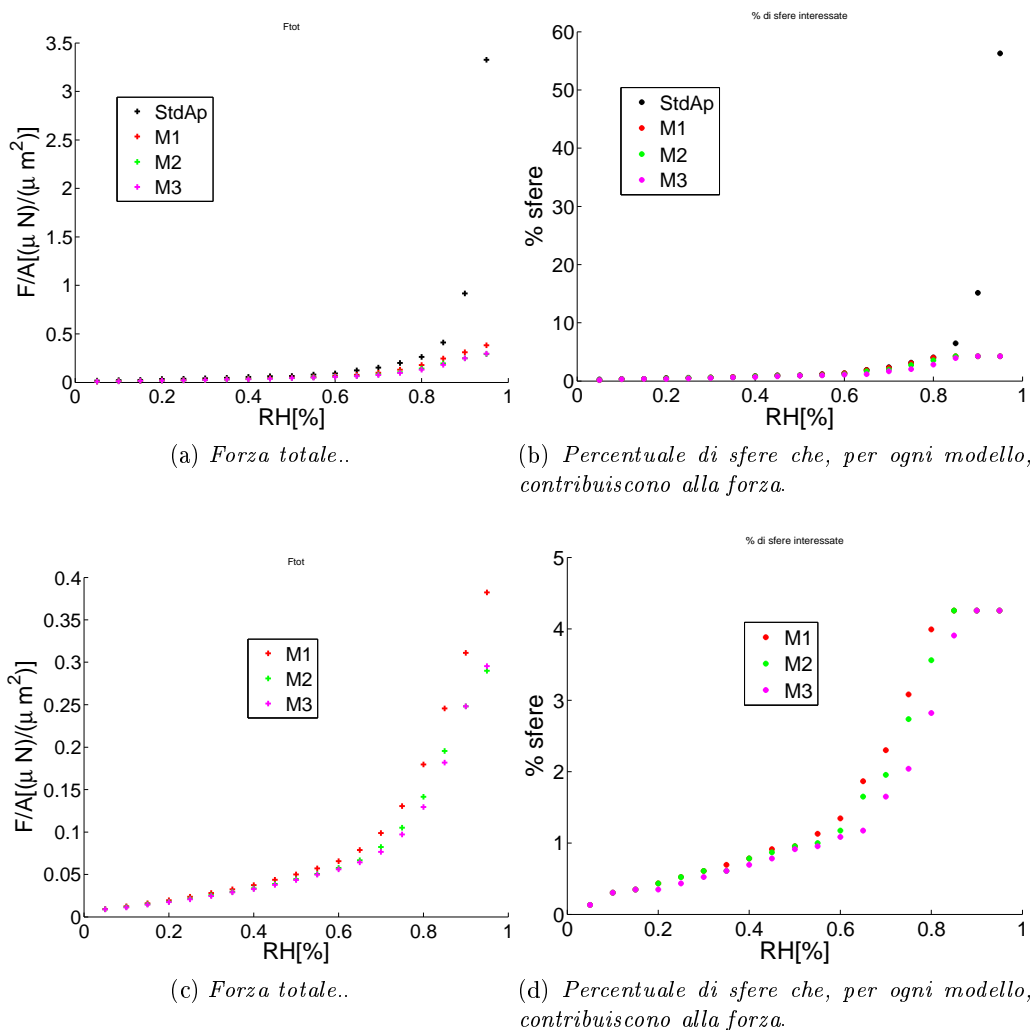


Figura 6.16: Andamento forza per unità di superficie - RH tra due superfici, alla distanza iniziale.  $\sigma = 5nm$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $25\mu m^2$ . Per lo stesso caso, oltre ai plot relativi ai quattro modelli, si riportano gli stessi grafici senza i dati relativi alla *standard-approximation* per migliorare la leggibilità.

### 6.2.4 Forza - Distanza media di separazione. Superfici correlate

#### Superfici algoritmo 1

Si riportano in Figura 6.17, 6.18 e 6.19 gli andamenti dell'intensità della forza al variare della distanza di separazione per i quattro modelli. La distanza riportata in ascissa si riferisce al valore preso tra i piani medi delle due superfici. Si osservi come tale distanza sia in accordo con le scelte modellistiche fatte. Se si considera, ad esempio, il caso  $\sigma = 5nm$  (per gli altri vale un ragionamento analogo), la distanza iniziale si vede essere pari a circa  $20nm$ . Tale valore è conseguenza del raggio massimo atteso dalle sfere che sarà  $r_{max} \approx 20nm$  ( $10nm$  per il valor medio della quota  $d$  e altrettanti di deviazione standard per eccesso dovuti all'estrazione casuale): i piani delle basi delle sfere per le due superfici sono così ad una distanza iniziale di circa  $40nm$  ma, come detto, nei grafici viene riportato il valore rispetto al piano medio che vale appunto  $d = 2\sigma = 10nm$  per entrambe le superfici.

Dal punto di vista dell'intensità della forza si ritrova in generale, oltre a una diminuzione dell'intensità all'aumentare della rugosità, una diminuzione dovuta al progressivo allontanamento delle superfici che causa un decremento nel numero di sfere che contribuiscono alla risultante globale.

In Figura 6.20 e Figura 6.21 si riporta, per due valori di rugosità, il confron-

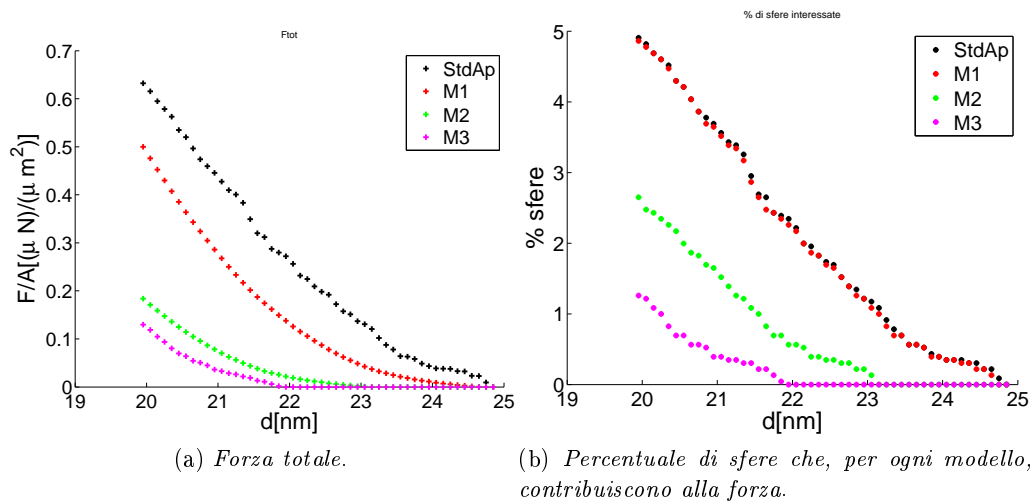


Figura 6.17: Andamento forza per unità di superficie - distanza tra due superfici rugose generate con l'algoritmo 1.  $\sigma = 5nm$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $1\mu m^2$ . Si riportano le forze fino alla distanza tale per cui la standard-approximation prevede un'intensità nulla.

to con la predizione del modello *puntuale* che, ancora una volta, si caratterizza per intensità in linea con le aspettative. Va detto che a differenza dei casi precedenti, le attese sono in realtà un po' meno rispettate in quanto, soprattutto per valori di rugosità  $\sigma = 10nm$ , il nuovo modello è caratterizzato da una sovrastima della forza prevista soprattutto al crescere della distanza di separazione, già visibile del resto anche in Figura 6.6.

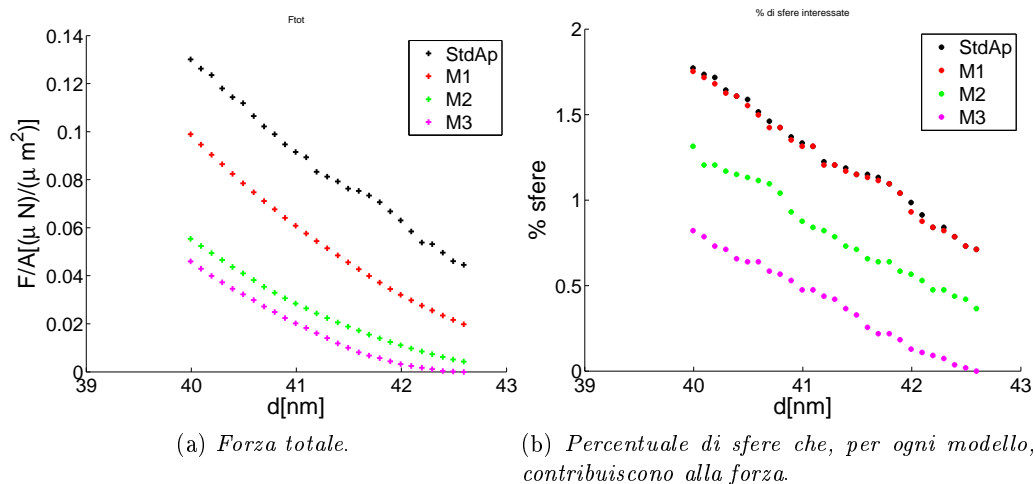


Figura 6.18: Andamento forza per unità di superficie - distanza tra due superfici rugose generate con l'algoritmo 1.  $\sigma = 10 \text{ nm}$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $4 \mu\text{m}^2$ . Si riportano le forze fino alla distanza tale per cui il modello M3 prevede un'intensità nulla.

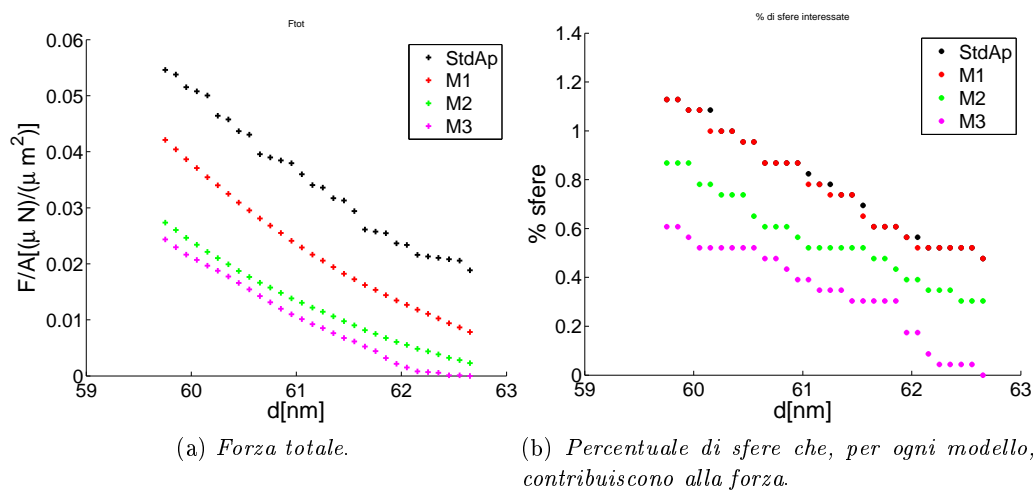


Figura 6.19: Andamento forza per unità di superficie - distanza tra due superfici rugose generate con l'algoritmo 1.  $\sigma = 15 \text{ nm}$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $9 \mu\text{m}^2$ . Si riportano le forze fino alla distanza tale per cui il modello M3 prevede un'intensità nulla.

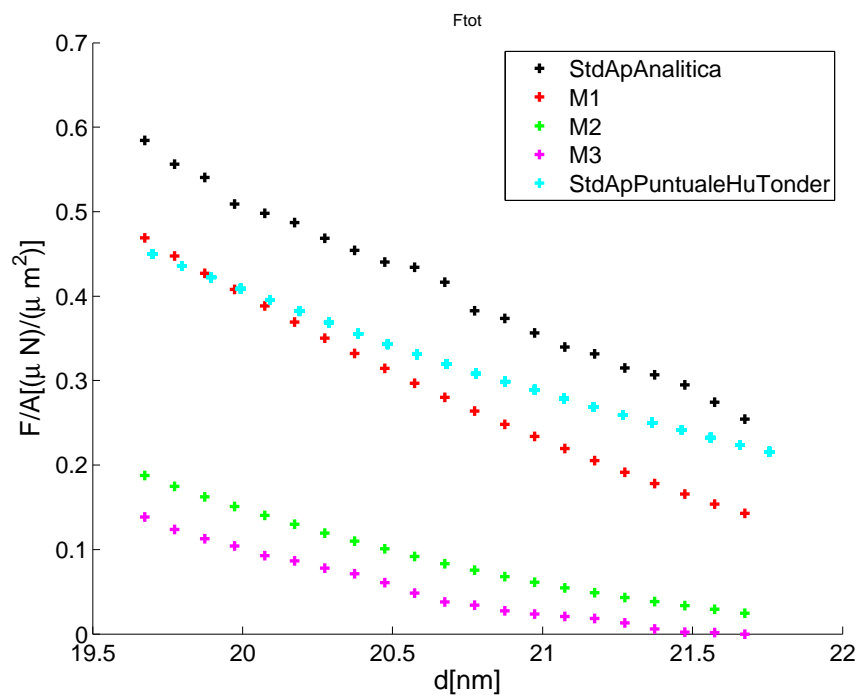


Figura 6.20: Andamento forza per unità di superficie - distanza per le superfici rugose generate con l'algoritmo 1 a confronto con quello per le superfici generate con Hu-Tonder.  $\sigma = 5\text{nm}$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $1\mu\text{m}^2$

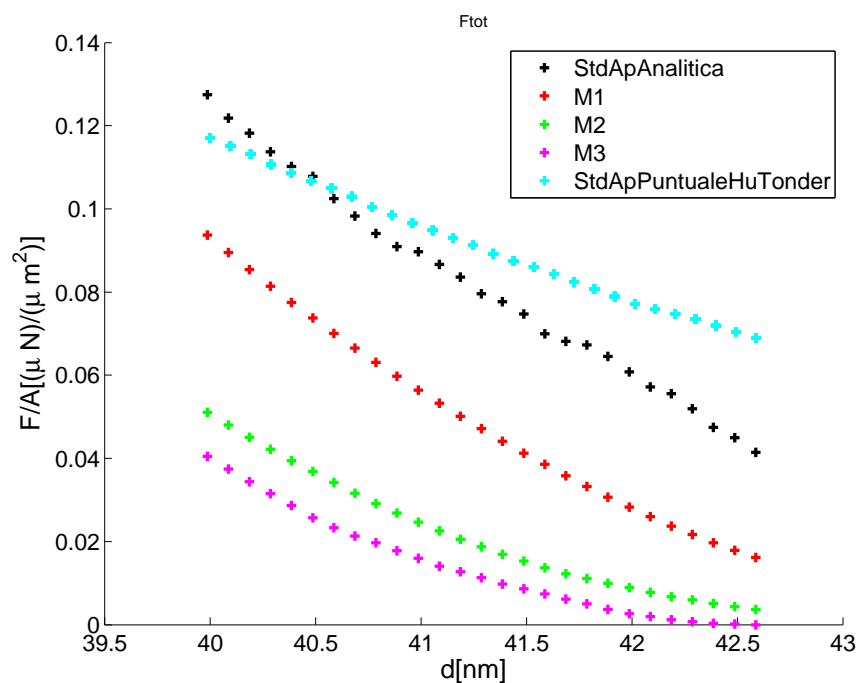


Figura 6.21: Andamento forza per unità di superficie - distanza per le superfici rugose generate con l'algoritmo 1 a confronto con quello per le superfici generate con Hu-Tonder.  $\sigma = 10\text{nm}$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $4\mu\text{m}^2$

## Superfici algoritmo 2

Si riportano in Figura 6.22 gli andamenti dell'intensità della forza al variare della distanza media di separazione per i quattro modelli. Si osservi come la distanza iniziale, calcolata come di consueto, sia in accordo con quella ottenuta per le superfici generate con l'algoritmo 1 a parità di rugosità (cfr Figura 6.17).

Dal punto di vista dell'intensità della forza si assiste, oltre all'attesa diminuzione all'aumentare della separazione, ad un'avvicinamento dei modelli rispetto ai risultati per lo stesso valore di rugosità modellato con l'algoritmo 1: nello specifico, tale vicinanza è frutto di una diminuzione dell'intensità prevista dai modelli standard e  $M_1$  mentre per  $M_2$  e  $M_3$  non si hanno significativi cambiamenti. Se si confrontano infine la percentuale di sfere tra cui i modelli individuano un menisco, si nota come non ci siano grosse differenze rispetto agli stessi valori relativi alle superfici generate dall'algoritmo 1.

In Figura 6.23 e Figura 6.24 si riporta, per due valori di rugosità, l'andamento

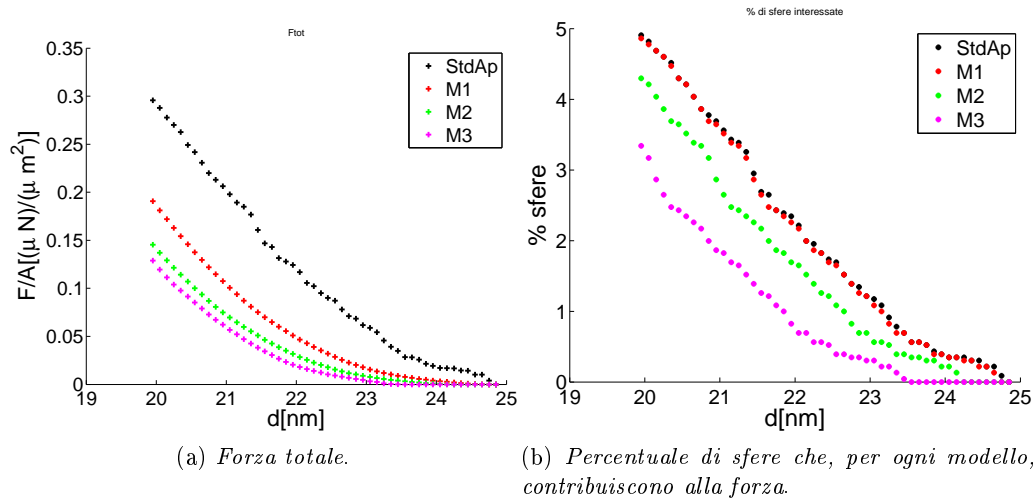


Figura 6.22: Andamento forza per unità di superficie - distanza tra due superfici rugose generate con l'algoritmo 2.  $\sigma = 5nm$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $25\mu m^2$ . Si riportano le forze fino alla distanza tale per cui la standard-approximation prevede un'intensità nulla.

previsto dai modelli analitici per sfere a confronto con quello previsto dal modello *puntuale* per le superfici generate con l'algoritmo di Hu-Tonder. Si osservi come un comportamento simile a quanto visto in Figura 6.20 e 6.21 si ottiene questa volta per valori di rugosità più bassi, con una propensione dei modelli analitici a sottostimare la forza rispetto a quello puntuale già a partire da  $\sigma = 5nm$  quando invece, con le superfici generate con l'algoritmo 1, per lo stesso valore di rugosità si aveva un accordo migliore, che veniva meno solo per  $\sigma = 10nm$ .



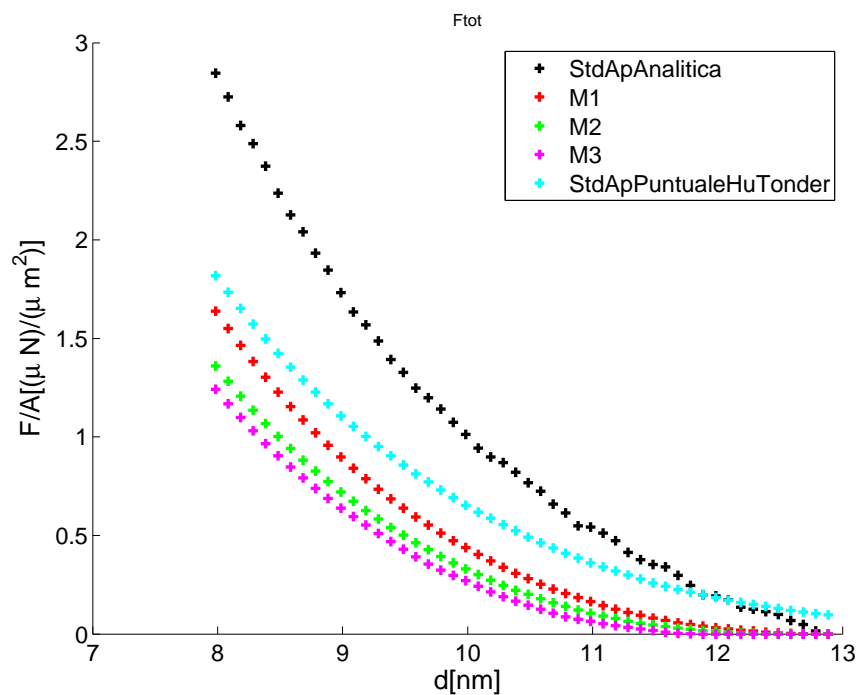


Figura 6.23: Andamento forza per unità di superficie - distanza per le superfici rugose generate con l'algoritmo 2 a confronto con quello per le superfici generate con HuTonder.  $\sigma = 2nm$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $25\mu m^2$ .

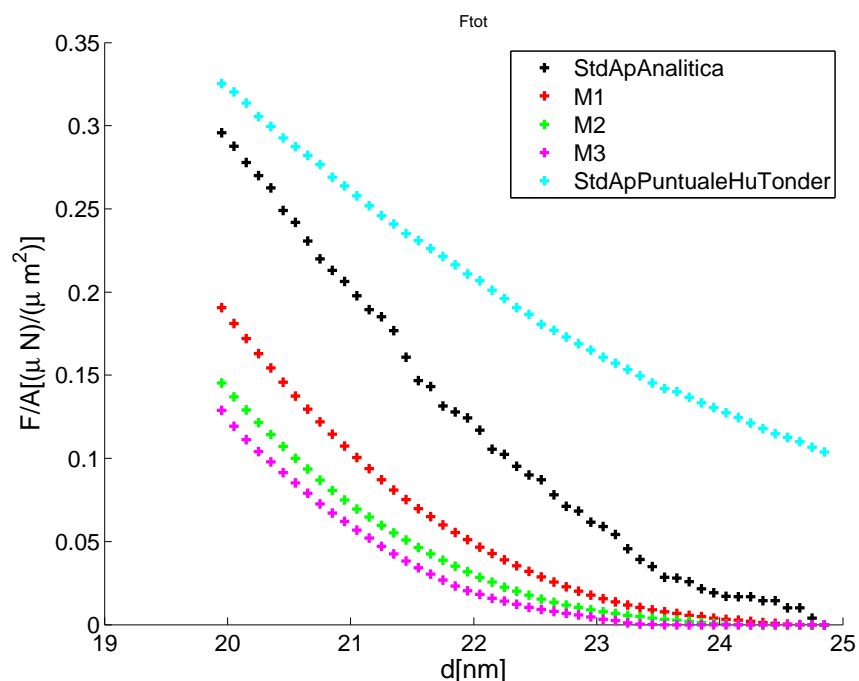


Figura 6.24: Andamento forza per unità di superficie - distanza per le superfici rugose generate con l'algoritmo 2 a confronto con quello per le superfici generate con HuTonder.  $\sigma = 5nm$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $25\mu m^2$ .

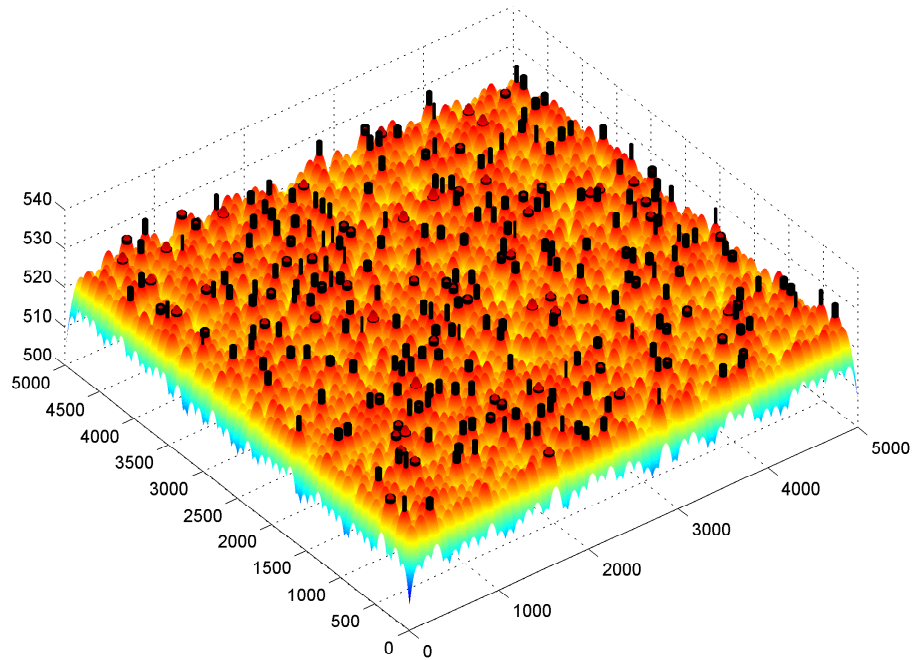
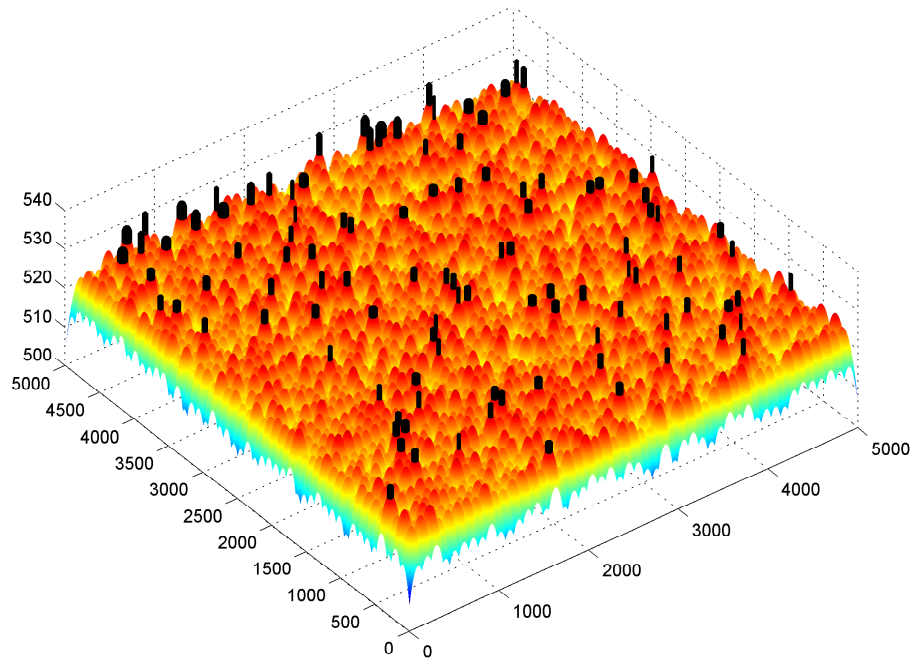
(a) *distanza media di separazione: 7.9nm.*(b) *distanza media di separazione: 9.8nm.*

Figura 6.25: Riproduzione della *texture* e dei menischi individuati dal modello  $M_3$  per una superficie generata con l'algoritmo 2 a due diverse distanze medie di separazione da quella superiore.  $\sigma = 2nm$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $25\mu m^2$ . I menischi sono rappresentati come dei cilindri, di colore nero, di raggio e altezza pari al menisco calcolato dal modello.

### 6.2.5 Forza - Distanza media di separazione. Superfici non correlate

#### Superfici algoritmo 1

Considerando l'andamento dell'intensità al variare della distanza di separazione per superfici non correlate, il valore iniziale di quest'ultima è ora calcolato prendendo il massimo tra le somme dei due raggi delle sfere con centri corrispondenti. Come si osserva dalla Figura 6.26, confrontandola con la Figura 6.17, esso è inferiore rispetto al caso speculare dove veniva considerato il doppio del raggio massimo: tale diminuzione è una diretta conseguenza dell'inversione operata nell'assemblaggio delle due superfici a seguito della quale la probabilità di trovare sopra la sfera di raggio massimo l'uguale sfera della superficie superiore diventa molto bassa. Dal punto di vista della forza, il confronto tra le stesse figure, mostra un significativo decremento dell'intensità prevista, accompagnata da una diminuzione della percentuale di sfere tra le quali il modello ammette la formazione del menisco. Tale risultato mostra che nonostante la distanza *media* tra le superfici sia diminuita, localmente l'inversione operata genera un maggior numero di coppie di sfere che, avendo raggi diversi, vengono trovati a distanze maggiori. In Figura 6.27 si riporta l'andamento previsto dai modelli analitici

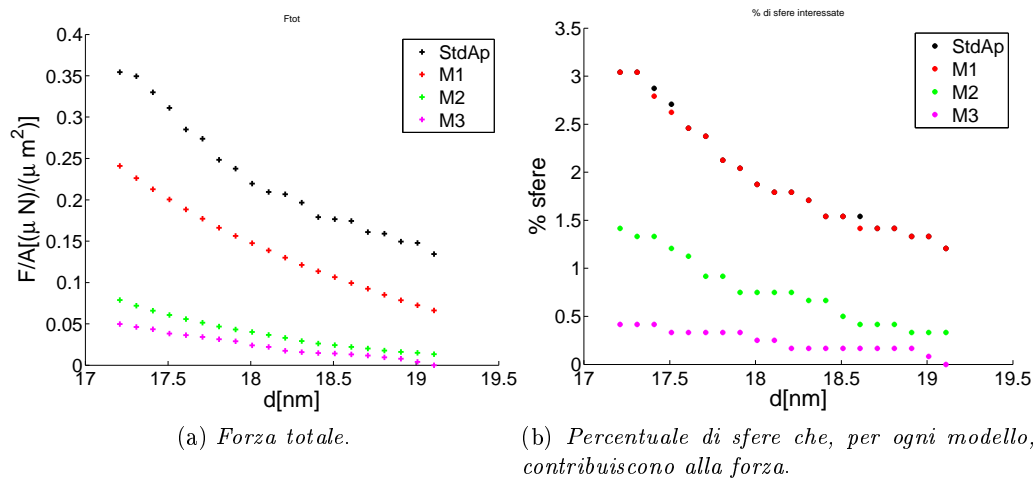


Figura 6.26: Andamento forza per unità di superficie - distanza tra due superfici rugose non speculari.  $\sigma = 5\text{nm}$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $1\mu\text{m}^2$ .

per sfere a confronto con quello previsto dal modello *puntuale* per le superfici generate con l'algoritmo di Hu-Tonder: la forza prevista da quest'ultimo è ora più vicina ai modelli  $M_2$  e  $M_3$  rispetto al caso simmetrico dove, a parità di rugosità, era molto più vicina alla predizione di  $M_1$  (cfr. Figura 6.20).

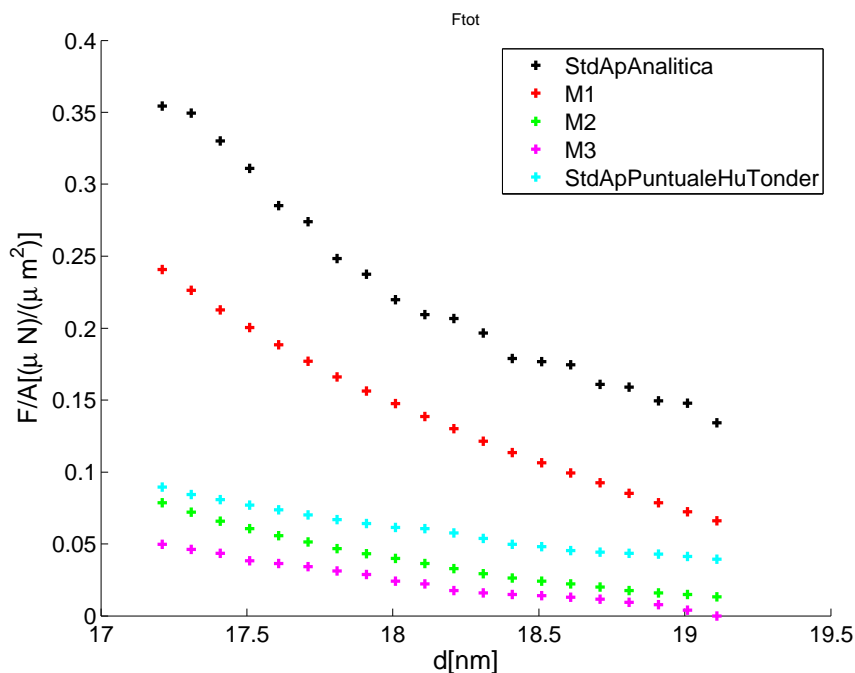


Figura 6.27: Andamento forza per unità di superficie - distanza per le superfici rugose generate con l'algoritmo 1 a confronto con quello per le superfici generate con Hu-Tonder.  $\sigma = 5nm$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $1\mu m^2$ .

### Superfici algoritmo 2

In Figura 6.28 si riporta l'andamento della forza al variare della distanza media per una superficie di rugosità  $\sigma = 5nm$  modellata mediante l'algoritmo 2. Come si osserva, si assiste ancora una volta ad una diminuzione dell'intensità in termini assoluti rispetto alle stesse superfici assemblate in modo simmetrico, di proporzione analoga a quella vista per le superfici generate con l'algoritmo 1.

In Figura 6.29 si riporta l'andamento previsto dai modelli analitici per sfere a confronto con quello previsto dal modello *puntuale* per le superfici generate con l'algoritmo di Hu-Tonder. In questo caso la predizione su superfici rugose, che si osservi essere la stessa di quella in Figura 6.27 dal momento che la superficie a cui si riferisce non è cambiata, è molto più vicina ai modelli  $M_i$  che non nel caso simmetrico (Figura 6.24).

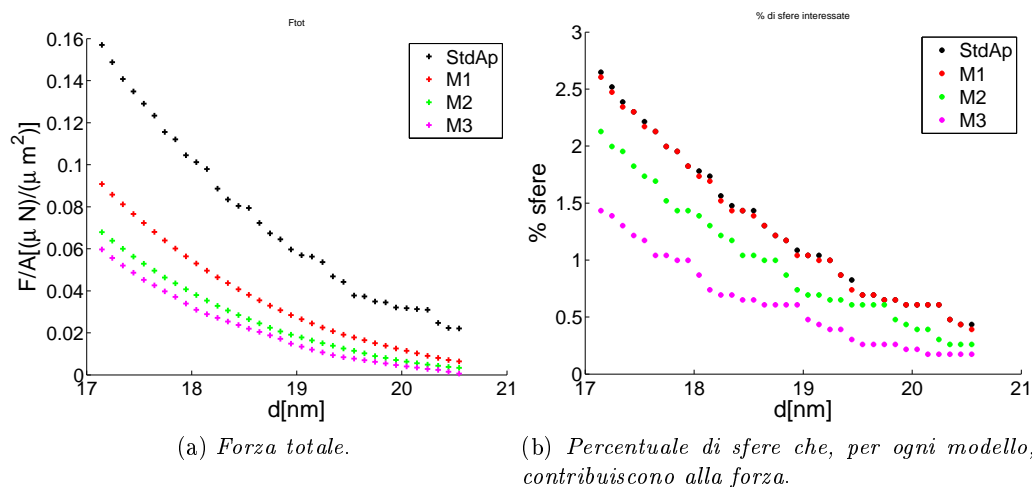


Figura 6.28: Andamento forza per unità di superficie - distanza tra due superfici rugose non speculari.  $\sigma = 5\text{nm}$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $25\mu\text{m}^2$ .

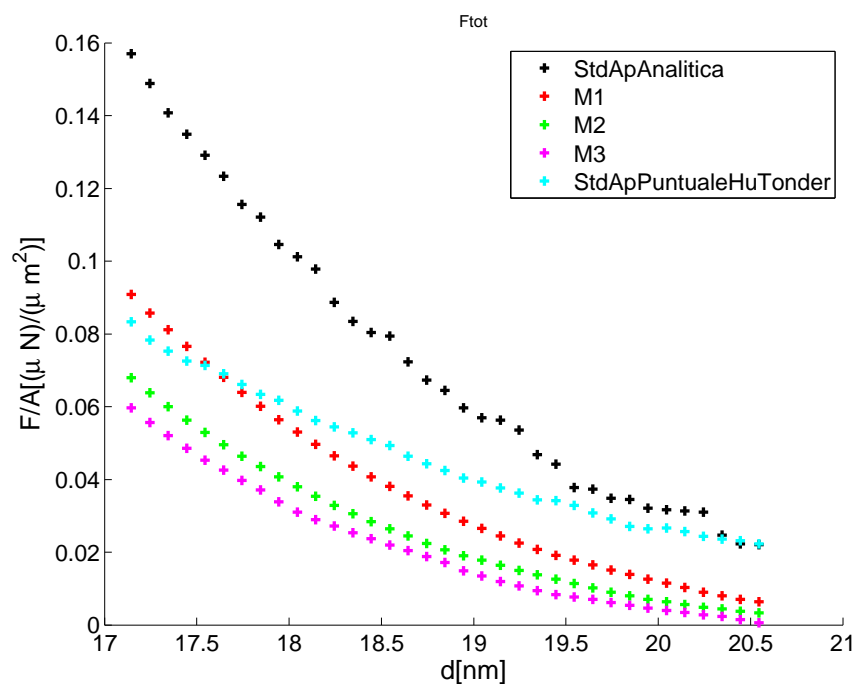


Figura 6.29: Andamento forza per unità di superficie - distanza per le superfici rugose generate con l'algoritmo 2 a confronto con quello per le superfici generate con HuTonder.  $\sigma = 5\text{nm}$   $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli. Area superficie:  $25\mu\text{m}^2$ .

### 6.2.6 Commenti sull'intensità della forza

L'aspetto che forse principalmente colpisce osservando tutti gli andamenti dell'intensità della forza presentati è la differenza tra l'intensità prevista con la *standard-approximation* rispetto a quella calcolata dagli altri modelli semianalitici, in particolare  $M_2$  e  $M_3$ , soprattutto per quanto riguarda la predizione al variare della distanza media tra le superfici. A tal proposito, i primi due responsabili di tale differenza sono identificabili nell'intensità della forza calcolata già per i casi test e nella distanza limite oltre la quale i modelli assegnano forza nulla. In Figura 6.30 sono riportati gli andamenti della forza capillare per il caso test sfera-sfera, per raggi di  $19nm$ ,  $39nm$  e  $59nm$ , valori medi per le sfere della superficie rugosa generata con l'algoritmo 1 che contribuiscono alla risultante della forza rispettivamente per  $\sigma = 5nm$ ,  $\sigma = 10nm$  e  $\sigma = 15nm$ . Gli andamenti si arrestano al valore della distanza per cui il modello  $M_1$  prevede una forza di intensità positiva. In questo modo è possibile anche visualizzare le distanze di rottura del menisco previste anche dagli altri modelli, corrispondenti al valore per cui la forza diventa nulla. Per tutti e tre i grafici il valore limite previsto invece dalla *standard-approximation* è pari a  $d_{cut} = 2r_k \cos \theta = 4.84nm$ .

In tabella 6.1 si presentano, per ogni modello, le distanze medie tra le asperità delle sfere che partecipano attivamente alla forza di adesione, riportate con dei tratteggi anche in Figura 6.30 così da poter apprezzare quanto mediamente i tre modelli si differenzino nella previsione. In particolare, la differenza di  $M_2$  e  $M_3$  con la *standard-approximation* comparata con le diverse percentuali di sfere interessate da un menisco per le varie rugosità, giustifica, almeno in prima approssimazione, le differenze di intensità della forza prevista per le superfici rugose testate.

	StdApp	$M_1$	$M_2$	$M_3$
$\sigma = 5nm$	3.7	3.7	2.6	1.4
$\sigma = 10nm$	3.6	3.6	2.8	1.9
$\sigma = 15nm$	2.7	2.7	2.3	2.2

Tabella 6.1: Distanza media tra le sfere in cui i diversi modelli individuano un menisco. Distanze e rugosità sono espresse in  $nm$ .

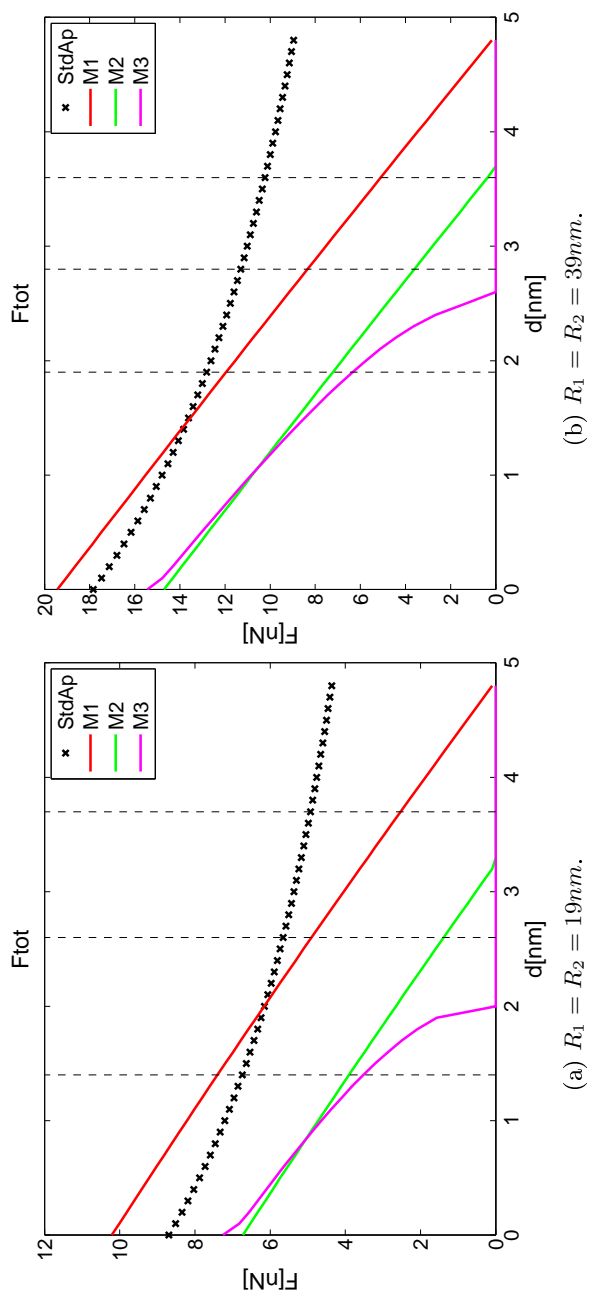
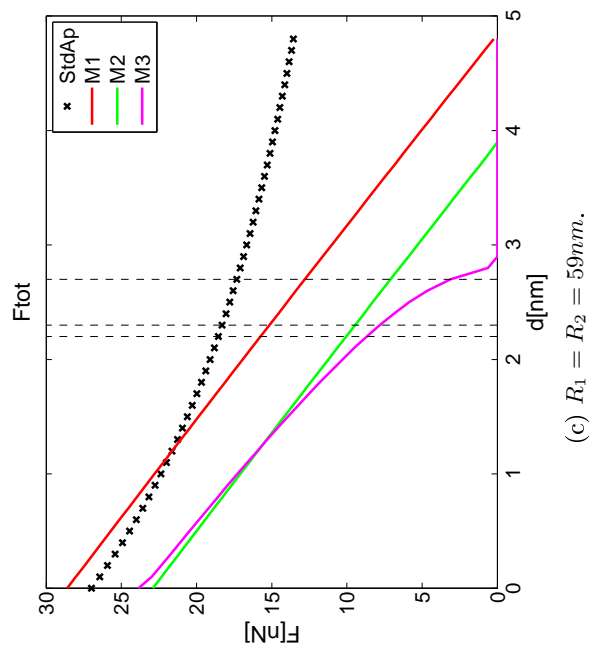
(b)  $R_1 = R_2 = 39nm$ .

Figura 6.30: Andamento forza capillare-distanza tra due sfere per i valori dei raggi medi delle sfere al variare della rugosità. Con una linea tratteggiata sono evidenziati i valori limite della distanza descritti in tabella 6.1. Angoli di contatto nulli.  $RH = 0.8$ .

### 6.2.7 Considerazioni statistiche

#### Dipendenza dalla realizzazione. Superfici correlate.

Rispetto alle simulazioni per i modelli semianalitici dove le forze previste non variavano in modo sostanziale al ripetersi dell'esperimento, per le prove fatte con il modello *puntuale* si è osservato come, al ripetersi dell'esperimento, lasciando tutti i parametri fisici invariati in modo che l'unica differenza tra una ripetizione e l'altra stesse nella casualità dei valori generati dalla distribuzione gaussiana, le forze previste avessero una variabilità crescente con la rugosità. In tutti i grafici prima riportati, infatti, la predizione del modello generalizzato era in realtà il risultato della media di alcune realizzazioni<sup>2</sup>. In Figura 6.31 si riportano i diversi andamenti previsti per la forza al variare della distanza nelle varie ripetizioni per i due valori di rugosità considerati, mentre in Figura 6.32 gli andamenti riguardano la forza al variare di RH. Si può notare come in questo secondo caso la variabilità sia molto più contenuta che non per il caso in cui la variabile indipendente è la distanza.

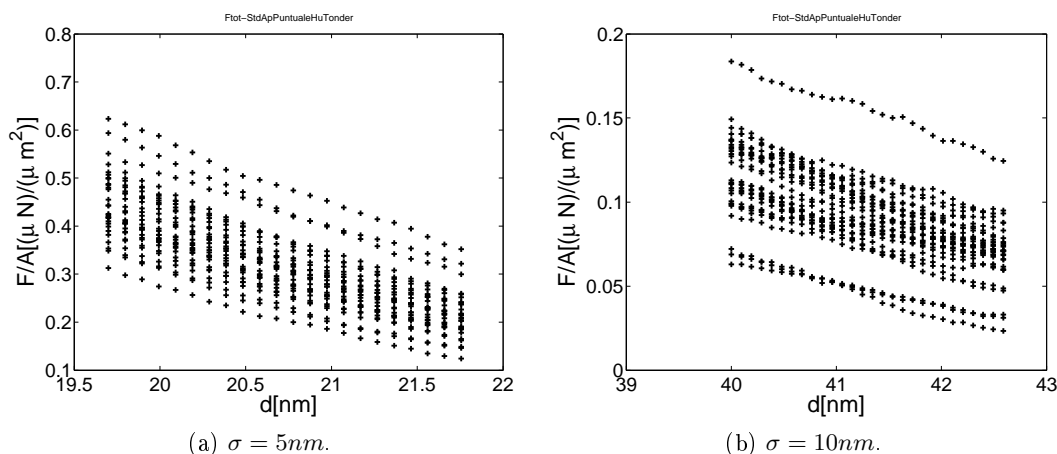


Figura 6.31: Diverse realizzazioni dell'andamento forza-distanza tra due superfici rugose.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto nulli.

#### Dipendenza dalla realizzazione. Superfici non correlate.

Per quanto riguarda l'assemblaggio non simmetrico, invece, si è osservato che anche la predizione dei modelli per sfere risulta più sensibile alla realizzazione statistica. Ciò non sorprende vista la maggiore variabilità dovuta all'interazione tra sfere di raggio diverso. Per questo, tutte le prove mostrate si riferiscono, in genere, a una media tra cinque realizzazioni.

<sup>2</sup>Per quasi tutte le prove effettuate si tratta della media tra 30 realizzazioni.



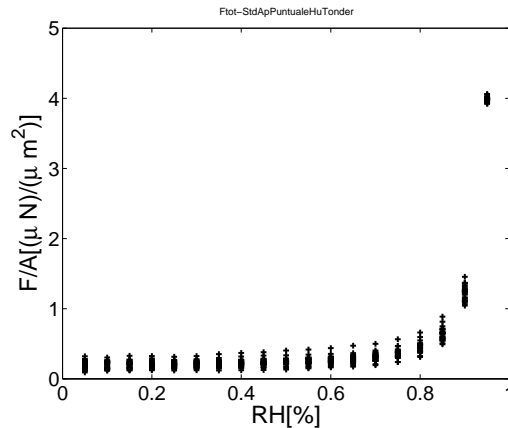


Figura 6.32: Diverse realizzazioni dell'andamento forza-RH tra due superfici rugose.  $\sigma = 5nm$ . Angoli di contatto nulli.

### Distanza iniziale tra le superfici

Un altro aspetto da considerarsi riguarda la distanza media tra le superfici nei processi di allontanamento per le stime forza-distanza. Per quanto riguarda le superfici generate con emisfere, come già detto la distanza iniziale di separazione è quella tale per cui le due sfere corrispondenti di raggio massimo sono tra loro in contatto in sommità. Volendo portare anche le superfici generate per mezzo dell'algoritmo di Hu-Tonder, e assemblate secondo la procedura descritta in precedenza, alla stessa distanza iniziale si osserva che alcuni punti sono tali per cui la terza coordinata di quello appartenente alla superficie superiore è minore di quella del corrispondente punto appartenente alla superficie inferiore. Causa di questa *compensazione* è probabilmente il fatto che, contrariamente alla generazione casuale dei raggi delle sfere dove, come già detto, un valore estratto dalla gaussiana era utilizzato solo se appartenente ad un intervallo di confidenza di ampiezza  $\pm 2\sigma$  per evitare di avere sfere di dimensioni estreme eccessive, nell'algoritmo di Hu-Tonder tutti i valori estratti dalla gaussiana sono ugualmente utilizzati. Questo è messo in evidenza anche negli istogrammi relativi alla frequenza delle altezze (Figura 5.6 e 5.7) dove, in questo secondo caso, si può notare una frequenza non nulla nelle code della gaussiana oltre il limite  $\pm 2\sigma$ : sono proprio questi valori estremi che causano i picchi nelle altezze che vengono a compenetrarsi imponendo la distanza media di separazione voluta.

Per cercare di investigare meglio questo fenomeno si è voluto modificare l'algoritmo di Hu-Tonder implementato inserendo il controllo relativo all'intervallo di confidenza della gaussiana. Nelle figure 6.33 e 6.34 si riportano i risultati ottenuti, per due valori di rugosità, per quanto riguarda distribuzione delle altezze, punti *compensanti* e forza prevista al variare della distanza di separazione.

Si osservi come il controllo inserito comporti una diminuzione del numero di punti *compensanti* individuati ma anche come, contrariamente a quanto ci si può in un primo momento attendere, non sia sufficiente per evitare definitivamente il fenomeno. Tale risultato è probabilmente dovuto al fatto che il controllo viene inserito nel codice a livello della generazione della sequenza  $\eta(r, s)$  (cfr. sezione 5.2.1). I successivi passaggi numerici relativi alle trasformazioni nel dominio delle frequenze per

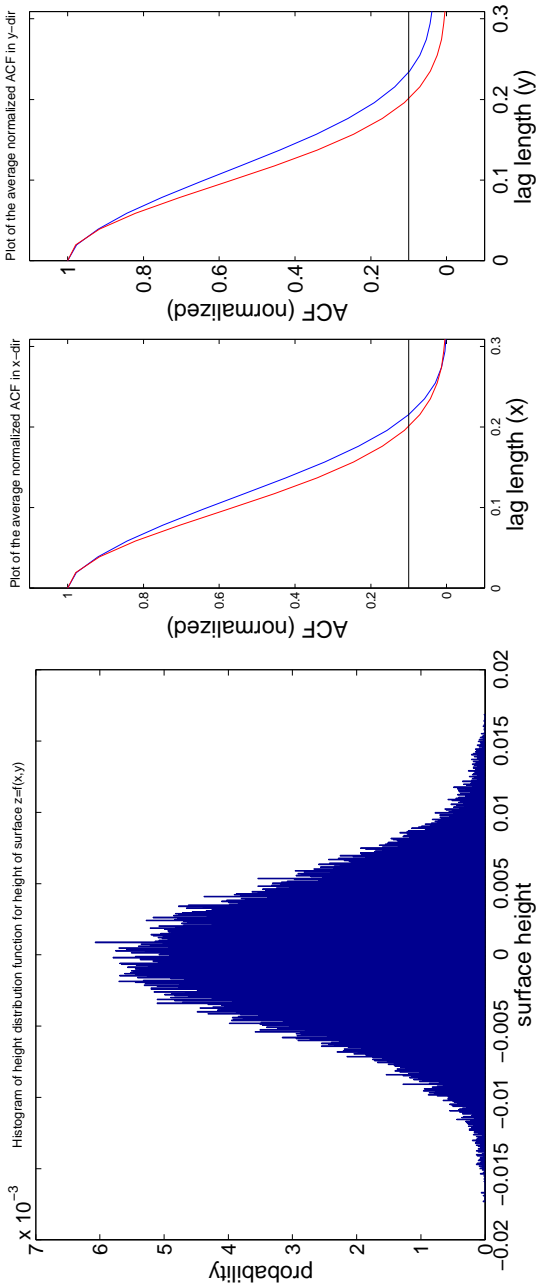
l'applicazione del filtro possono comportare una propagazione di irregolarità che non consentono di generare definitivamente delle altezze finali nell'intervallo voluto. Sono anche riportati gli istogrammi delle altezze che, se confrontati con quelli ottenuti senza il controllo di confidenza, mostrano sì una minore frequenza nelle code che al variare della realizzazione non è evidentemente sempre sufficiente ad evitare picchi superiori alla distanza imposta tra le superfici.

Dal punto di vista delle forze di attrazione, il controllo inserito comporta una significativa diminuzione delle forze previste: essa può essere dovuta al fatto che ora un maggior numero di punti viene concentrato vicino alla media (ciò si manifesta anche in una diminuzione del valore di RMS realmente ottenuto rispetto a quelli riportati in tabella 5.1) e di conseguenza è più probabile trovare dei punti che, a parità di distanza media imposta, siano ora a delle quote tali da superare il valore di *cut-off*  $d_{cut} = 2r_k \cos \theta$ .

### Dipendenza dall'assemblaggio

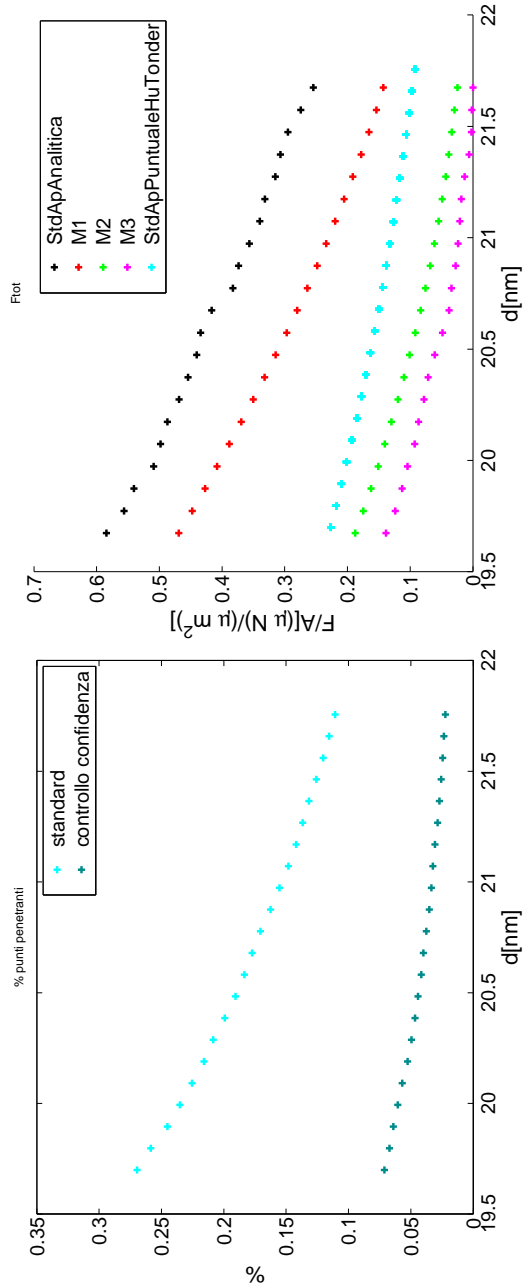
Osservando i risultati presentati, un altro elemento che viene da considerare riguarda la differenza degli andamenti nei due diversi assemblaggi implementati. In Figura 6.35 sono riportati alcuni confronti per il modello  $M_3$  su superfici modellate con emisfere e per l'approssimazione (2.13) su superfici generate con l'algoritmo di Hu-Tonder. Come si può osservare, se per il caso della forza al variare della rugosità si assiste solo ad un modesto decremento dell'intensità nel caso di superfici non speculari, differenze più significative si hanno per l'andamento della forza al variare della distanza di separazione.

Per meglio comprendere una delle possibili cause che comportano tali differenze, a parità di tipo di superfici e rugosità, si riportano in Figura 6.36 gli istogrammi delle distanze tra le asperità, sferiche o puntuali, delle diverse superfici considerate, sia per il caso speculare che non: come si può notare, a fronte di una media non troppo distante (in modo particolare per le superfici di Hu-Tonder dove rimane inalterata), ruotando la superficie superiore si ha una minore frequenza di valori estremi che, come evidenzia il tratteggio corrispondente alla distanza limite per il modello *standard-approximation*, sono quelli interessati dalla formazione dei menischi. Il fenomeno descritto è particolarmente rilevante nel caso delle superfici rugose modellate con l'algoritmo di Hu-Tonder e questo spiega, almeno in parte, la maggiore diminuzione di intensità tra i due assemblaggi rispetto a quello riscontrata per le superfici sferiche.



(a) *Istogramma delle altezze.*

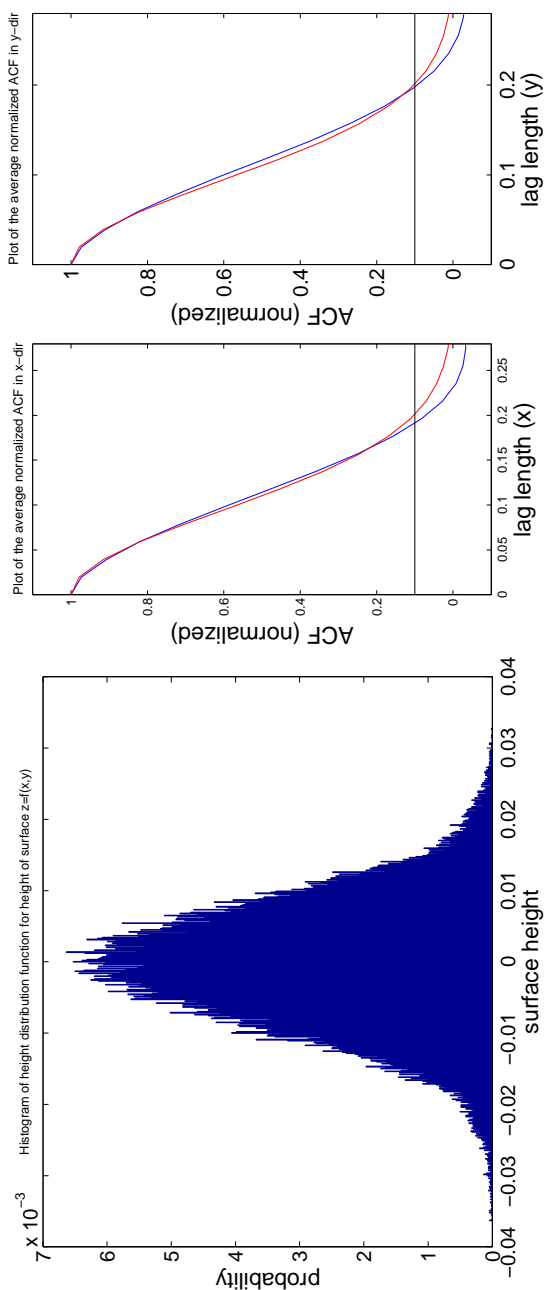
(b) *Lunghezza di correlazione.*



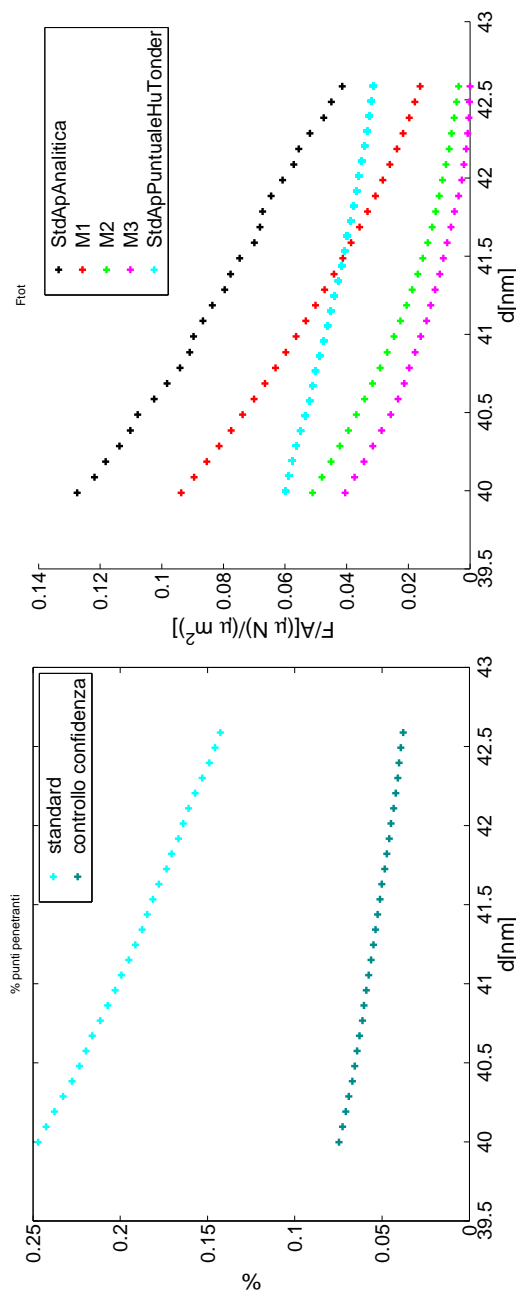
(c) *Punti compenetranti.*

(d) *Forza totale.*

Figura 6.33: Analisi dell'influenza del controllo di confidenza per una superficie di rugosità  $\sigma = 5nm$ .  $RH=0.8$ . Angoli di contatto nulli.



(a) *Istogramma delle altezze.*

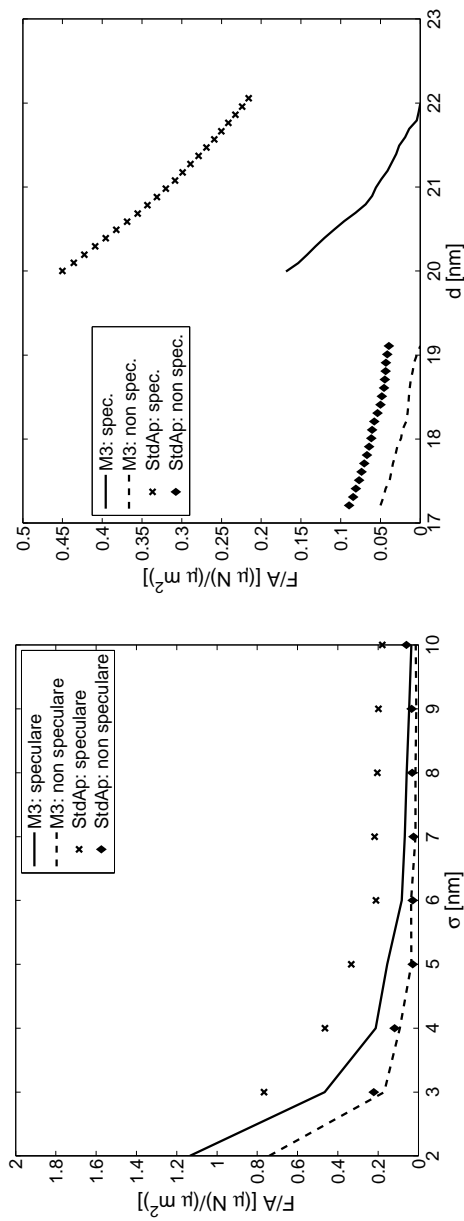


(b) *Lunghezza di correlazione.*

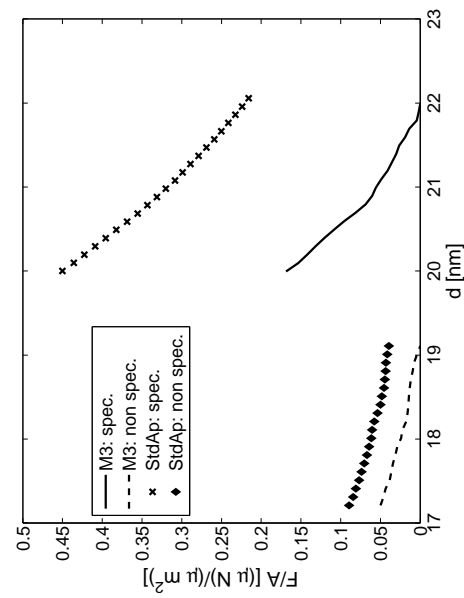
(c) *Punti penetranti.*

(d) *Forza totale.*

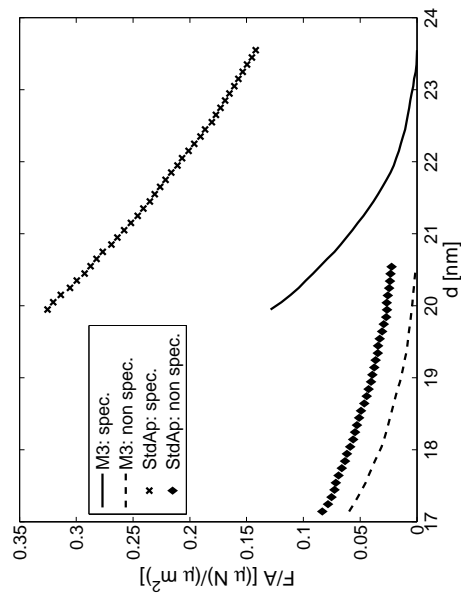
Figura 6.34: Analisi dell'influenza del controllo di confidenza per una superficie di rugosità  $\sigma = 10\text{nm}$ .  $\text{RH}=0.8$ . Angoli di contatto multi.



(a) Forza per unità di area - rugosità. La superficie su cui è stato usato il modello  $M_3$  è generata con l'algoritmo 2. Area superficie:  $25\mu\text{m}^2$ .



(b) Forza per unità di area - distanza di separazione. La superficie su cui è stato usato il modello  $M_3$  è generata con l'algoritmo 1. Area superficie:  $25\mu\text{m}^2$ .



(c) Forza per unità di area - distanza di separazione. La superficie su cui è stato usato il modello  $M_3$  è generata con l'algoritmo 2. Area superficie:  $25\mu\text{m}^2$ .

Figura 6.35: Analisi dell'influenza dei due diversi assemblaggi.  $RH=0.8$ . Angoli di contatto nulli.

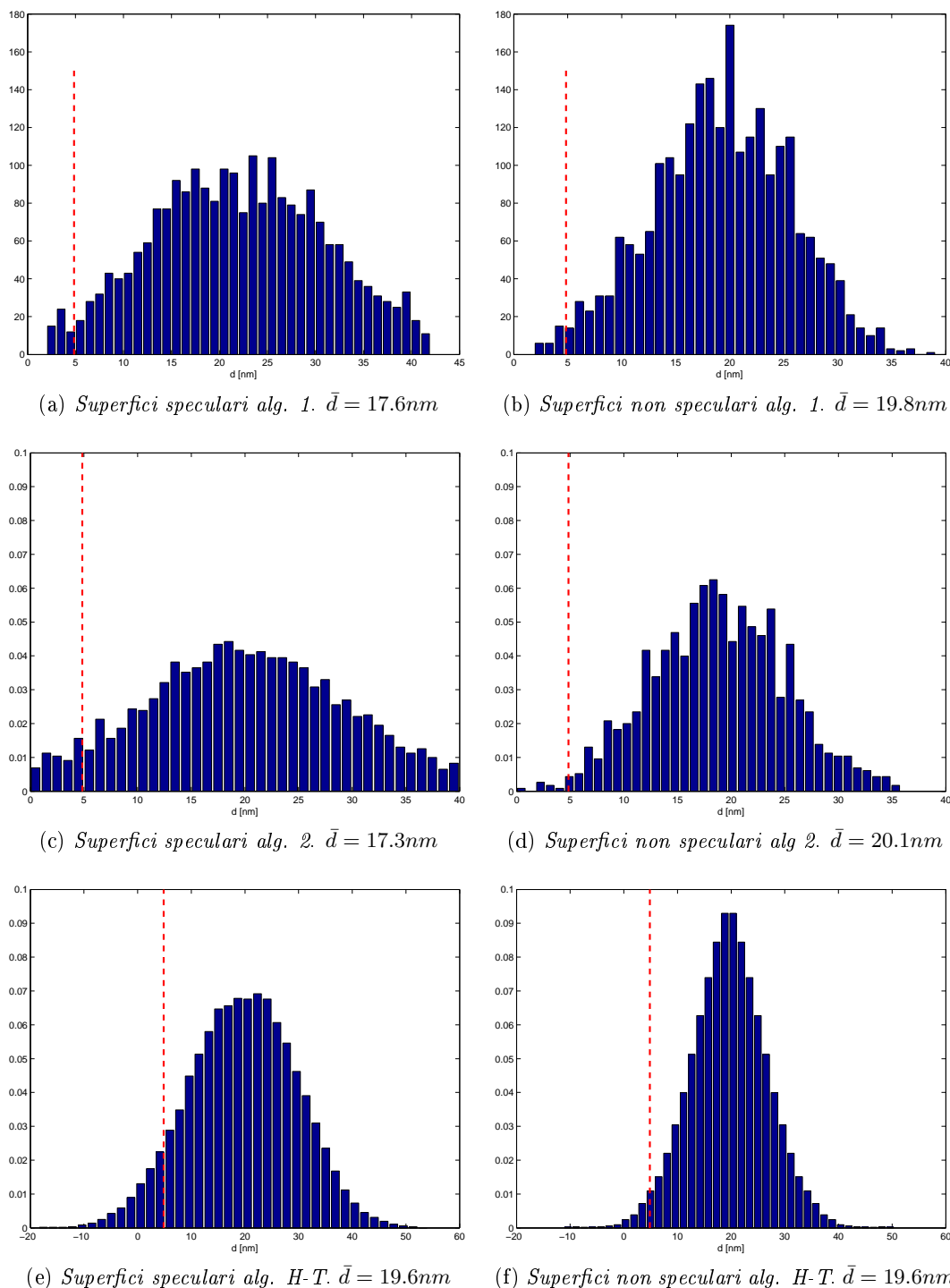


Figura 6.36: Confronto tra gli istogrammi relativi alla distribuzione (normalizzata) delle distanze tra le sommità delle emisfere, per le superfici relative agli algoritmi 1 e 2, e tra tutti i punti che le compongono, per le superfici generate attraverso l'algoritmo Hu-Tonder, tutte alla distanza iniziale.  $\sigma = 5nm$ . Il tratteggio indica la distanza limite per la formazione dei menischi del modello *standard-approximation* ( $d_{cut} = 2r_k \cos \theta$ ).

### 6.3 Adesione di van der Waals

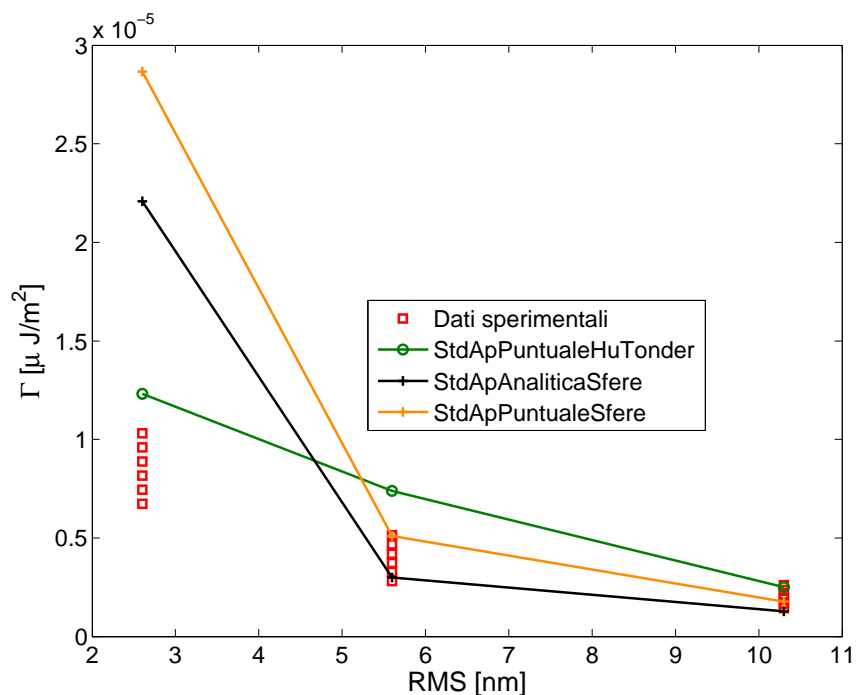
In questa sezione si vogliono verificare i due diversi modelli predittivi delle interazioni di van der Waals presentati in sezione 2.6. Nello specifico, per tre diversi valori di rugosità, si sono utilizzati il modello per sfere e il modello puntuale per superfici generate con gli algoritmi 1 e 2, mentre alle superfici generate con Hu-Tonder si è applicato il solo modello puntuale, unico possibile.

Nelle figure 6.37 e 6.38 si presenta l'andamento dell'energia di adesione, confrontato con le misure sperimentali in [DelRio et al., 2005], rispettivamente per superfici generate con gli algoritmi 1 e 2, nei due diversi assemblaggi. Si osservi come il caso non speculari comporti, per entrambi i tipi di superfici modellate con emisfere, un significativo decremento nell'intensità dell'energia prevista, proporzionale al variare della rugosità. Occorre sottolineare che, contrariamente al caso della forza di attrazione capillare, per l'interazione di van der Waals la formula analitica per due sfere è da ritenersi, in generale, inadeguata a livello teorico in quanto significativa solo per due singole sfere nella loro interezza, mentre nelle superfici generate, di fatto, essa viene applicata ad ogni coppia di calotte sferiche corrispondenti, che sono ciascuna una piccola parte della sfera completa a cui appartengono, in modo più marcato per l'algoritmo 2. Nonostante questo aspetto, tuttavia, l'energia di adesione prevista non è distante dai valori sperimentali e per questo si è deciso di riportarla in ogni caso: l'andamento è caratterizzato da una maggiore differenza di intensità dell'energia tra rugosità basse e medio-alte rispetto a quello misurato sulle superfici di Hu-Tonder dove la diminuzione al variare della rugosità risulta più uniforme sull'intero intervallo. Peraltro, se si osservano i dati sperimentali, anch'essi sembrano essere caratterizzati più da un decremento non uniforme, con una diminuzione maggiore nel passaggio da  $\sigma = 2.6nm$  a  $\sigma = 5.6nm$  che non da  $\sigma = 5.6nm$  a  $\sigma = 10.3nm$ .

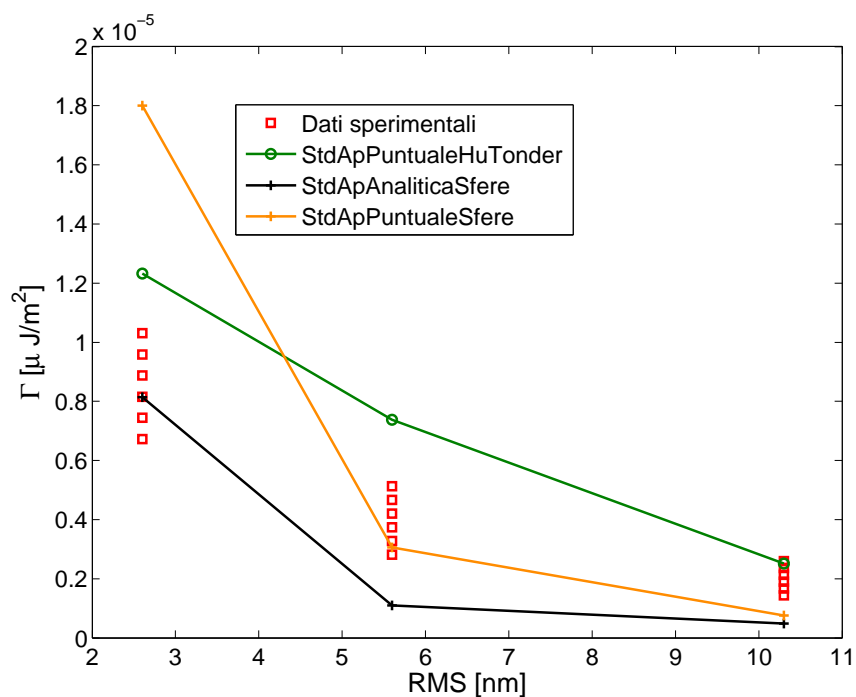
Per concludere, riportiamo in tabella 6.2 anche la distanza media all'equilibrio per le diverse superfici numeriche, confrontata con quella riportata in [DelRio et al., 2005]. Come si osserva vi è una notevole differenza tra il valore riscontrato per le superfici generate mediante l'algoritmo di Hu-Tonder e il corrispondente per quelle modellate con emisfere, con una maggiore lontananza di quello relativo a queste ultime rispetto ai dati sperimentali.

$\sigma_{ex}$ (nm)	distanza all'equilibrio (nm)					
	Sperim.	Hu-Tond.	Alg.1	Alg.1 (non sym.)	Alg.2	Alg.2 (non sym.)
2.6	15	12.96	10.39	9.16	10.36	9.43
5.6	29	26.64	22.13	20.79	22.14	19.10
10.3	57	48.96	41.17	38.42	41.18	36.63

Tabella 6.2: Distanza all'equilibrio per le diverse superfici. Con «(non sym.)» si intendono i dati relativi all'assemblaggio non speculari per le superfici generate con gli algoritmi 1 e 2



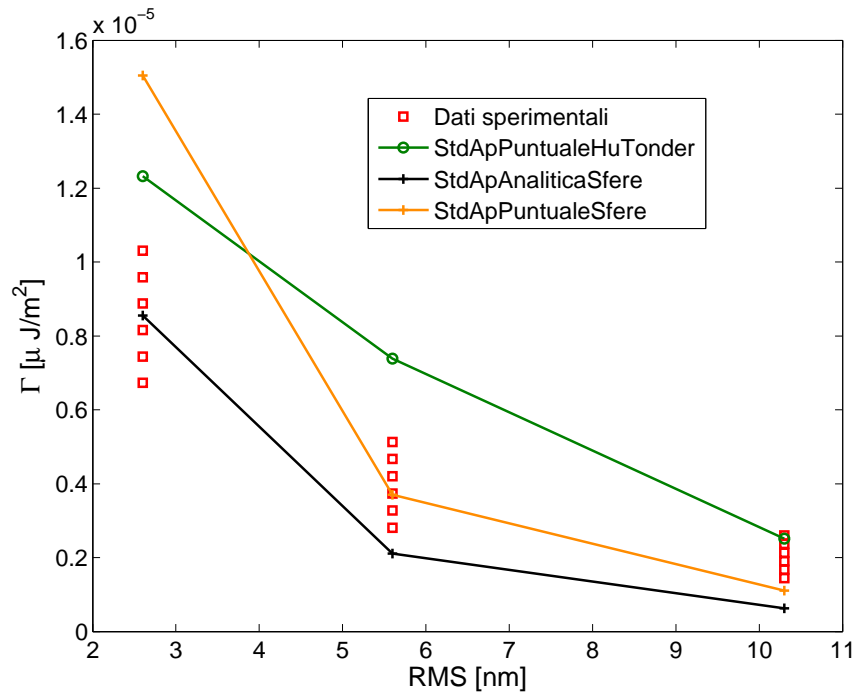
(a) Superfici algo. 1 con assemblaggio speculare e superfici H-T.



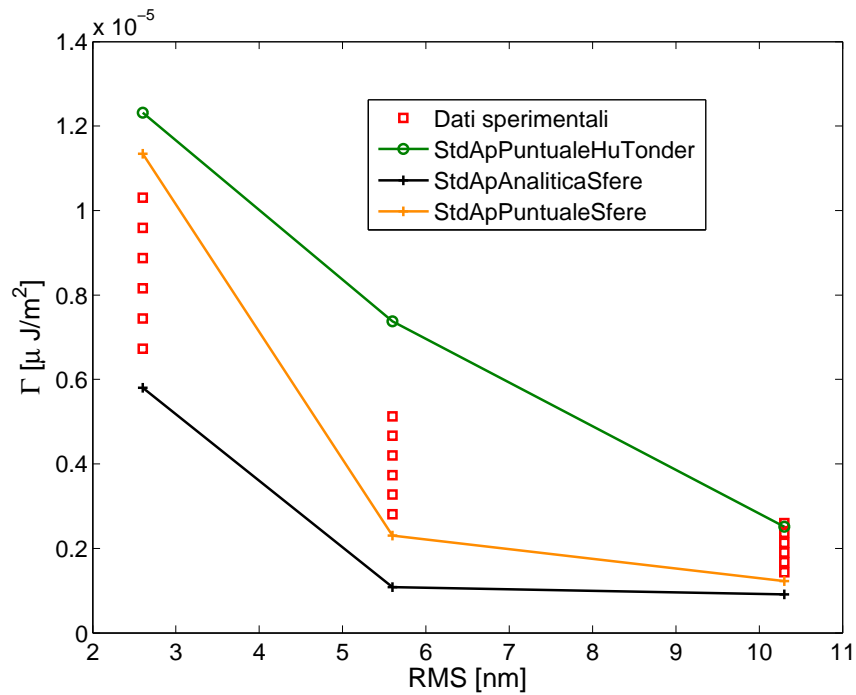
(b) Superfici algo. 1 con assemblaggio non speculare e superfici H-T.

Figura 6.37: Andamento energia di vdW - rugosità previsto dal modello puntuale per superfici generate con l'algoritmo di Hu-Tonder (StdApPuntualeHuTonder) a confronto con quello ottenuto dallo stesso e da quello analitico per superfici generate con l'algoritmo 1 (StdApPuntualeSfere, StdApAnaliticaSfere).





(a) Superfici algo. 2 con assemblaggio speculare e superfici H-T.



(b) Superfici algo. 2 con assemblaggio non speculare e superfici H-T.

Figura 6.38: Andamento energia di vdW - rugosità previsto dal modello puntuale per superfici generate con l'algoritmo di Hu-Tonder (StdApPuntualeHuTonder) a confronto con quello ottenuto dallo stesso e da quello analitico per superfici generate con l'algoritmo 2 (StdApPuntualeSfere, StdApAnaliticaSfere).

## 6.4 Energia di adesione: confronto con i dati sperimentali

L'intento principale che ha guidato lo sviluppo del lavoro fino a questo momento è stato quello di arrivare ad un possibile confronto della predizione dei modelli analitici introdotti con alcuni dati relativi a misurazioni sperimentali. Il benchmark nella letteratura utilizzato a riguardo è [de Boer et al., 1999] al quale è stato aggiunto, per completezza, il modello teorico presentato in [van Spengen et al., 2002], anch'esso sviluppato con l'intenzione ultima di confrontarsi con le misure sperimentali.

I dati ottenuti nei due lavori ai quali ci si vuole confrontare riguardano l'andamento dell'energia di adesione  $\Gamma$  in funzione dell'umidità relativa  $RH$ . All'energia rilevata contribuiscono l'attrazione capillare e le interazioni di van der Waals. Vi è inoltre da osservare che il comportamento elasto-plastico delle superfici a contatto influenza i risultati. Le misure sperimentali si riferiscono ad un ciclo di avvicinamento, contatto e rilascio tra le due superfici e, a seguito del contatto, il rilascio risulta caratterizzato da un'energia di adesione in generale molto maggiore in quanto la rugosità superficiale è diminuita a seguito delle deformazioni dovute allo schiacciamento tra le due superfici. Per il calcolo di  $\Gamma$  dai modelli semianalitici presentati in questo lavoro, a rugosità e  $RH$  fissati si sono considerati sia il contributo dovuto all'attrazione capillare sia quello dovuto alle interazioni di van der Waals, integrando l'andamento numerico ottenuto delle due diverse forze al variare della distanza di separazione. Per come sono stati implementati al momento però, i modelli non possono tenere in considerazione l'aspetto della deformazione delle asperità che, come detto, può contribuire in maniera significativa. Per questo, l'andamento ottenuto deve essere inteso come *limite inferiore* all'energia di adesione.

Nelle figure 6.39 e 6.40 si riportano i diversi andamenti su scala semilogaritmica per una rugosità di  $\sigma = 2nm$ , lo stesso valore riportato in [de Boer et al., 1999]. In particolare, in Figura 6.39, i modelli per sfere sono applicati a superfici generate con l'algoritmo 1: all'aumentare della rugosità si assiste, in questo caso, ad un progressivo aumento dell'energia prevista fino  $RH = 0.8$  con un successivo brusco decremento per  $RH = 0.9$  che non trova adeguato riscontro né nelle misure sperimentali né nel modello puntuale sulle superfici generate con l'algoritmo di Hu-Tonder. Tale risultato può essere giustificato dal fatto che il raggio di Kelvin corrispondente, pari a  $r_k \approx 5.13nm$ , è maggiore del raggio medio delle sfere che modellano la rugosità, che nelle diverse superfici generate si attesta intorno a  $rm \approx 3.9nm$ . L'interpretazione fisica di questo dato, che non si ritrova per  $RH$  inferiori (per  $RH = 0.8$  si ottiene infatti già  $r_k \approx 2.42nm$ ), è che le particelle (emisfere) che modellano la rugosità sono completamente immerse nel liquido condensato e il contributo capillare all'energia dovuto alla presenza di menischi d'acqua viene meno [Israelachvili, 2011].

In Figura 6.40, invece, i modelli per sfere sono applicati alle superfici generate con l'algoritmo 2. In questo caso, contrariamente al precedente, l'andamento dell'energia è crescente fino a  $RH = 0.9$  ed è caratterizzato da un accordo con le misure sperimentali abbastanza soddisfacente: esse differiscono in modo più o meno omogeneo di un ordine di grandezza, che non deve sorprendere se si pensa al fatto che si riferiscono, contrariamente ai modelli, ad un ciclo di carico-contatto-rilascio, dove la parte conclusiva è caratterizzata mediamente da energie maggiori rispetto a quella iniziale

a causa delle deformazioni irreversibili delle asperità. A tal proposito, in Figura 6.41 sono riportati gli andamenti dei modelli analitici per  $\sigma = 1nm$  e  $\sigma = 0.5nm$ , per dare un'idea di quanto una diminuzione della rugosità iniziale possa influire sui risultati finali in termini di ordini di grandezza.

La Figura 6.42 mostra, da un altro punto di vista, il contributo che possono avere le deformazioni plastiche all'energia di adesione nella fase di scarico: sono infatti riportati gli andamenti dell'energia per un valore di rugosità pari a  $\sigma = 10nm$  per i modelli analitici a confronto con quelli ottenuti in [Ardito et al., 2010]. Essi si riferiscono a simulazioni effettuate utilizzando delle superfici rugose generate numericamente con l'algoritmo di Hu-Tonder, dove alla risultante finale di  $\Gamma$  concorrono le interazioni di van der Waals calcolate con il potenziale di Lennard-Jones, la forza di attrazione capillare calcolata con il modello standard puntuale di eq. (2.13) e le deformazioni plastiche: per queste ultime è stato assunto un modello costitutivo elastico perfettamente plastico con legge associata di von Mises e ipotizzato un contatto privo di attrito. Come si osserva, nelle due fasi di carico e scarico si misurano energie di adesione molto differenti sia in termini di intensità che di andamento complessivo, con uno scarico caratterizzato da valori quasi costanti al variare di  $RH$ . Coerentemente con quanto ci si poteva aspettare, l'andamento relativo alla situazione di carico, dove le asperità delle superfici non sono ancora state modificate, è molto vicino alle simulazioni relative ai modelli semianalitici.

Occorre aggiungere che la differenza rilevata tra le due fasi, conseguenza della modifica alla *texture* dovuta al contatto tra le due superfici che comporta inevitabilmente uno schiacciamento delle asperità con conseguente diminuzione del valore di rugosità, potrebbe non essere così evidente nel caso di rugosità più basse come quelle a cui ci si è fino ad ora riferiti. Al momento però non sono disponibili simulazioni basate sul modello in [Ardito et al., 2010] per valori di  $\sigma$  inferiori. È allo studio anche la possibilità di integrare il codice di [Ardito et al., 2010] utilizzando nel calcolo della forza capillare uno tra i modelli analitici per sfere presentati in sostituzione della già citata approssimazione (2.13): a tal fine l'idea è quella di misurare, ad intervalli più o meno regolari nel processo di avvicinamento e successivo allontanamento, la rugosità effettiva corrente e generare due superfici equivalenti attraverso l'algoritmo 2 per valutare su di esse l'attrazione capillare.

In Figura 6.40 si può notare come le differenze tra i vari modelli  $M_i$  siano molto ridotte rispetto sia a quelle riscontrate in Figura 6.39 che a quelle viste nei singoli casi test del capitolo 4: questo avvicinamento nella predizione è da imputarsi al valore del raggio medio delle semisfere utilizzate che nel caso dell'algoritmo 2 per la rugosità indicata di  $\sigma = 2nm$  è pari a  $rm \approx 520nm$  e, come già visto ad esempio in Figura 4.25, per valori nei raggi così elevati gli andamenti delle forze previste dai diversi modelli si avvicinano notevolmente rispetto a quelli calcolati per dimensioni inferiori come ad esempio in Figura 4.26.

Un altro dato interessante lo si può ricavare osservando la Figura 6.43, dove a differenza della Figura 6.40 l'unico cambiamento sta nel fatto che l'energia di adesione per le superfici di Hu-Tonder è calcolata per un percorso di allontanamento a partire non dalla distanza iniziale analoga a quella ottenuta per le superfici di pari rugosità modellate con emisfere ma alla distanza tale per cui le due superfici sono a contatto in

un unico punto e, di conseguenza, non ci sono compenetrazioni tra i due livelli come descritto in precedenza. L'andamento è caratterizzato da una notevole differenza con quello corrispondente della Figura 6.40 e perde anche quella proprietà di parallelismo, in senso logaritmico, alla curva relativa ai dati sperimentali, mostrando una crescita molto più accentuata per rugosità alte e una progressione quasi costante fino a valori di  $RH = 0.5$ . Tali differenze sono un segnale di quanto, oltre alla rugosità, anche la distanza media di separazione influisca in modo determinante nella predizione del modello puntuale: come si può vedere, infatti, anche dalla tabella 6.2, la distanza iniziale misurata con le superfici generate dagli algoritmi 1 e 2 è sempre minore di quella relativa alle analoghe generate con Hu-Tonder e, di conseguenza, la forza capillare non può che essere inferiore in quanto un numero minore di punti sono alla distanza tale per cui il modello applica una pressione non nulla.

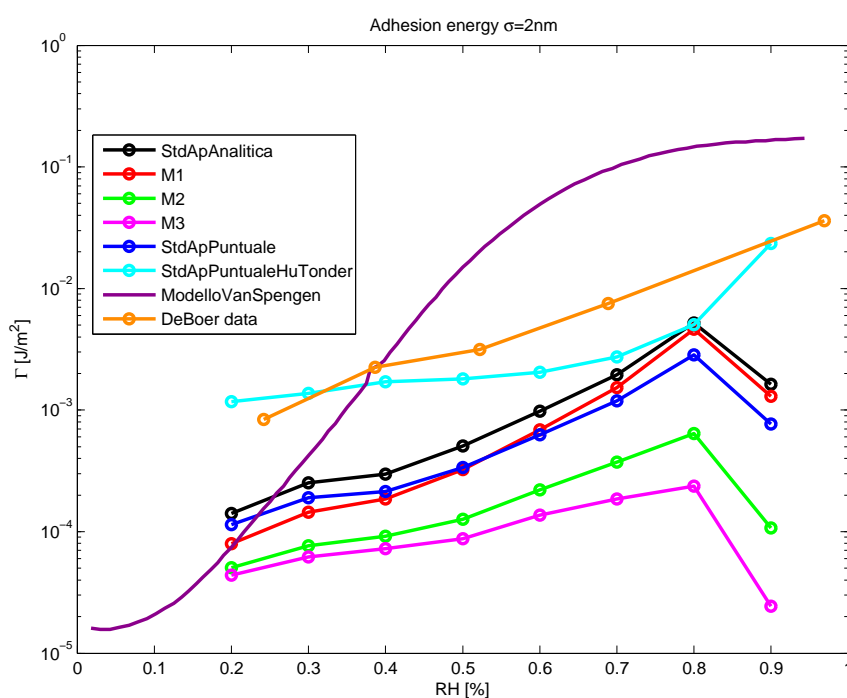


Figura 6.39: Andamento energia di adesione -  $RH$  per i diversi modelli sulle superfici generate con l'algoritmo 1 e di Hu-Tonder.  $\sigma = 2nm$

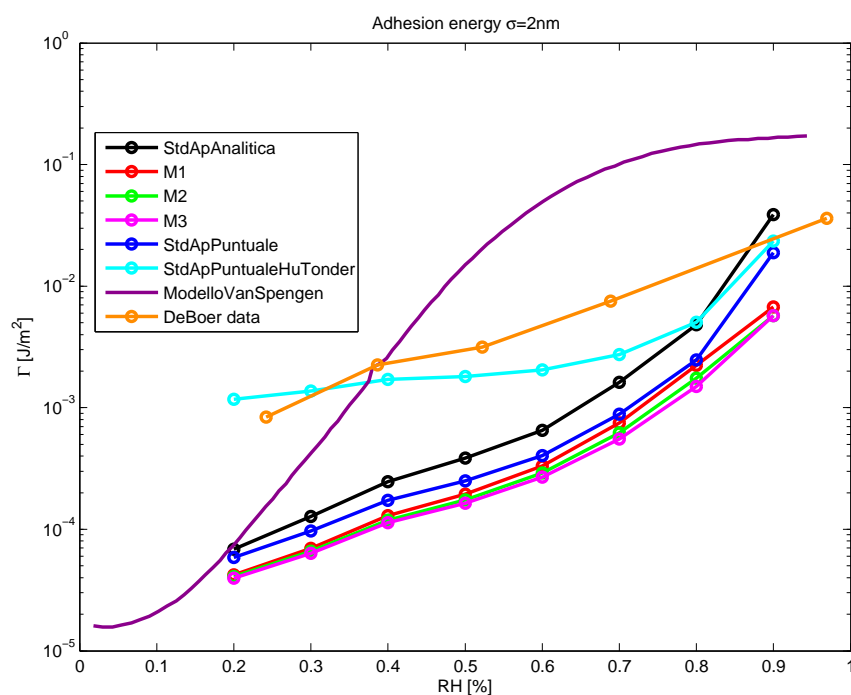


Figura 6.40: Andamento energia di adesione -  $RH$  per i diversi modelli sulle superfici generate con l'algoritmo 2 e di Hu-Tonder.  $\sigma = 2nm$

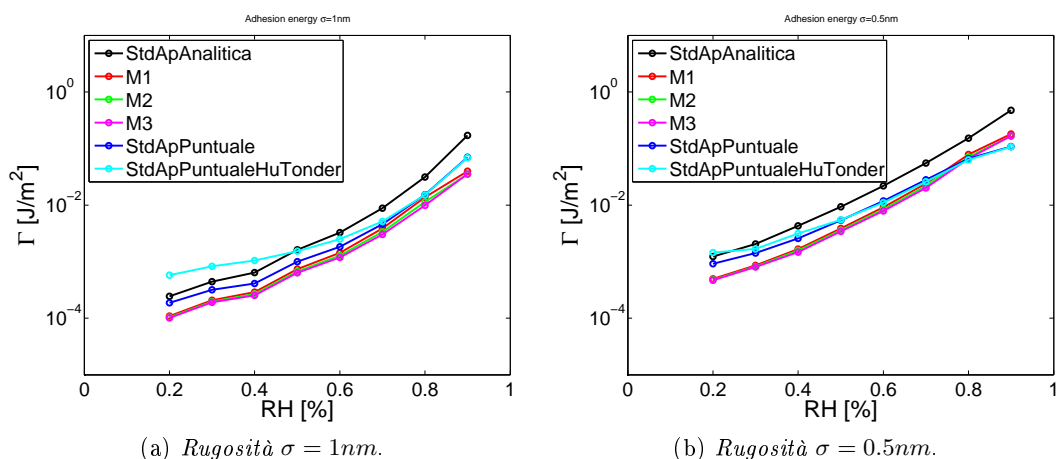


Figura 6.41: Andamento energia di adesione -  $RH$  per i diversi modelli sulle superfici generate con gli algoritmi 2 e di Hu-Tonder, per i due valori di rugosità  $\sigma = 1nm$  e  $\sigma = 0.5nm$

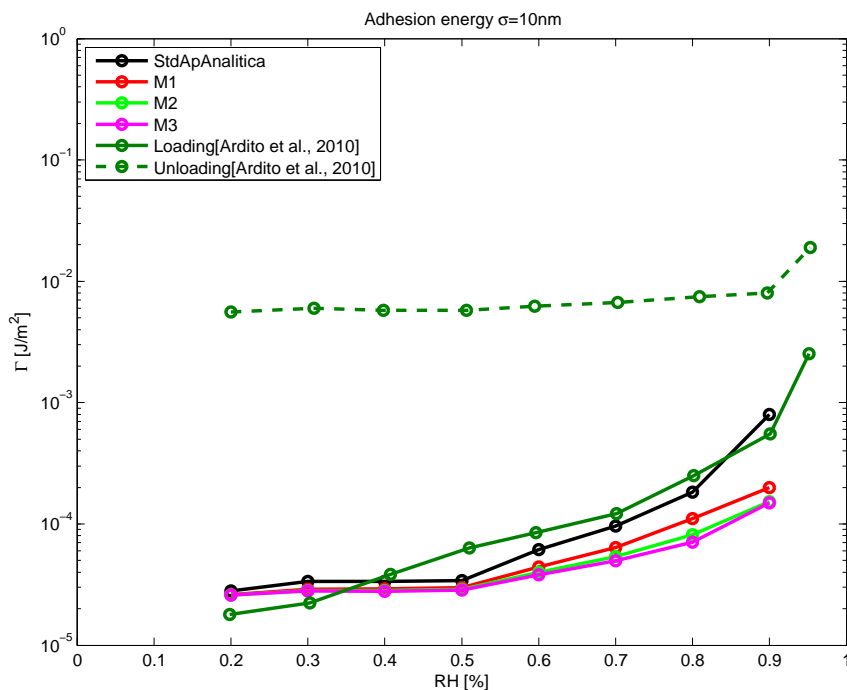


Figura 6.42: Andamento energia di adesione -  $RH$  per i diversi modelli a confronto con quelli ottenuti in [Ardito et al., 2010] attraverso un modello che consideri anche le deformazioni plastiche.

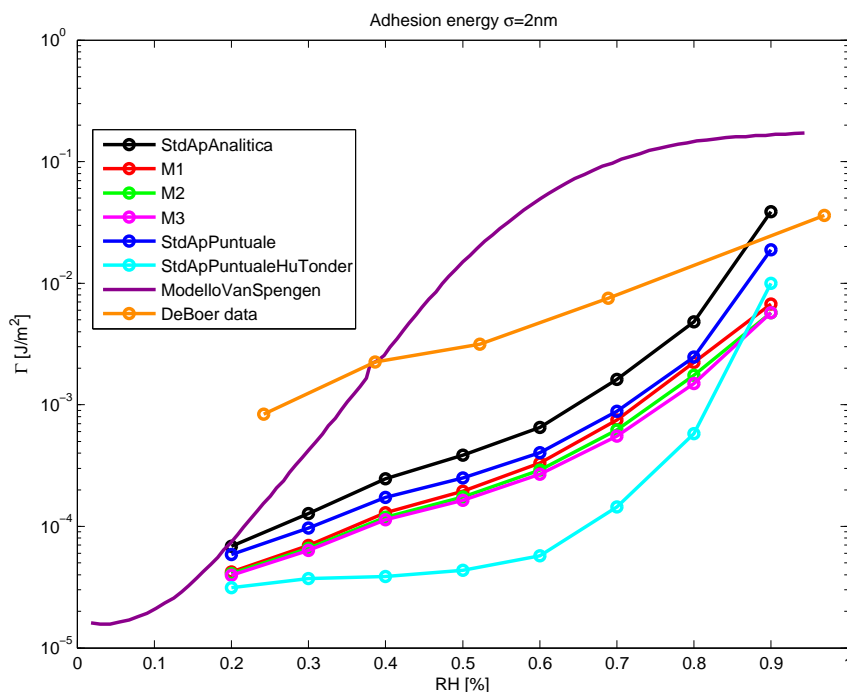


Figura 6.43: Andamento energia di adesione -  $RH$  per i diversi modelli sulle superfici generate con gli algoritmi 1, 2 e di Hu-Tonder. Per queste ultime si è utilizzato come distanza iniziale quella alla quale le superfici si toccano in un solo punto.  $\sigma = 2nm$

## Capitolo 7

# Modellazione FEM di menischi tra superfici complesse

Come visto, inizialmente si è utilizzato il codice FEM solo per geometrie semplici e assialsimmetriche al fine di utilizzare i risultati ottenuti come termine di paragone nella validazione dei modelli analitici per sfere e piani; tuttavia, una delle potenzialità della simulazione FEM descritta è proprio la generalità di geometrie e conformazioni delle superfici rigide tra le quali modellare la formazione di un menisco. Al fine di poter utilizzare nuovamente tale strumento per il confronto e la validazione dei dati ottenuti attraverso i modelli analitici per generiche superfici rugose si è cercato di sviluppare l'algoritmo al fine di adattarlo ad asperità generiche.

### 7.1 Punta AFM su superficie piatta

Nel capitolo 3 si è mostrata, a titolo di esempio, la formazione di un menisco tra una superficie sferica e una punta piramidale volutamente non assialsimmetrica che voleva rappresentare la geometria della sonda di un microscopio a forza atomica. Nonostante il risultato visivo fosse qualitativamente soddisfacente, sono emerse allora alcune difficoltà nella simulazione che vala la pena esporre.

Contrariamente ai casi test caratterizzati da geometrie regolari, nella simulazione non assialsimmetrica si è osservato come, a parità del termine di penalità  $\lambda$ , ci fossero alcuni elementi particolarmente distorti in corrispondenza dei bordi del menisco a contatto con la superficie rigida (Figura 7.1). Già in [Arosio, 2009] si era evidenziato questo aspetto, osservando anche come un aumento di  $\lambda$  non fosse sufficiente per correggere tali deformazioni e che anzi causasse una mancata convergenza dello schema, come a mostrare che la deformazione degli elementi fosse necessaria per l'adattamento del profilo della membrana a quello delle superfici rigide.

Al fine di ottenere la convergenza dello schema è stato poi necessario, anche per valori di penalità che consentissero la necessaria deformazione degli elementi sopra descritta, alzare la tolleranza nella eq. (3.11)<sup>1</sup> dal valore utilizzato per i casi test, arbitrariamente fissato a  $\text{tol} = 10^{-3}$ , ad un valore più elevato di circa  $\text{tol} \approx 5 \cdot 10^{-2}$ .

---

<sup>1</sup>Nel seguito si indicherà con *residuo* il termine di sinistra della eq. (3.11)

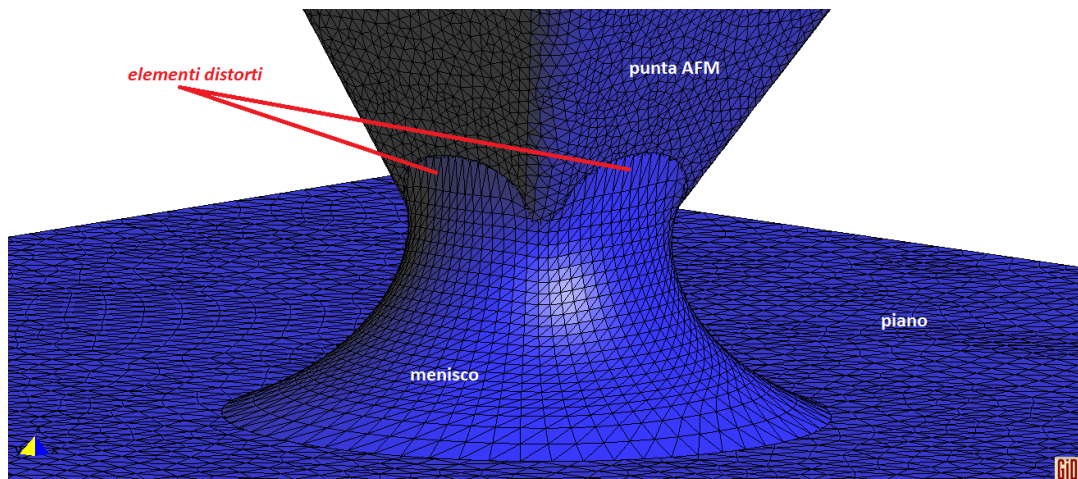


Figura 7.1: Menisco tra una punta triangolare e una superficie piatta: in evidenza gli elementi distorti della membrana a contatto con la superficie rigida superiore

Senza questa correzione il codice non raggiunge convergenza e il residuo inizia ad oscillare. Al fine di valutare se questa oscillazione potesse essere indicativa di una instabilità diffusa del menisco oppure solo localizzata in alcune zone critiche, ne abbiamo analizzato la distribuzione osservando come fosse in realtà concentrata solo in corrispondenza dei nodi vicini agli spigoli della punta rigida mentre in tutto il resto della membrana il residuo fosse uniformemente vicino alla soglia di convergenza (Figura 7.2).

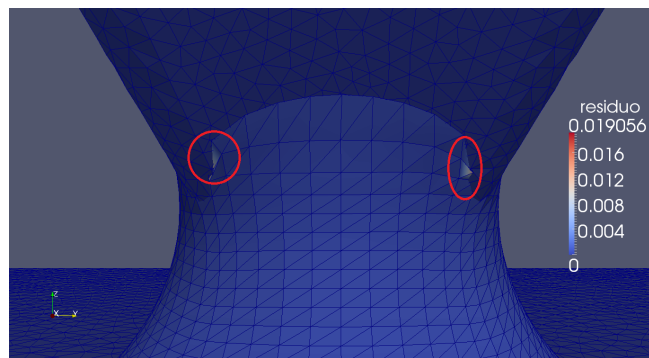


Figura 7.2: Menisco tra una punta triangolare e una superficie piatta: in evidenza gli elementi distorti della membrana a contatto con la superficie rigida superiore caratterizzati da un alto valore del residuo. Per dare un'idea delle dimensioni, la punta triangolare ha un'altezza di  $25\text{nm}$ .

## 7.2 *Spring-Based Smoothing* per la mesh del menisco

Per cercare di risolvere le difficoltà descritte precedentemente, che si è visto insorgere anche per altri tipi di superfici rigide non regolari che verranno descritte più avanti, si è voluto implementare una tecnica di *remeshing* per la superficie del menisco con l'in-



tento sia di controllare la distorsione degli elementi che di raffinare opportunamente la griglia in corrispondenza di quelle zone dove il residuo presenta delle oscillazioni. La procedura adottata è nota in letteratura come *Spring-Based Smoothing* e consiste nel considerare tutti i lati degli elementi che compongono la mesh come delle molle di costante elastica  $k$  assegnata per lasciare poi evolvere verso l'equilibrio, secondo la legge di Hooke, la configurazione così definita. Il risultato, se si assegna un valore di  $k$  uniforme, è una mesh più regolare dove tutti gli elementi hanno dimensioni molto simili. Durante il procedimento di *remeshing* occorre imporre che la superficie fisica della membrana non cambi controllando che lo spostamento di nodi e lati avvenga sempre sulla geometria definita dalla mesh iniziale su cui si vuole applicare la procedura di rilassamento. In Figura 7.4 è possibile vedere l'evolvere della mesh durante lo *Spring-Based Smoothing* per alcune iterazioni. Per enfatizzare la distorsione iniziale degli elementi a contatto con le superfici rigide e meglio apprezzare l'effetto della procedura implementata, la mesh di partenza del menisco è stata infittita da 1500 (dato riguardante Figura 7.1 e 7.2) a 5600 elementi. Se si volesse poi adattare la griglia

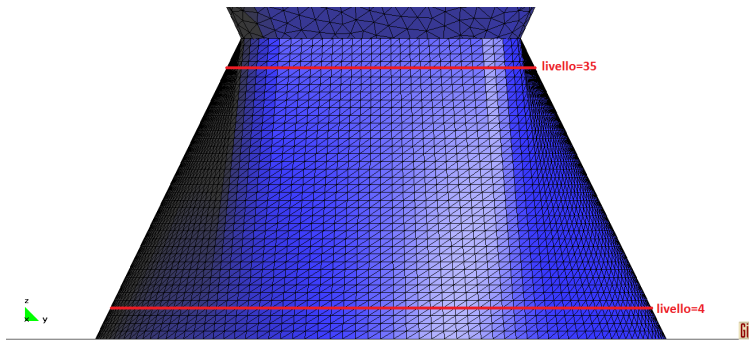
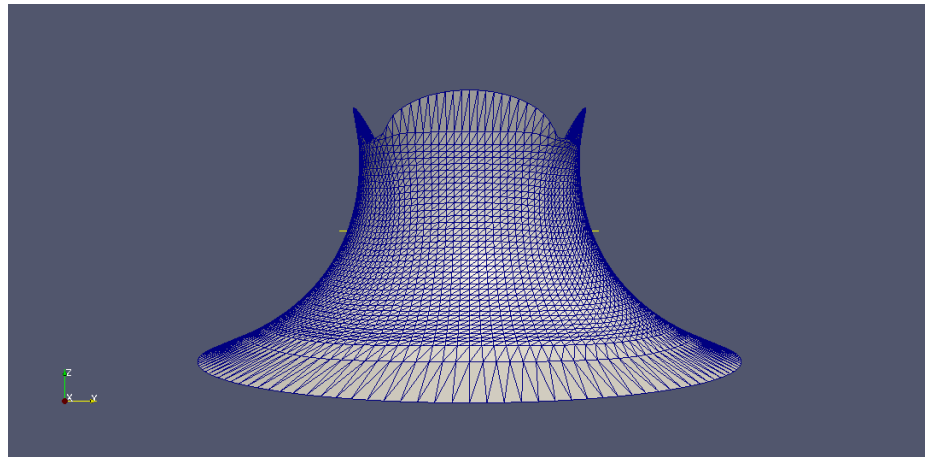


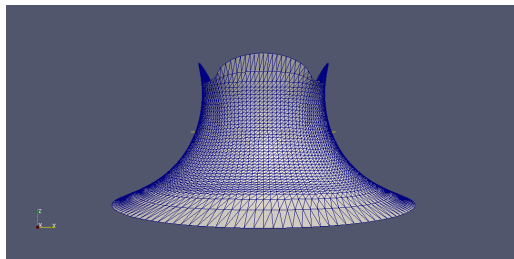
Figura 7.3: Definizione dei livelli

concentrando un maggior numero di elementi in alcune regioni sarebbe sufficiente alzare il valore della costante elastica  $k$  in corrispondenza dei lati degli elementi ad esse appartenenti. In Figura 7.5 è possibile vedere l'evolvere della stessa mesh iniziale di Figura 7.4 durante un rilassamento con raffinamento in corrispondenza delle zone di contatto con le superfici inferiori e superiori dove, come visto, si localizzava l'oscillazione del residuo. Per questo specifico caso i lati degli elementi interessati da un incremento di  $k$  sono quelli appartenenti ai primi e ultimi quattro livelli<sup>2</sup> della mesh (Figura 7.3). In realtà se si assegna un valore di  $k_{max} > k$  uniforme nella zona da raffinare, quello che si ottiene è una concentrazione di elementi in corrispondenza del limite del livello prima o dopo il quale il valore di  $k$  torna quello di base. Per ottenere invece un raffinamento omogeneo occorre assegnare ad ogni livello una costante elastica  $k_{liv}$  tale che  $k \leq k_{liv} \leq k_{max}$  che passi in modo monotono dal valore massimo fino a quello di base, da raggiungere in corrispondenza dell'ultimo livello interessato dal raffinamento.

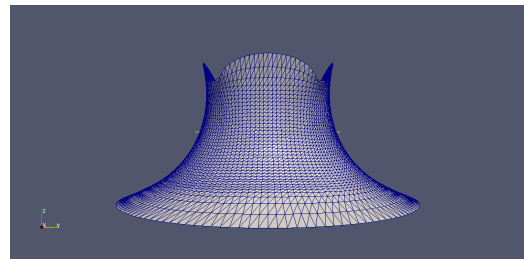
<sup>2</sup>Si definisce limite di un livello la successione di lati che costituisce un profilo circolare nella discretizzazione della membrana ad una quota  $z$  costante, in riferimento alla configurazione data al passo iniziale dell'iterazione temporale del problema 3.7. Il livello zero è il profilo del menisco a contatto con la superficie inferiore.



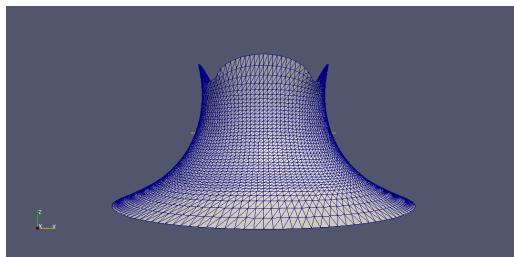
(a) Mesh iniziale.



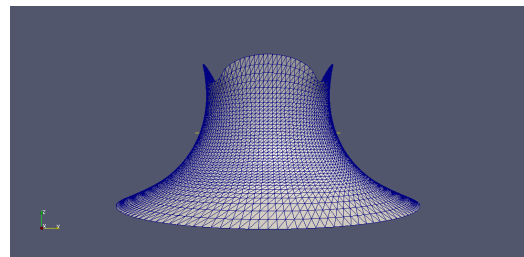
(b) Iterazione=10.



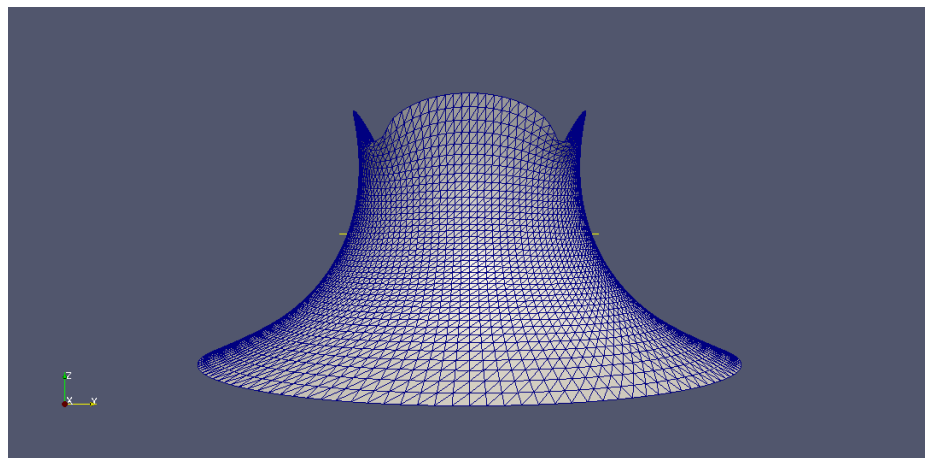
(c) Iterazione=30.



(d) Iterazione=60.



(e) Iterazione=100.



(f) Iterazione=300.

Figura 7.4: Procedura di remeshing uniforme per un menisco di 5600 elementi tra una punta AFM e una superficie piatta. Tempo di esecuzione per 300 iterazioni: 1.8s

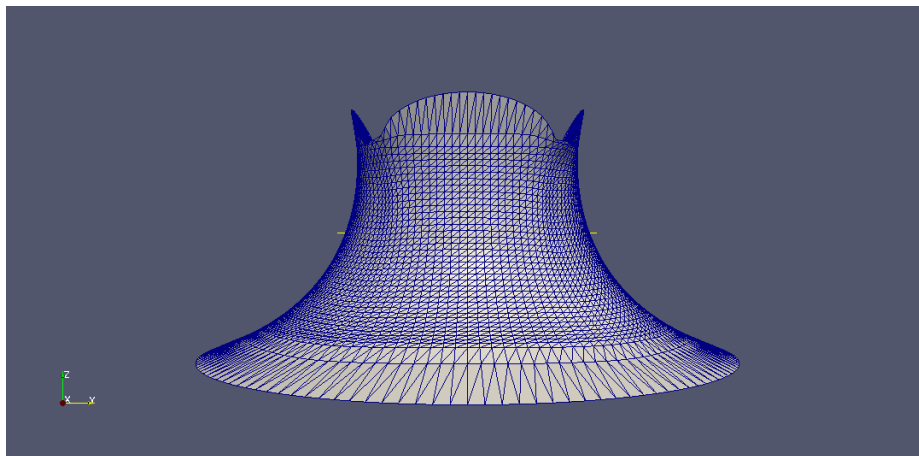
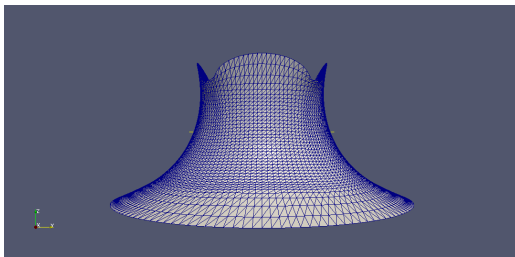
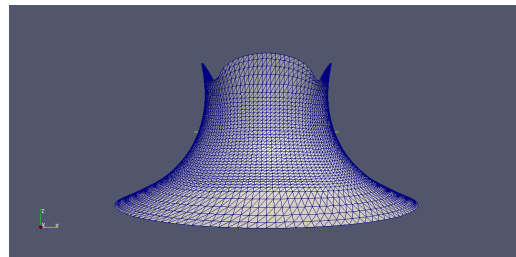
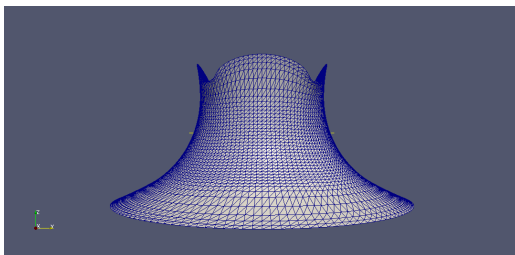
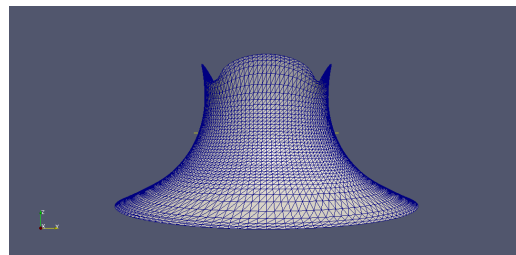
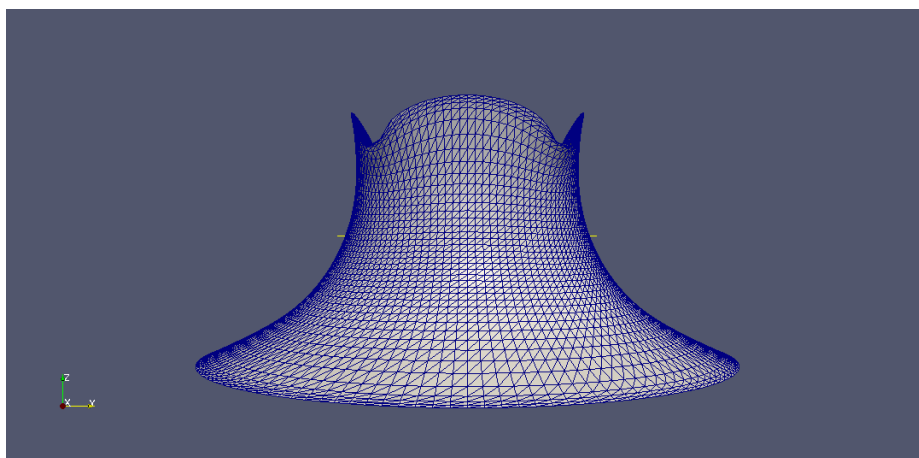
(a) *Mesh iniziale.*(b) *Iterazione=10.*(c) *Iterazione=30.*(d) *Iterazione=60.*(e) *Iterazione=100.*(f) *Iterazione=300.*

Figura 7.5: Procedura di remeshing uniforme per un menisco di 5600 elementi tra una punta AFM e una superficie piatta. Tempo di esecuzione per 300 iterazioni: 1.8s

### 7.2.1 Risultati

Dal punto di vista della ricostruzione della mesh, si può affermare che la procedura implementata dia dei risultati soddisfacenti: questo, unito a tempi di calcolo contenuti, consente di poter utilizzare tale tecnica all'interno della routine per la risoluzione del problema (3.7) in modo anche da non rendere più necessario l'impiego del termine di penalizzazione inizialmente introdotto. Un *remeshing* sufficientemente frequente nel corso delle iterazioni per la soluzione del problema è, infatti, in grado di evitare la distorsione degli elementi della mesh a contatto che le superfici rigide.

Per quanto riguarda il problema del residuo, invece, sempre per il caso di un menisco tra una punta AFM e una superficie piatta, occorre sottolineare come la modifica introdotta non sia sufficiente a consentire la convergenza dello schema numerico con una tolleranza pari a quella utilizzata per i casi test con sfere e piani. Un'analisi della distribuzione dell'errore ne mostra ancora una concentrazione in pochi elementi vicini agli spigoli della punta piramidale, come mostrano le figure 7.6 e 7.7 che si riferiscono rispettivamente al caso di un rilassamento senza e con raffinamento. Un miglioramento, tuttavia, rispetto al risultato ottenuto senza la procedura di *smoothing* lo si può notare confrontando la scala del residuo delle due figure con quella riportata in Figura 7.2 da cui si osserva come il valore nei picchi sia diminuito di quasi un'ordine di grandezza. Si noti, inoltre, come la soluzione non sia accettabile anche da un punto

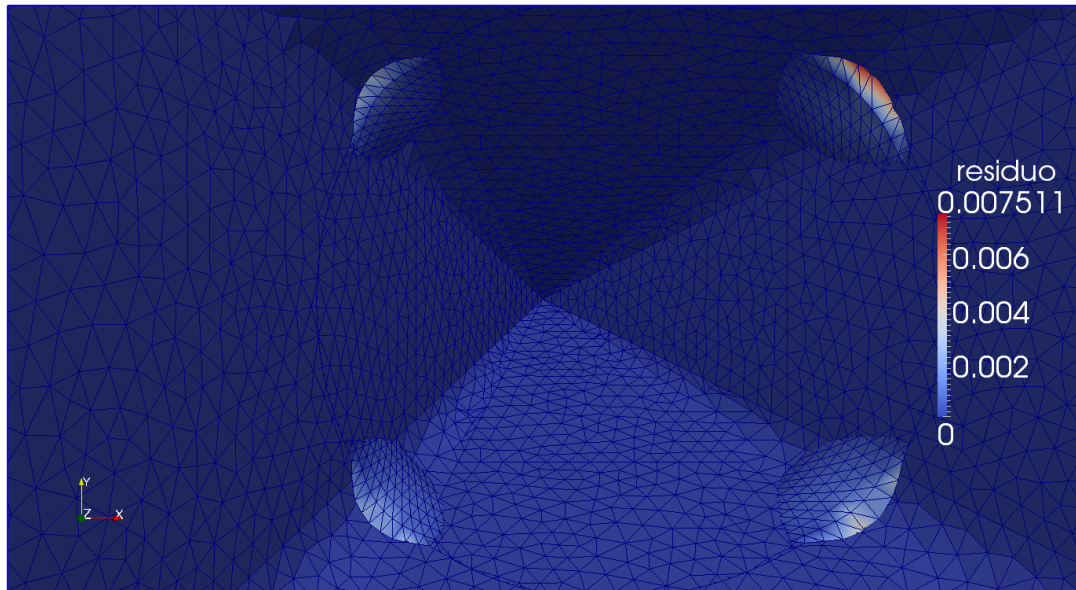


Figura 7.6: Immagine di un menisco tra una punta triangolare e una superficie piatta, con vista dall'interno della punta, ottenuto attraverso la procedura di rilassamento senza raffinamento della mesh: sono visibili gli elementi del menisco che attraversano la superficie rigida e i nodi in cui si ha la concentrazione del residuo.

di vista fisico, essendo caratterizzata da alcuni elementi del menisco che *attraversano* la superficie rigida piramidale. Del resto tale configurazione viola la realtà fisica ma non le relazioni alla base del codice numerico che non prevedono un controllo per evitare tale possibilità. Questo comportamento non è causato dalla procedura di

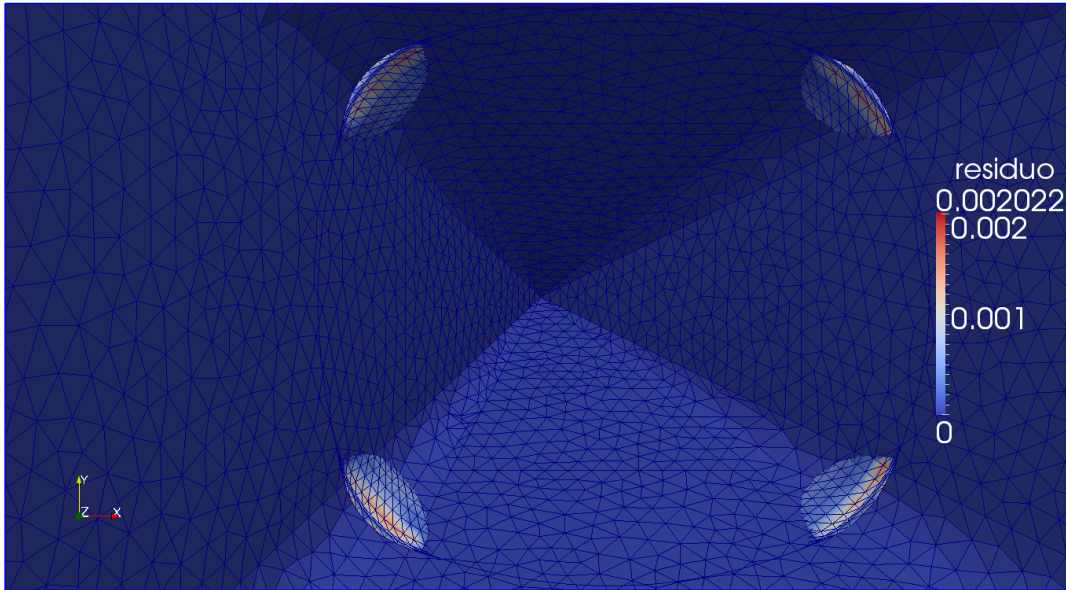


Figura 7.7: Immagine di un menisco tra una punta triangolare e una superficie piatta, con vista dall'interno della punta, ottenuto attraverso la procedura di rilassamento con raffinamento della mesh in prossimità dei bordi: sono visibili gli elementi del menisco che attraversano la superficie rigida e i nodi in cui si ha la concentrazione del residuo.

*remeshing* introdotta in quanto si manifestava già con l'utilizzo del codice originale con il termine di penalità.

Per poter dare alla membrana più possibilità di seguire l'andamento spigoloso della punta si è anche infittita la mesh del menisco, soprattutto in direzione radiale, fino al valore di 15600 elementi totali: anche questo però non ha saputo evitare l'insorgere delle problematiche appena descritte.

## 7.3 Modellazione di un menisco tra due superfici rugose

Nonostante le difficoltà emerse, e non completamente risolte, utilizzando il codice FEM per asperità rigide di geometria non regolare, si è voluto cercare di simulare la formazione di un menisco tra due superfici rigide generate mediante l'algoritmo di Hu-Tonder già descritto, nella speranza che l'assenza degli spigoli, che nell'analisi precedente sono sembrati essere principali responsabili della mancata convergenza, potesse evitare allo schema numerico alcune delle difficoltà emerse.

### 7.3.1 Generazione e dimensionamento della superficie

Come detto, le superfici rugose sono state generate mediante l'algoritmo di Hu-Tonder con la seguente scelta di parametri fisici:

- pianta quadrata di lato  $L = 5\mu m$ .
- rugosità  $\sigma = 5nm$ .

- lunghezza di correlazione:  $\beta_x^* = \beta_y^* = 200nm$
- punti in direzione  $x$  e  $y$ :  $N = M = 512$

Poiché il codice ad elementi finiti richiede un'accurata discretizzazione della superficie rigida, a seguito della generazione dei  $512^2$  punti indicati è stata creata una nuova distribuzione più fitta attraverso una loro interpolazione cubica. Questo, unito all'assemblaggio nella versione non simmetrica ha portato le dimensioni della griglia a valori considerevoli arrivando, per il caso descritto, a  $2 \cdot 10^6$  nodi.

La geometria e le dimensioni delle nuove superfici rigide hanno imposto alcune modifiche alla lettura dell'input e all'inizializzazione del codice rispetto alle versioni originali. L'usuale inizializzazione di forma cilindrica del menisco è stata opportunamente adattata in modo che l'utente possa ancora scegliere il valore del raggio e delle coordinate del centro del cilindro come per i casi test relativi a singole asperità regolari; ora però, sulla base di questi dati, l'algoritmo carica in memoria solo un ritaglio delle superfici inferiore e superiore nell'intorno del centro scelto e di ampiezza opportunamente calibrata in modo da garantire sufficiente spazio per l'evoluzione della membrana verso l'equilibrio, calcola la distanza minima tra le due e genera un cilindro di tale altezza. Infine, il profilo di base e di altezza di quest'ultimo vengono proiettati, secondo la direzione ortogonale al piano  $xy$ , sulle due superfici rigide.

Al fine di accelerare la convergenza dello schema, che come già osservato in [Arosio, 2009] è fortemente influenzata dalla geometria iniziale fornita per la membrana che modella il menisco, si è anche implementata una differente inizializzazione per avere una configurazione di partenza di forma *toroidale*, presumibilmente più vicina alla geometria finale di equilibrio. Anche in questa seconda versione l'utente sceglie centro e raggio esterno mentre il codice valuta l'altezza opportuna della membrana di partenza e ne proietta sulle superfici rigide i profili superiore e inferiore.

In Figura 7.8 si mostrano due esempi di inizializzazione, la prima che chiamiamo ancora di tipo *cilindrico* (Figura 7.8(a)), e l'altra di tipo *toroidale* (Figura 7.8(b)).

### 7.3.2 Risultati

Dopo aver assemblato le due superfici, il codice è stato lanciato ripetutamente scegliendo di volta in volta come centro del menisco inizializzato un punto generico nel piano  $xy$ . Per ciascuno dei centri, oltre a variare la distanza tra le superfici nell'intorno di valori vicini a quelli già misurati nelle prove svolte in precedenza per il modello puntuale della forza capillare, si sono utilizzati diversi raggi per il cilindro iniziale.

In nessuna delle simulazioni effettuate è stato possibile individuare un menisco *stabile*, ossia caratterizzato da un residuo sufficientemente piccolo: un esempio di menisco tra i più vicini al limite voluto è mostrato in Figura 7.9, tra il ritaglio di due superfici ad una distanza media di  $23.06nm$ , ed è caratterizzato da un residuo globale pari a circa  $0.9 \cdot 10^{-2}$ , superiore di quasi un'ordine di grandezza alla tolleranza fissata per la convergenza; come si può osservare dalla sua distribuzione in Figura 7.9(b), anche in questo caso gli elementi più critici sono quelli a contatto con le due superfici rigide e né un infittimento della mesh di partenza fino a  $2 \cdot 10^5$  nodi, né la procedura di rilassamento con raffinamento sono in grado di risolvere tale problema. Le cause di questa mancata convergenza possono essere molteplici e ci limitiamo nel seguito ad alcune considerazioni.

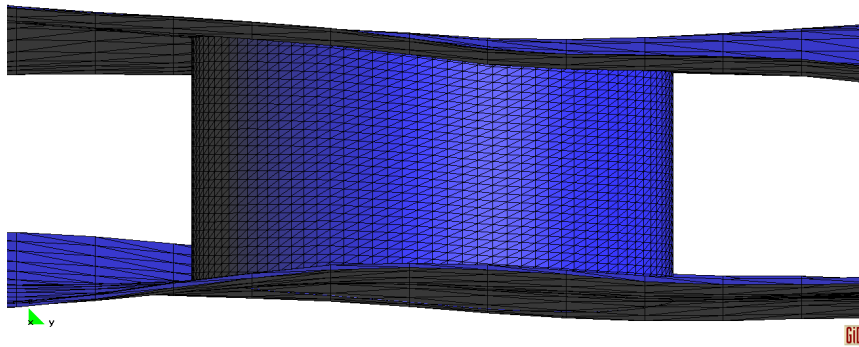
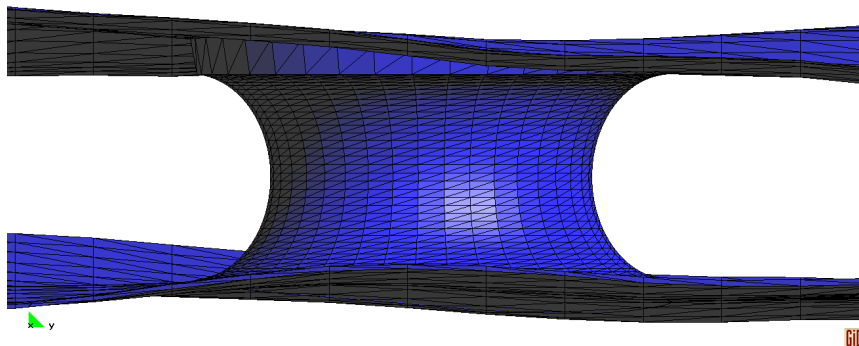
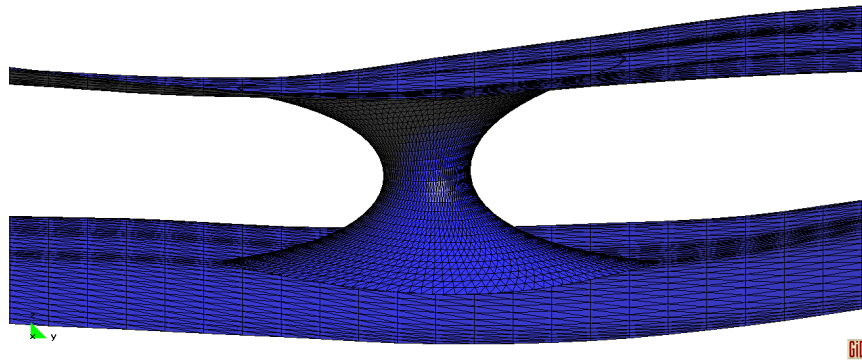
(a) *Inizializzazione di tipo cilindrico (piano yz).*(b) *Inizializzazione di tipo toroidale (piano yz).*

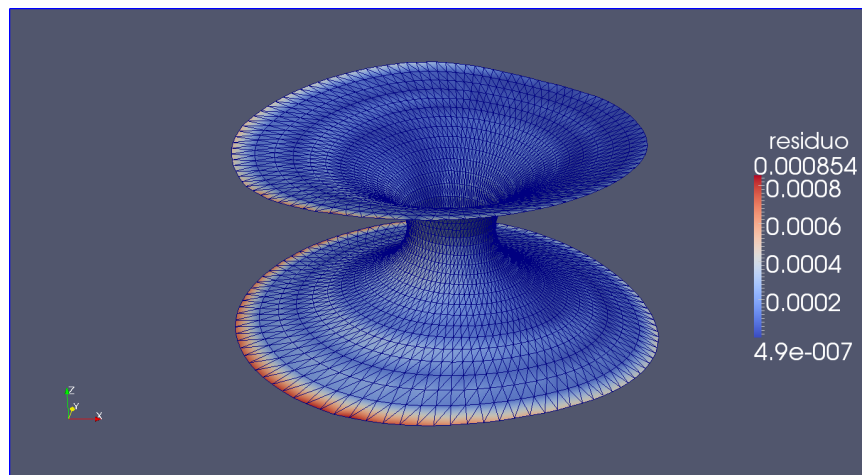
Figura 7.8: Diverse inizializzazioni per le geometria del menisco tra due superfici rigide di rugosità  $\sigma = 5nm$ .

Come già anticipato, la mesh delle superfici rigide ha dimensioni considerevoli ma è possibile che non sia sufficientemente definita. Per dare un'idea, nei casi test visti la lunghezza media di un lato della mesh era dell'ordine di  $0.2 \sim 0.6 nm$  mentre per le superfici rigide si attesta intorno a  $4 \sim 9 nm$ . Inoltre, fino a questo momento, si erano sempre calcolati menischi con una mesh più rada rispetto a quella che discretizzava le superfici rigide: ora invece, volendo mantenere per la mesh del menisco lo stesso dimensionamento utilizzato nei casi test, si ha la situazione inversa.

Il codice ha poi mostrato una forte sensibilità alle coordinate di inizializzazione del menisco oltre che al numero di elementi utilizzati per rappresentarlo: sono sufficienti piccolissime variazioni di questi parametri per ottenere risultati completamente diversi. In particolare il dato più critico è sembrato essere la distanza tra le superfici rigide: sono sufficienti variazioni nell'ordine di  $10^{-2}nm$  per ottenere risultati anche molto diversi. Questo tuttavia, oltre che un limite del codice ancora da risolvere, può essere interpretato come una diretta conseguenza dell'instabilità fisica e numerica di tutti i menischi che si è riusciti a calcolare.



(a) *Vista laterale tra le due superfici.*



(b) *Distribuzione del residuo.*

Figura 7.9: Menisco calcolato tra due superfici di rugosità  $\sigma = 5nm$ , con un rilassamento della mesh ogni 100 iterazioni.  $RH = 0.8$ . Angoli di contatto  $\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{18}$



## Capitolo 8

# Conclusioni

In questa tesi è stato affrontato lo studio di fenomeni di adesione spontanea che possono verificarsi tra le componenti strutturali dei MEMS, con particolare attenzione al contributo dovuto alle forze di attrazione capillare causate dalla presenza di menischi liquidi che possono insorgere per imprecisioni nelle fasi terminali di realizzazione dei dispositivi ma anche in seguito alla condensazione spontanea del vapore acqueo nel loro utilizzo quotidiano.

All'inizio del lavoro, una prima analisi della letteratura ha fatto emergere due possibili approcci al problema: da un lato lo sviluppo di modelli predittivi della forza per singoli menischi che si formano tra due asperità di forma geometrica regolare, dall'altro la stima dell'attrazione capillare tra superfici rugose rappresentative di quelle reali dove, a causa della irregolarità propria della *texture*, è possibile applicare solo formule predittive molto semplificate, dalla validità spesso discutibile. L'obiettivo di questa tesi è stato, in sintesi, la formulazione di un possibile approccio unificato.

Nella prima parte del lavoro sono stati sviluppati alcuni modelli per la predizione della forza tra due singole asperità, di forma piana o sferica con l'intento sia di riprodurre risultati analoghi ottenuti con una modellazione ad elementi finiti di membrana sia di confrontarsi con le forze previste da altri modelli presenti in letteratura. Sono stati analizzati andamenti della forza capillare al variare della distanza di separazione delle asperità, della loro dimensione e dell'umidità relativa. I risultati raggiunti sono stati soddisfacenti e l'accordo tra i modelli sviluppati e il codice ad elementi finiti, totalmente differenti sia nei metodi che nei tempi di calcolo, è stato molto soddisfacente. Un altro problema a cui i modelli hanno dato una prima risposta, ancora poco studiato in letteratura, riguarda la distanza critica di separazione tra le due asperità oltre la quale il menisco non si può più formare: i due metodi hanno mostrato valori limite tra loro vicini e in certi casi di molto inferiori rispetto a quelli considerati nelle formule semplificate che vengono utilizzate per superfici irregolari.

Successivamente, per poter applicare questi modelli a superfici realistiche di maggiore interesse ingegneristico, sono stati implementati degli algoritmi in grado di modellare la rugosità delle superfici con asperità di forma sferica. L'intento è stato quello di ottenere delle *texture* ancora rappresentative di quelle reali, anche se con qualche limite rispetto a tecniche più sofisticate, che consentissero però l'utilizzo dei modelli visti per

singole asperità. Un'analisi delle superfici generate ha permesso di mostrare come gli indicatori statistici di rugosità comunemente utilizzati possano essere riprodotti con una confidenza accettabile anche dalla nuova modellazione introdotta.

Si è passati quindi all'utilizzo dei modelli per tali superfici sostituendo l'approccio *proximity force approximation* (PFA) utilizzato fino ad ora, per texture irregolari, in versione puntuale con uno di tipo PFA per asperità: la forza di attrazione capillare tra due superfici poste in prossimità tra loro è stata infatti calcolata sommando ogni singolo contributo dovuto all'interazione tra due sfere corrispondenti che modellano la rugosità.

Come per i casi test tra singole asperità, anche in questo caso si sono ottenuti andamenti della forza al variare della rugosità media, dell'umidità relativa, della distanza di separazione e della correlazione tra le asperità, che sono stati confrontati con gli stessi previsti dal modello semplificato applicato alle superfici rugose più realistiche. L'analisi ha permesso di rilevare un sostanziale accordo tra i modelli puntuali e quelli più semplici per singole asperità, che viene meno per le varianti più complesse che meglio riproducono il risultato ad elementi finiti dei casi test singoli, le quali prevedono per le superfici forze di attrazione minori. Come ci si può aspettare, le differenze sono meno marcate in condizioni di prova tali per cui il contributo delle forze capillari diventa trascurabile rispetto ad altri, ossia per grandi distanze di separazione e, ancor di più, per bassi valori di umidità o, ancora, rugosità elevate.

Purtroppo, in questo caso, non è stato possibile utilizzare il codice ad elementi finiti ed avere così un termine di confronto come in precedenza. L'intento iniziale era infatti quello di utilizzare il codice per simulare la formazione di un menisco tra le asperità irregolari delle superfici più realistiche in quanto il modello prescinde potenzialmente dalla loro geometria: nonostante gli sviluppi apportati al codice in questa direzione, tuttavia, l'obiettivo non è stato completamente raggiunto in quanto i menischi che si è riusciti a riprodurre sono caratterizzati da un'instabilità numerica ancora irrisolta.

Anche per questo motivo si è voluto confrontare gli andamenti ottenuti, in particolare per quanto riguarda l'energia di adesione, con alcuni dati sperimentali disponibili in letteratura. In essi però, alla forza di attrazione contribuiscono non solo fenomeni capillari ma anche, in primo luogo, le interazioni di van der Waals alla possibile influenza delle deformazioni irreversibili delle asperità delle due superfici che si verificano in seguito al loro contatto.

Per la stima delle interazioni di van der Waals, come per quelle di natura capillare, esistono due possibili approcci al problema: da un lato una valutazione ancora di tipo puntuale basata sul potenziale di Lennard-Jones che prescinde dalla geometria delle superfici, dall'altro una formula per l'interazione tra asperità di forma regolare e, in particolare, sferica. Nelle simulazioni effettuate si è allora considerato il contributo, nelle due forme: la prima è stata applicata per le superfici irregolari e la seconda per quelle modellate con emisfere, ottenendo risultati comparabili ad alcune misurazioni sperimentali riguardanti il solo contributo della forza di van der Waals.

Al calcolo dell'energia di adesione è stato così aggiunto questo secondo contributo

che, insieme a quello dovuto alle forze capillari, ha permesso di ottenere andamenti confrontabili con quelli sperimentali. L'energia di adesione per unità di superficie ottenuta nelle prove effettuate è da intendersi come limite inferiore di quella reale in quanto i modelli non tengono conto della deformazione plastica delle asperità che può comportare incrementi anche di uno o più ordini di grandezza, di fatto la stessa differenza che si è riscontrata tra i modelli implementati e i dati disponibili.

L'analisi dei risultati conseguiti mette in luce interessanti possibili sviluppi futuri di questo lavoro. In primo luogo resta ancora aperta la possibilità di utilizzare il codice ad elementi finiti per la simulazione della formazione di un menisco tra generiche superfici rugose. Di sicuro interesse è anche la modellazione della coalescenza di menischi che si formano tra asperità vicine e che potrebbe essere affrontata sempre attraverso il codice ad elementi finiti. Questo fenomeno, che può giocare un ruolo significativo in termini di forza capillare risultante, nelle superfici modellate con sfere non viene preso in considerazione. Le singole asperità sono infatti collocate ad una distanza tale per cui non è mai possibile avere interazione tra più di due sfere, senza considerare poi che i modelli analitici sviluppati sono basati sull'ipotesi che i centri delle sfere tra cui il menisco si forma siano allineati su una retta ortogonale al piano medio. Per tenere in considerazione la deformazione plastica delle asperità a seguito del contatto è attualmente allo studio l'interazione dei modelli presentati in questa tesi con un codice tridimensionale ad elementi finiti, lavoro che riguarderà presumibilmente un'attività di ricerca successiva a questa tesi, dove si vorrebbero anche confrontare i risultati ottenuti per singole asperità con un nuovo approccio al problema basato su simulazioni statistiche di dinamica molecolare, e i risultati per superfici rugose con delle misure sperimentali che sono al momento in fase di realizzazione.



# Ringraziamenti

Ringrazio i professori Alberto Corigliano, Attilio Frangi e Raffaele Ardito per avermi seguito in questa tesi: in particolare il professor Corigliano per il lavoro di supervisione e revisione, il professor Frangi per l'aiuto nello sviluppo del suo codice ad elementi finiti e il professor Ardito per la collaborazione nell'implementazione degli algoritmi per la generazione di superfici rugose.

Ringrazio inoltre l'ingegner Luca Magagnin e Fabio Pagano per le misurazioni sperimentali.

Ringrazio tutte le persone che mi sono state vicine in questi anni di università, i compagni di corso, la mia famiglia e lei.



# Bibliografia

- [Adamson e Gast, 1997] Adamson, A. e Gast, A. (1997). *Physical chemistry of surfaces*. Wiley.
- [Anandarajah e Chen, 1995] Anandarajah, A. e Chen, J. (1995). Single correction function for computing retarded van der waals attraction. *Journal of Colloid and Interface Science*, 176(2), pp. 293–300.
- [Ardito et al., 2010] Ardito, R., Corigliano, A., e Frangi, A. (2010). Finite element modelling of adhesion phenomena in mems. pages 1–6. Proceedings of the 11th International Conference on Thermal, Mechanical and Multi-Physics Simulation and Experiments in Microelectronics and Microsystems (EuroSimE).
- [Arosio, 2009] Arosio, D. (2009). Modellazione e simulazione di fenomeni di adesione in microsistemi. Tesi di Laurea Magistrale, Politecnico di Milano.
- [Baldassarre, 2011] Baldassarre, L. (2011). *Adhesion in Poly-Silicon MEMS: Experimental Characterization and Numerical Modeling*. Tesi di Dottorato, Politecnico di Milano.
- [Bhushan, 2001] Bhushan, B. (2001). *Modern tribology handbook*. Number v. 1 in Mechanics and materials science series. CRC Press.
- [Bonnet e Frangi, 2006] Bonnet, M. e Frangi, A. (2006). *Analyse des solides déformables par la méthode des éléments finis*. Ecole Polytechnique.
- [Butt, 2008] Butt, H.-J. (2008). Capillary forces: Influence of roughness and heterogeneity. *Langmuir*, 24(9), pp. 4715–4721. PMID: 18442225.
- [Cacchione, 2007] Cacchione, F. (2007). *Mechanical characterization and simulation of fracture processes in polysilicon Micro Electro Mechanical Systems (MEMS)*. Tesi di Dottorato, Politecnico di Milano.
- [Chau et al., 2007] Chau, A., Rignier, S., Delchambre, A., e Lambert, P. (2007). Three-dimensional model for capillary nanobridges and capillary forces. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 15(3), pp. 305.
- [Corigliano e Taliercio, 2005] Corigliano, A. e Taliercio, A. (2005). *Meccanica computazionale. Soluzione del problema elastico lineare*. Esculapio.
- [Dadgour et al., 2011] Dadgour, H., Hussain, M., Cassell, A., Singh, N., e Banerjee, K. (2011). Reliability physics symposium (irps), 2011 ieee international. pages 3D.3.1 – 3D.3.10.

- [de Boer e de Boer, 2007] de Boer, M. e de Boer, P. (2007). Thermodynamics of capillary adhesion between rough surfaces. *Journal of Colloid and Interface Science*, 311(1), pp. 171 – 185.
- [de Boer et al., 1999] de Boer, M. P., Knapp, J. A., Mayer, T. M., e Michalske, T. A. (1999). Role of interfacial properties on mems performance and reliability. volume 3825, pages 2–15. SPIE.
- [de Gennes, 1985] de Gennes, P. G. (1985). Wetting: statics and dynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 57, pp. 827–863.
- [de Lazzer et al., 1999] de Lazzer, A., Dreyer, M., e Rath, H. J. (1999). Particle - surface capillary forces. *Langmuir*, 15(13), pp. 4551–4559.
- [de Souza, 2007] de Souza, E. J. (2007). *The effect of capillary forces on adhesion of biological and artificial attachment devices*. Tesi di Dottorato, Universität Stuttgart, Holzgartenstr. 16, 70174 Stuttgart.
- [DelRio et al., 2005] DelRio, F. W., de Boer, M. P., Knapp, J. A., Reedy, D. E., Clews, P. J., e Dunn, M. L. (2005). The role of van der waals forces in adhesion of micromachined surfaces. *Nature Materials*, 4(8), pp. 629–634.
- [Dolphin, 2000] Dolphin (2000). Micro-electro-mechanical capacitive pressure sensor. [[http://www.dolphin.fr/flip/mems/mems\\_cps.html](http://www.dolphin.fr/flip/mems/mems_cps.html)].
- [Eleftheriou e Moheimani, 2011] Eleftheriou, E. e Moheimani, S. (2011). *Control Technologies for Emerging Micro and Nanoscale Systems*, volume 413 of *Lecture Notes in Control and Information Sciences*. Springer.
- [Endevco, 2003] Endevco (2003). Piezoresistive accelerometer designed for crash and flutter testing applications. *On-line Magazine 'Sensors and Transducers'*.
- [Green e Zerna, 2002] Green, A. e Zerna, W. (2002). *Theoretical Elasticity*. Phoenix Edition Series. Dover Publications.
- [Greenwood e Williamson, 1966] Greenwood, J. A. e Williamson, J. B. P. (1966). Contact of nominally flat surfaces. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 295(1442), pp. pp. 300–319.
- [Hu e Tonder, 1992] Hu, Y. e Tonder, K. (1992). Simulation of 3-d random rough surface by 2-d digital filter and fourier analysis. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 32(1 - 2), pp. 83 – 90. Proceedings of the 5th International Conference on Metrology and Properties of Engineering Surfaces.
- [Israelachvili, 2011] Israelachvili, J. (2011). *Intermolecular and Surface Forces*. Academic Press. Elsevier Science.
- [Jones, 1924] Jones, J. E. (1924). On the determination of molecular fields. (ii). from the equation of state of a gas. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 106(738), pp. pp. 463–477.



- [Josefaipulo, 2011] Josefaipulo, L. J. (2011). Mems piezoresistive pressure sensor. [<http://josefaipulo.livejournal.com/4773.html>].
- [Knospe e Haj-Hariri, 2012] Knospe, C. R. e Haj-Hariri, H. (2012). Capillary force actuators: Modeling, dynamics, and equilibria. *Mechatronics*. In Press.
- [Lambert et al., 2008] Lambert, P., Chau, A., Delchambre, A., e Regnier, S. (2008). Comparison between two capillary forces models. *Langmuir*, 24(7), pp. 3157–3163. PMID: 18315017.
- [Lian et al., 1993] Lian, G., Thornton, C., e Adams, M. J. (1993). A theoretical study of the liquid bridge forces between two rigid spherical bodies. *Journal of Colloid and Interface Science*, 161(1), pp. 138 – 147.
- [Melrose, 1966] Melrose, J. C. (1966). Model calculations for capillary condensation. *AIChE Journal*, 12(5), pp. 986–994.
- [MEMtronics, 2009] MEMtronics (2009). Mems packaging. [<http://www.memtronics.com>].
- [Metu Mems, 2002] Metu Mems, g. (2002). Piezoresistive pressure and temperature sensor cluster. [<http://www.microsystems.metu.edu.tr/piezops/piezops.html>].
- [Mu e Su, 2007] Mu, F. e Su, X. (2007). Analysis of liquid bridge between spherical particles. *China Particuology*, 5(6), pp. 420–424.
- [Oakley e Knight, 1995] Oakley, D. R. e Knight, N. F. (1995). Adaptive dynamic relaxation algorithm for non-linear hyperelastic structures part i. formulation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 126(1-2), pp. 67 – 89.
- [Omron, 2001] Omron, E. C. (2001). Rf mems relay switch: First truly hot switchable 10 ghz mems relay. [<http://fr.mouser.com/Omron2SMES-01/>].
- [Pakarinen et al., 2005] Pakarinen, O. H., Foster, A. S., Paaajanen, M., Kalinainen, T., Katainen, J., Makkonen, I., Lahtinen, J., e Nieminen, R. M. (2005). Towards an accurate description of the capillary force in nanoparticle-surface interactions. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 13(7), pp. 1175.
- [Payam e Fathipour, 2011] Payam, A. F. e Fathipour, M. (2011). A capillary force model for interactions between two spheres. *Particuology*, 9(4), pp. 381 – 386. Multiscale Modeling and Simulation of Complex Particulate Systems.
- [Pepin et al., 2000] Pepin, X., Rossetti, D., Iveson, S. M., e Simons, S. J. (2000). Modeling the evolution and rupture of pendular liquid bridges in the presence of large wetting hysteresis. *Journal of Colloid and Interface Science*, 232(2), pp. 289 – 297.
- [Rabinovich et al., 2005] Rabinovich, Y. I., Esayanur, M. S., e Moudgil, B. M. (2005). Capillary forces between two spheres with a fixed volume liquid bridge: Theory and experiment. *Langmuir*, 21(24), pp. 10992–10997. PMID: 16285763.

- [Salinelli e Tomarelli, 2008] Salinelli, E. e Tomarelli, F. (2008). *Modelli Dinamici Discreti*. Unitext - La Matematica per il 3+2. Springer Verlag.
- [Sirghi et al., 2006] Sirghi, L., Szoszkiewicz, R., e Riedo, E. (2006). Volume of a nanoscale water bridge. *Langmuir*, 22(3), pp. 1093–1098.
- [Stifter et al., 2000] Stifter, T., Marti, O., e Bhushan, B. (2000). Theoretical investigation of the distance dependence of capillary and van der waals forces in scanning force microscopy. *Phys. Rev. B*, 62, pp. 13667–13673.
- [STMicroelectronics, 2009] STMicroelectronics (2009). A new family of single and multi-axis mems gyroscopes. [<http://embeddedsystemnews.com>].
- [Tawfik, 2009] Tawfik, H. (2009). An introduction to mems world. [<http://knol.google.com/k/a-glimpse-at-mems>].
- [van Spengen et al., 2002] van Spengen, W. M., Puers, R., e Wolf, I. D. (2002). A physical model to predict stiction in mems. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 12(5), pp. 702.
- [Wark e Richards, 1999] Wark, K. e Richards, D. (1999). *Thermodynamics*. McGraw-Hill series in mechanical engineering. WCB/McGraw-Hill.
- [Wenzel, 1949] Wenzel, R. N. (1949). Surface roughness and contact angle. *Journal of Physical Chemistry*, 53(9), pp. 1466–1467.
- [Wikipedia, 2011] Wikipedia (2011). Supercritical drying — wikipedia, the free encyclopedia. [[http://en.wikipedia.org/wiki/Supercritical\\_drying](http://en.wikipedia.org/wiki/Supercritical_drying)].
- [Yang et al., 2010] Yang, L., Tu, Y., e Fang, H. (2010). Modeling the rupture of a capillary liquid bridge between a sphere and plane. *Soft Matter*, 6, pp. 6178–6182.
- [Zienkiewicz et al., 2005] Zienkiewicz, O., Taylor, R., e Taylor, R. (2005). *The finite element method for solid and structural mechanics*. The Finite Element Method. Elsevier Butterworth-Heinemann.