

Влияние нанорельефа на смачиваемость поверхностей



Раскрыта фундаментальная связь между нанорельефом поверхности и ее смачиваемостью: сравнение результатов экспериментов и моделирования методом молекулярной динамики доказано, что рост шероховатости ведет к предсказуемому и линейному увеличению гидрофильности.

Ученые Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Алферовского университета, Центра вычислительной физики МФТИ и AIRI представили комплексное исследование, посвященное влиянию наношероховатости на краевой угол смачивания на поверхности оксида кремния. Работа опубликована в высокорейтинговом журнале *Journal of Molecular Liquids* (квартиль Q1). Со стороны СПбПУ в исследовании участвовали Анастасия Кондратьева, Илья Копаничук и Платон Карасев.

Авторы совместили экспериментальные измерения методом лежащей капли с крупномасштабным молекулярно-динамическим моделированием (Martini 3), что позволило проследить переход от нанокапель к макросистемам. Интересной частью методологии стало использование специально разработанного нейросетевого алгоритма PANDA-NN для точного определения краевого угла по профилю плотности жидкости, что особенно важно для анализа неидеальных капель на шероховатых поверхностях.

Результаты показали, что краевой угол смачивания на оксиде кремния в изученном диапазоне (20–60 °C) не зависит от температуры, но уменьшается с увеличением объема капли. Ключевым методологическим выводом стала демонстрация необходимости использования конфигурации «стенка-стенка» в моделировании для достижения быстрого равновесия системы и получения достоверных данных.

Оригинальная статья: [REDACTED]