



*Aalen School of Applied Photonics  
Zentrum für Optische Technologien*

AG Micro- und Nanophotonik

# Electrical Fields and Polymers

Center for Optical Technologies  
Anton-Huber-Strasse 21  
73430 Aalen  
Germany



# Overview (Nano)imprinting and e-fields

- **Electrostatic force-assisted NIL (EFAN), eNIL, Electrohydrodynamic patterning**
  - Contact
  - Structured template / stamp
- **Deformation of Thin Liquid Films**
  - No contact
  - No structured templates
- **Electrohydrodynamic patterning**
  - Contact
  - Deformation of structures
- **Particle or Molecular Movement due to e-force**
- **Structure Deposition**

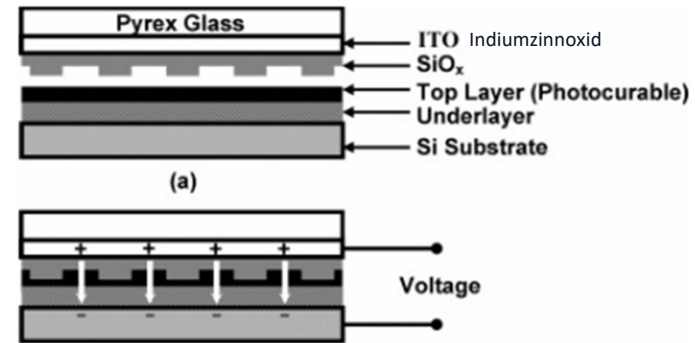


## Restrictions:

- Only papers no fundamental books
- Equal or higher than Prio 2

# Electrostatic force-assisted NIL (EFAN)

- Liang et al 2005
  - Novel imprint method, UV NIL
  - The e field force between mold and substrate presses the mold into a resist (figure)
  - Patent
- Jin et al 2010
  - Imprinting of a lotus leaf using EFAN
  - Investigation of fluid effects (displacement vs time, velocity vs electrical field)
- Weng et al 2011
  - Magnetic Nickel Mold and Electromagnetism Assisted Pressure for Replication of Microstructures
  - Nickel is possible



- [1] Liang, X., et al., "Electrostatic force-assisted nanoimprint lithography (EFAN)," Nano Lett.; 5(3), 527–530. doi:10.1021/nl0480161 (2005)
- [2] Liang, X., et al., "Electrostatic force-assisted nanoimprint lithography (EFAN)," Nano Lett.; 5(3), 527–530. doi:10.1021/nl0480161 (2005)
- [3] Wang, C., Morton, K. J., Fu, Z., Li, W.-D., Chou, S. Y., "Printing of sub-20 nm wide graphene ribbon arrays using nanoimprinted graphite stamps and electrostatic force assisted bonding," Nanotechnology. doi:10.1088/0957-4484/22/44/445301 (2011)

# Dielectrophoresis-electrocapillary force (DEP-ECF)

Development based on EFAN: Structured Electrode

- Li et al 2011
  - Manufacturing of high-aspect-ratio structures based on e-field
  - Dynamic studies, High aspect ratio 10:1
  - Experiments
- Tian et al 2011 (a)
  - Numerical analysis of dielectrophoresis: numerical simulation of the patterning process based on a coupling of L-DEP and two-phase flow theories.
  - Plate and patterned template
- Tian et al 2011 (b)

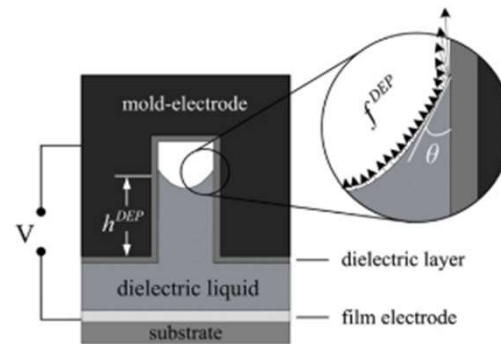


Figure 2. Schematic illustration of DEP-ECF in the patterning process.

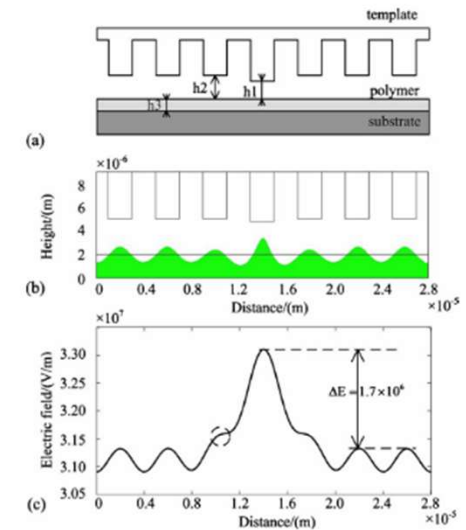


Fig. 3. (Color online) Simulation of the case with the middle template pattern 200 nm longer than the other patterns. (a) Sketch of the template; (b) formed structures with voltage and polymer-template gap 100 V and 3  $\mu\text{m}$ , respectively; (c) electrical distribution on the film surface at the initial stage.

Li, 2011

Tian, 2011 (b)

[1] Li, X., Shao, J., Tian, H., Ding, Y., Li, X., "Fabrication of high-aspect-ratio microstructures using dielectrophoresis-electrocapillary force-driven UV-imprinting," J. Micromech. Microeng.; 21(6), 65010. doi:10.1088/0960-1317/21/6/065010 (2011)

[2] Tian, H., Shao, J., Ding, Y., Li, X., Li, X., "Numerical studies of electrically induced pattern formation by coupling liquid dielectrophoresis and two-phase flow," Electrophoresis. doi:10.1002/elps.201100036 (2011)

[3] Tian, H., Shao, J., Ding, Y., Li, X., Li, X., Liu, H., "Influence of distorted electric field distribution on microstructure formation in the electrohydrodynamic patterning process," J. Vac. Sci. Technol. B; 29(4), 41606. doi:10.1116/1.3609808 (2011)



# Dielectrophoresis, eNIL, EFAN

Development based on EFAN, e-NIL: hot embossing + nanoparticles

- Ressier et al 2012
  - electrical nano-imprint lithography (e-NIL), which combines the advantages of both NIL and e- $\mu$ CP
  - Negative charged (latex) nanoparticles selectively deposited
- Ikutame et al 2014
  - hot embossing and electrical field on glass
  - the Na<sup>+</sup> deficient areas formed depending on the mold pattern → etched by KOH developer

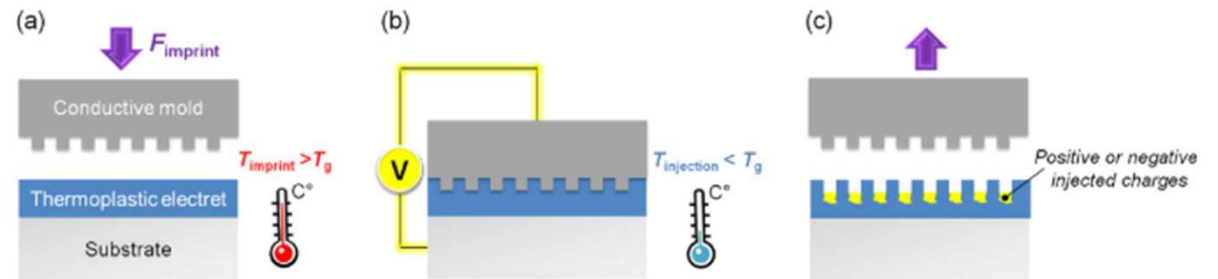


Figure 1. Principle of electrical nano-imprint lithography (e-NIL): (a) imprint, (b) charge injection, (c) demolding.

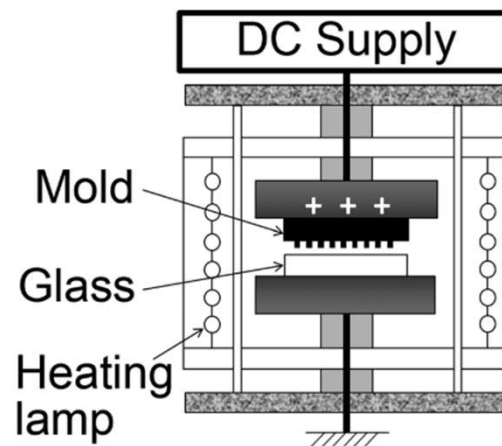
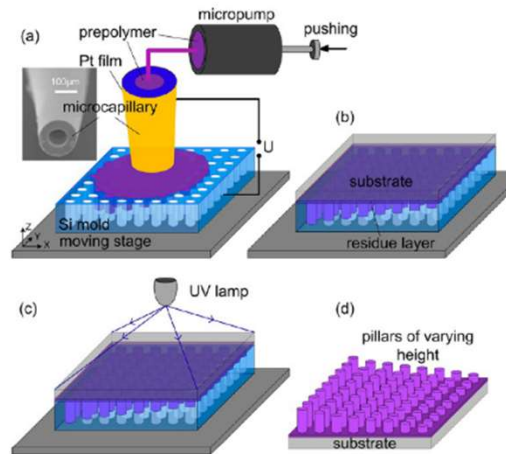


FIG. 1. Schematic of the electrical imprint machine.

[1] Ressier, L., Palleau, E., Behar, S., "Electrical nano-imprint lithography," Nanotechnology. doi:10.1088/0957-4484/23/25/255302 (2012)  
 [2] Ikutame, N., et al., "Low-temperature fabrication of fine structures on glass using electrical nanoimprint and chemical etching," Journal of Applied Physics; 114(8), 83514. doi:10.1063/1.4819321 (2013)

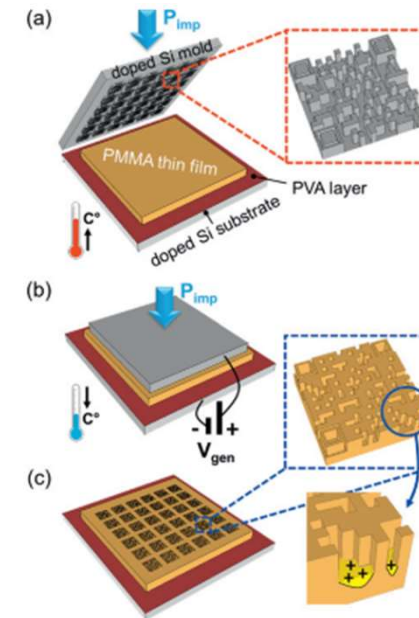
- Li et al 2013 (left)
  - electrohydrodynamically drives a dielectric liquid to enter microholes of a silicon mold
  - depth depending on the corresponding voltage and amplitude (AC)  $\rightarrow$  variation of voltage  $\rightarrow$  varying heights
- Diaz et al 2014 (right)
  - Based on Ressler
  - Nanoxerography
  - e-NIL (hot embossing) for colloid-based devices in industrial scale.
  - QR code based on colloidal lanthanide-doped upconverting photoluminescent NaYF<sub>4</sub> nanocrystals



**Figure 1.** Schematic illustration of the EM3 process. (a) Electrohydrodynamically filling the prepolymer into the mold's microholes by applying a voltage between the mold and the microcapillary (the inset image), with the latter connected to a micropump with a volumetric prepolymer supply rate of  $0.2 \mu\text{L/s}$ ; (b) removing the microcapillary and bringing a transparent substrate onto the filled mold; (c) curing the prepolymer by UV-exposure; (d) removing the mold from the substrate. A constant clearance of  $50 \mu\text{m}$  is kept between the microcapillary and the mold while the mold-supporting stage is horizontally moving at a speed of  $0.1 \text{ mm/s}$  relative to the microcapillary; the applied voltage is square-waved, with a frequency of  $10 \text{ Hz}$  and amplitude modulated spatially with the microcapillary's position.

[1] Li, X., Tian, H., Shao, J., Ding, Y., Liu, H., "Electrically modulated microtransfer molding for fabrication of micropillar arrays with spatially varying heights," *Langmuir*. doi:10.1021/la304986e (2013)

[2] Diaz, R., Palleau, E., Poirot, D., Sangeetha, N. M., Ressler, L., "High-throughput fabrication of anti-counterfeiting colloid-based photoluminescent microtags using electrical nanoimprint lithography," *Nanotechnology*. doi:10.1088/0957-4484/25/34/345302 (2014)



**Figure 1.** Schematics of electrical nano-imprint lithography (e-NIL) process: (a) pattern imprinting at a temperature  $T_{imp}$  above the glass transition temperature  $T_g$  of PMMA with a pressure  $P_{imp}$ , during a time  $t_{inj}$ , (b) charge injection during the time  $t_{inj}$  at a temperature  $T_{inj} < T_g$ , (c) demolding at  $T_{inj}$ .

- Tian et al 2014
  - Microstructuring with a high aspect ratio based on
    - flat electrode + structured polymer
    - structured electrode + flat polymer
  - Practical and theoretical comparison
- Li et al 2015 (Bild)
- Li et al 2014
  - Electrowetting is applied to properly fill the prepolymer into the mold cavities at atmospheric pressure, independent of their size or geometry.
  - Difficult-to-mold features (leaf): High aspect ratios by investigating the speed and the voltage

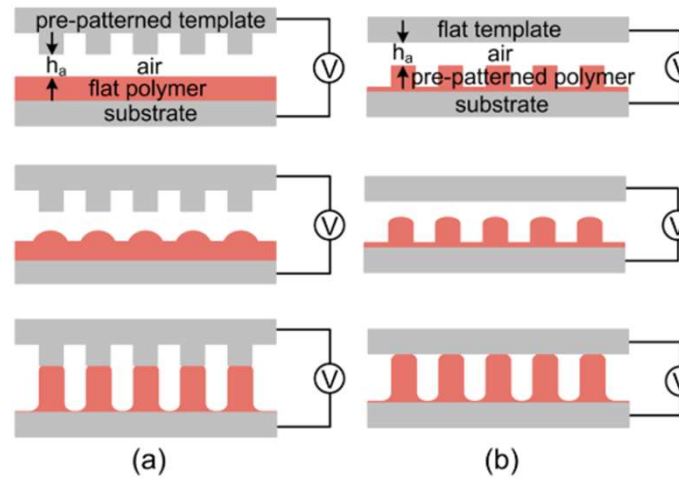


Figure 1. Electrically induced structuring with a prepatterned template (a) and with a prepatterned polymer (b).

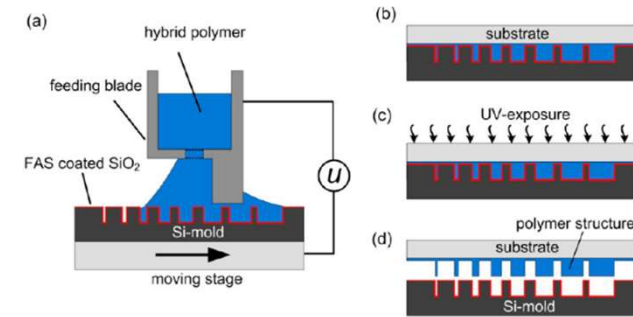


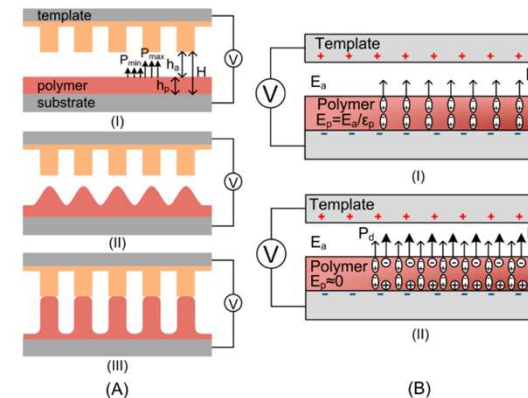
Figure 1. Illustrative experimental steps of electrowetting assisted transfer micromolding process. (a) A voltage is applied between the feeding blade and the mold on a moving stage to generate electrowetting to allow for a full filling of the UV-curable liquid prepolymer into the mold cavities; (b) a transparent substrate is brought into contact with the prepolymer filled mold; (c) the prepolymer is sandwiched between the substrate and the mold is cured by UV exposure; (d) the polymer duplicate is transferred onto the substrate after separating from the mold.

[1] Tian, H., Shao, J., Ding, Y., Li, X., Hu, H., "Electrohydrodynamic Micro-/Nanostructuring Processes Based on Prepatterned Polymer and Prepatterned Template," *Macromolecules*; 47(4), 1433–1438. doi:10.1021/ma402456u (2014)

[2] Li, X., et al., "Electrowetting assisted air detraping in transfer micromolding for difficult-to-mold microstructures," *ACS Appl. Mater. Interfaces*. doi:10.1021/am502728n (2014)



- Tian et al 2014
  - Electrically induced structure formation (EISF)
  - Further paper to the simulation from 2011
  - improving the aspect ratio allowed in EISF by doping organic salt into the perfect dielectric polymer  $\rightarrow$  leaky dielectrics
  - can be much more effective at being electrohydrodynamically deformed into a high aspect ratio
- Tian et al 2014
  - electrohydrodynamic patterning (EHDP)
  - irregular patterning (2-20 $\mu$ m, pillars and squares) vs unstable wavelengths, mass parameters, e field modulation.



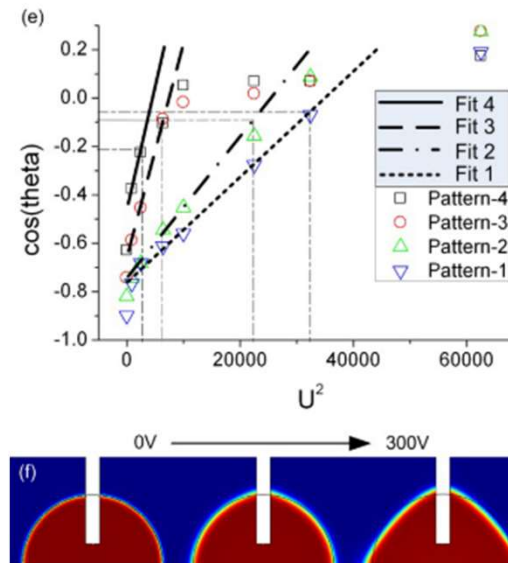
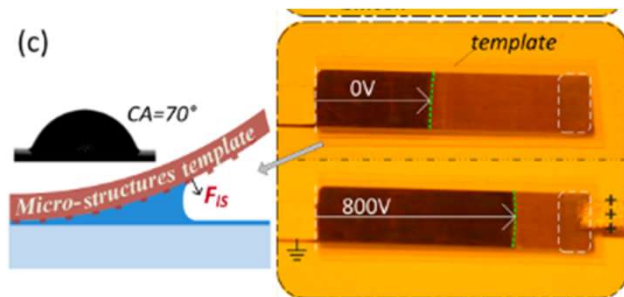
**Figure 1.** (A) Sketch of EISF spatially modulated by a structured template with a maximum EHD pressure  $P_{max}$  below the protrusive undersides of the template and a minimum  $P_{min}$  below the template cavities. (B) Components of the driving pressure induced electrically in a perfect dielectric polymer (I) and in a leaky dielectric polymer (II).

[1] Tian, H., Shao, J., Ding, Y., Li, X., Liu, H., "Numerical characterization of electrohydrodynamic micro- or nanopatterning processes based on a phase-field formulation of liquid dielectrophoresis," *Langmuir*. doi:10.1021/la400535p (2014)

[2] Tian, H., Wang, C., Shao, J., Ding, Y., Li, X., "Electrohydrodynamic pressure enhanced by free space charge for electrically induced structure formation with high aspect ratio," *Langmuir*. doi:10.1021/la5027043 (2014)



- Li et al 2015
  - Electrowetting: Alternative approach is presented for fabricating microlens array with varying focal length on a microbowl array microtextured film
  - Micro lenses with different foci
- Wang et al 2016
  - R2PNIL, especially in the case of uneven substrates and rigid cylinder molds
  - to facilitate the fabrication of nanostructures on large-area uneven substrates



[1] Li, X., Shao, J., Li, X., Tian, H., "Electrowetting of liquid polymer on petal-mimetic microbowl-array surfaces for formation of microlens array with varying focus on a single substrate," *Bioinspiration, Biomimetics, and Bioreplication*; 94291F. doi:10.1117/12.2084057 (2015)

[2] Wang, C., Shao, J., Tian, H., Li, X., Ding, Y., Li, B. Q., "Step-Controllable Electric-Field-Assisted Nanoimprint Lithography for Uneven Large-Area Substrates," *ACS Nano*. doi:10.1021/acsnano.5b08032 (2016)

- Ikeda et al 2016
  - Based on Ikutame et al 2014
  - Alkali cations in glass (soda-lime silicate glass) move from the anode side to the cathode side using applied DC e-field
  - Areas with a alkali cation deficiency can be wet etched
- Lv et al 2017
  - Rheological and Electrical analysis of the EHDP (Electrodynamic patterning) leak and perfect dielectrics
  - High aspect ratio and fast, EWSF and EWOD (Electrowetting on dielectrics)
- Schnitzer et al 2017
  - The Taylor–Melcher leaky dielectric model describes electrohydrodynamic phenomena in poorly conducting liquids. In this model, the volumetric charge is completely absent.

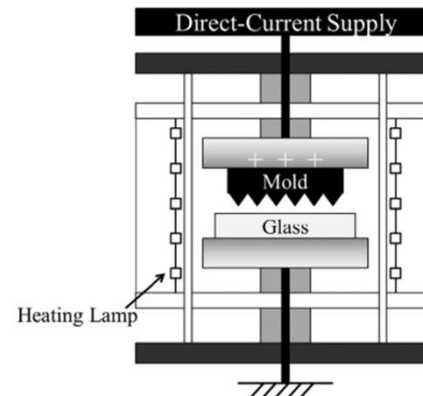


Fig. 1. Schematic setup of the electrical nanoimprint.

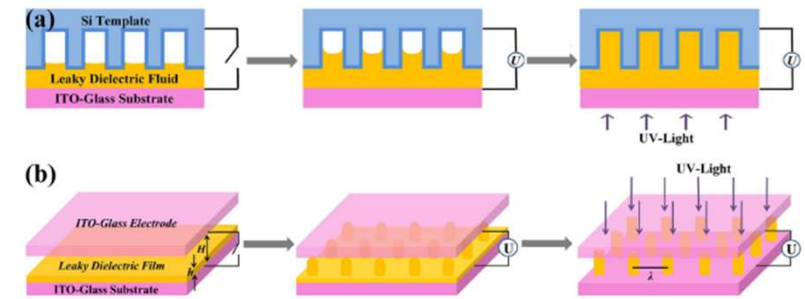


Fig. 2. Schematic diagram of (a) EWSF and (b) EISF for a photoresist film.

[1] Ikeda, S., Uraji, K., Suzuki, T., Yamamoto, K., Nishii, J., "Migration behavior of alkali and alkaline-earth cations in soda-lime silicate glass surface by electrical nanoimprint," *J. Non-Cryst. Solids*; 453, 103–107. doi:10.1016/j.jnoncrysol.2016.09.030 (2016)

[2] Lv, G., Zhang, S., Shao, J., Wang, G., Tian, H., Yu, D., "Rapid fabrication of electrohydrodynamic micro-/nanostructures with high aspect ratio using a leaky dielectric photoresist," *React. Funct. Polym.*; 118, 1–9. doi:10.1016/j.reactfunctpolym.2017.06.014 (2017)

[3] Schnitzer, O., Yariv, E., "The Taylor–Melcher leaky dielectric model as a macroscale electrokinetic description," *J. Fluid Mech.*; 773, 1–33. doi:10.1017/jfm.2015.242 (2015)

- Lv et al 2018
  - Conducting polymers (CP) Superhydrophilic Photoresist in the On-state, Superhydrophobic in the Off-state during Electrohydrodynamic patterning (EHDP)
  - Varying the upper/lower electrode (the surface of the electrode coated with/without a thin dielectric film)
  - Comparison : Electrically Induced Structure Formation (EISF) (Stretching) and Electrowetting-Driven Structure Formation (EWSF) (Filling)
- Wang et al 2019
  - Hierarchical micro-nanostructures: Stamp with buffer areas a Nanostructure is adapted to a Mikro structure by the force of an electrical field.
  - wetting vs. efield, contact angle vs. structure height, extraction efficiency vs height/ Duty ratio/ Refractive index

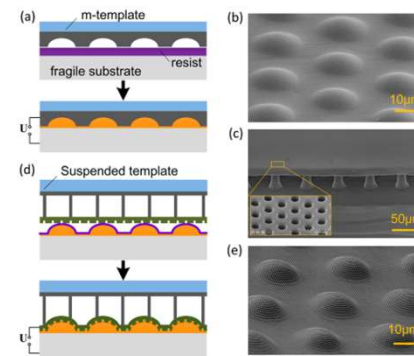
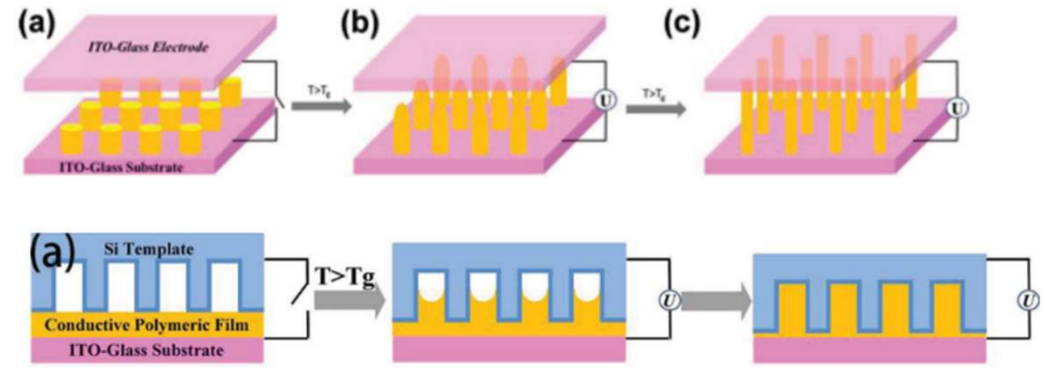


Figure 1. Schematic representation of the suspended-template electric-assisted nanoimprinting process applied to the fabrication of hierarchical micro-nanostructures. (a) Microstructures imprinted on a substrate surface by electric-assisted nanoimprinting with a microtemplate (m-template). (b) Imprinted microhump array. (c) Suspended template with a nanohole array. (d) Nanopillars imprinted on a microhump surface by a suspended template. (e) Full coverage of hierarchical micro-nanostructures.

[1] Lv, G., Liu, Y., Shao, J., Tian, H., Yu, D., "Facile Fabrication of Electrohydrodynamic Micro-/Nanostructures with High Aspect Ratio of a Conducting Polymer for Large-Scale Superhydrophilic/Superhydrophobic Surfaces," *Macromol. Mater. Eng.*; 303(2), 1700361. doi:10.1002/mame.201700361 (2018)

[2] Wang, C., Shao, J., Lai, D., Tian, H., Li, X., "Suspended-Template Electric-Assisted Nanoimprinting for Hierarchical Micro-Nanostructures on a Fragile Substrate," *ACS Nano*. doi:10.1021/acsnano.9b04031 (2019)



- Chen et al 2019
  - Broaden the transmitted light angular distribution, to promote light mixing and in turn, to improve the ACU of CCT tunable LED lamps
  - Parameters: efficiency vs height/ Duty ratio/ Refractive index
- Moirangthem et al 2020
  - Overcome the drawbacks of EFAN which can only applied if the resist is spun on a conducting substrate
  - Magnetic field to modify the resist distribution

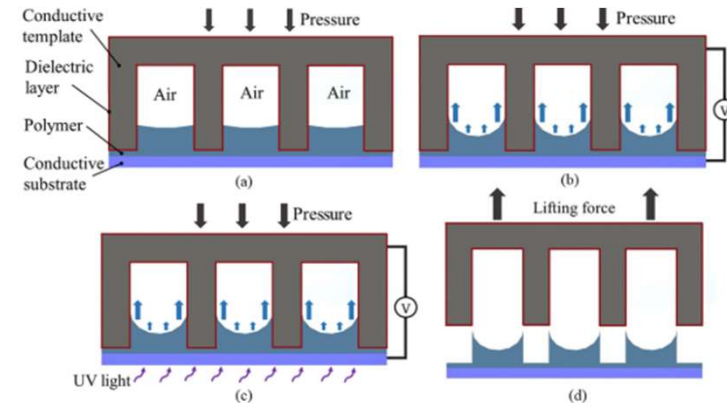


Fig. 1. Schematic illustration of concave MLA fabrication by the electrowetting process. (a) Coating of a polymer layer on the bottom transparent conductive oxide substrate and contact of the micro-patterned template onto the polymer layer with a certain pressure to confine the polymer in the micro-holes; (b) Application of a voltage between the template and the conductive substrate under controlled pressure; (c) UV irradiation from the transparent conductive oxide substrate side to cure the polymer; (d) Separation of the template from the cured polymer.

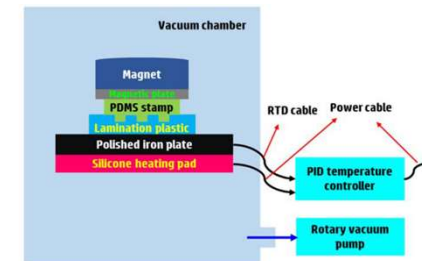
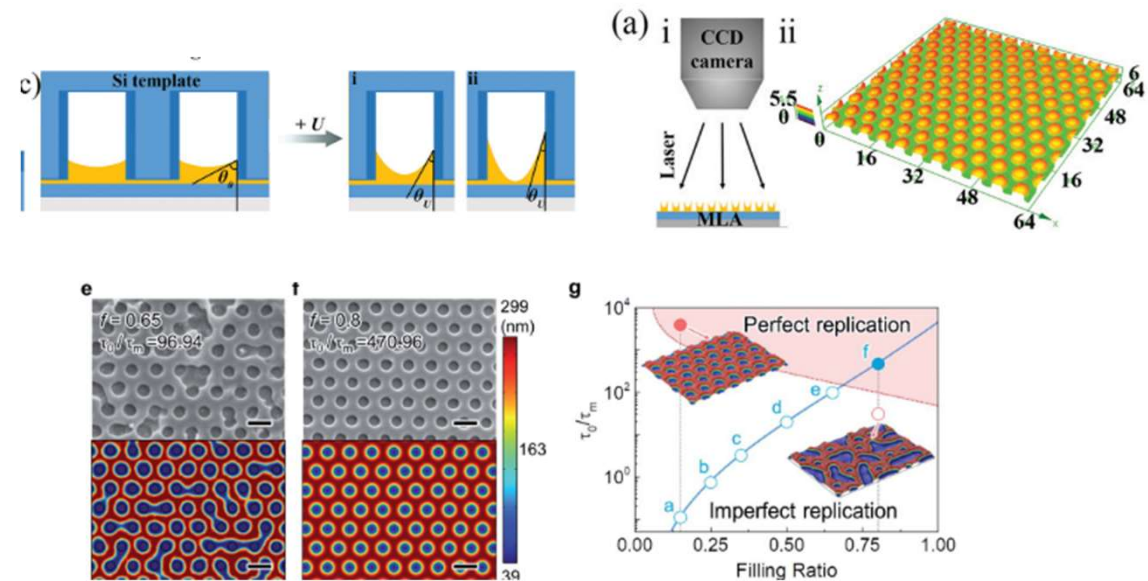


Figure 1. Schematic of the proposed MF-TNIL consisting of a Magnet, Magnetic plate, PDMS stamp, Laminated plastic sheet, Polished iron plate, Silicone heating pad, PID temperature controller, and Rotary vacuum pump.

[1] Chen, J., Fritz, B., Liang, G., Ding, X., Lemmer, U., Gomard, G., "Microlens arrays with adjustable aspect ratio fabricated by electrowetting and their application to correlated color temperature tunable light-emitting diodes," *Opt. Express*; 27(4), A25–A38. doi:10.1364/OE.27.000A25 (2019)

[2] Moirangthem, R. S., "Magnetic force assisted thermal nanoimprint lithography (MF-TNIL) for cost-effective fabrication of 2D nanosquare array," *Nano Ex.*; 1(1), 10039. doi:10.1088/2632-959X/ab934d (2020)

- Lv et al 2021
  - fabrication of MLAs with a well-controlled curvature using an LD prepared via EWOD-MHA-Si
  - effect of the material properties, applied external voltage, the spin rate on the curvature of the MLAs were systematically investigated
  - performance of the MLAs was estimated 10Hz, 300 Vpp
- Hwang et al 2021
  - shorter patterning time
  - enhanced scalability for replicating small and geometrically diverse features
  - geometrical analysis vs simulation: growth velocity, the fidelity of the replicated features, the boundary between the domains of suitable and unsuitable conditions
- Lv et al 2022 Review



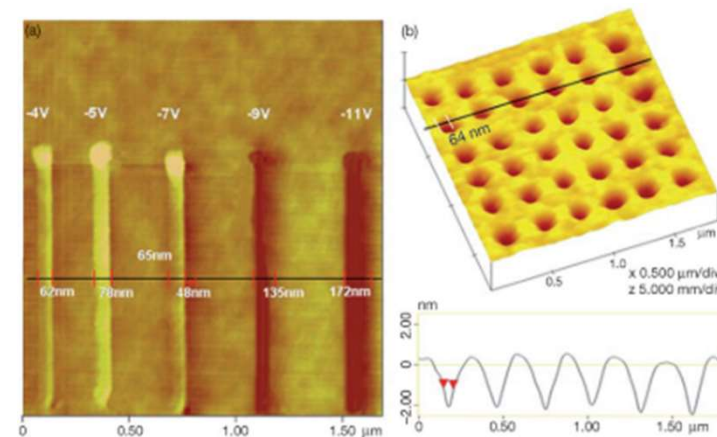
[1] Lv, G., et al., "Facile fabrication of flexible concave microlens arrays with a well-controlled curvature," Mater. Chem. Front.; 5(21), 7759–7766. doi:10.1039/D1QM00519G (2021)

[2] Hwang, J., Park, H., Lee, J., Kang, D. J., "Parametric scheme for rapid nanopattern replication via electrohydrodynamic instability," RSC Adv. doi:10.1039/d1ra01728d (2021)

[3] Lv, G., Tian, H., Shao, J., Yu, D., "Pattern formation in thin polymeric films via electrohydrodynamic patterning," RSC Adv. doi:10.1039/d2ra01109c (2022)

# Deformation of Thin Liquid Films (Writing)

- Lv (2022) Review: The deformation in e-field started in 1999
- Verma et al 2005
  - Theoretical discussion about shaping a thin liquid film by a patterned electrode
  - Conditions
- Jegadesan et al 2006
  - Writing nanostructures using an AFM cantilever
  - 62-172 nm (figure)



[1] Lv, G., Tian, H., Shao, J., Yu, D., "Pattern formation in thin polymeric films via electrohydrodynamic patterning," RSC Adv. doi:10.1039/d2ra01109c (2022)

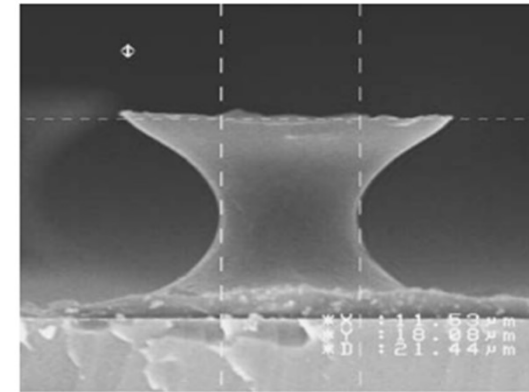
[2] Verma, R., Sharma, A., Kargupta, K., Bhaumik, J., "Electric field induced instability and pattern formation in thin liquid films," Langmuir; 21(8), 3710–3721. doi:10.1021/la0472100 (2005)

[3] Jegadesan, S., Sindhu, S., Valiyaveetil, S., "Easy writing of nanopatterns on a polymer film using electrostatic nanolithography," Small; 2(4), 481–484. doi:10.1002/sml.200500370 (2006)



# Electrohydrodynamic patterning (Deformation of Structures)

- Dickey et al online 2007, published 2008
  - First use of the term
  - High-aspect ratio structures using a plate electrode and stretching the pattern



**Fig. 7** Side-view SEM of a high-aspect ratio pillar formed by stretching using the active gap tool

[1] Dickey, M. D., Raines, A., Collister, E., Bonnecaze, R. T., Sreenivasan, S., Willson, C. G., "High-aspect ratio polymeric pillar arrays formed via electrohydrodynamic patterning," *J. Mater. Sci.*; 43(1), 117–122. doi:10.1007/s10853-007-2086-8 (2008)

- Ding et al 2007
  - Nanoparticles were bonded on the surface via Wan-der-Waals forces
  - 8nm ZnO particles on SiO<sub>x</sub> surface (figure)
  - Parameters: Velocity, Humidity
- Reagan et al 2008
  - Shape nanostructures based on PMMA and PS by the AFM cantilever
  - Humidity has an great impact onto the electrical field
- Nanoxerography more in eNIL

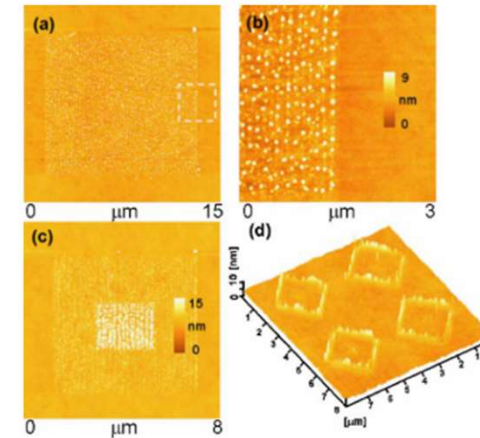


FIG. 2. (Color online) Two- and three-dimensional topographic AFM images of the patterned ZnO nanoparticles by AFM at 30% RH. (B) Magnification of the marked area in (A). The translation rates were 50  $\mu\text{m/s}$  in pattern A and 30  $\mu\text{m/s}$  in patterns C and D.

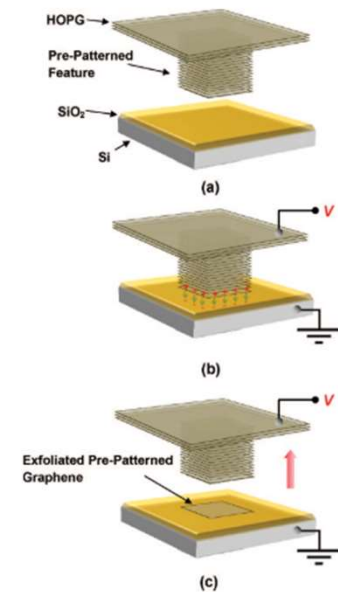
[1] Ding, L., et al., "High speed atomic force microscope lithography driven by electrostatic interaction," *Appl. Phys. Lett.*; 91(2), 23121. doi:10.1063/1.2756138 (2007)

[2] Reagan, M. A., Kashyn, D., Juhl, S., Vaia, R. A., Lyuksyutov, S. F., "Electric charging and nanostructure formation in polymeric films using combined amplitude-modulated atomic force microscopy-assisted electrostatic nanolithography and electric force microscopy," *Appl. Phys. Lett.*; 93(3), 33109. doi:10.1063/1.2957985 (2008)

- Liang et al 2008
  - Electrostatic force-assisted exfoliation of prepatterned graphene (EFEG) on SiO<sub>2</sub> surface
  - Nanostructures like  $\mu$ CP
- Wang et al 2011
  - Deposition of graphene ribbons
  - Large scale 150 mm

[1] Liang, X., et al., "Electrostatic force assisted exfoliation of prepatterned few-layer graphenes into device sites," *Nano Lett.*; 9(1), 467–472. doi:10.1021/nl803512z (2009)

[2] Wang, C., Morton, K. J., Fu, Z., Li, W.-D., Chou, S. Y., "Printing of sub-20 nm wide graphene ribbon arrays using nanoimprinted graphite stamps and electrostatic force assisted bonding," *Nanotechnology*. doi:10.1088/0957-4484/22/44/445301 (2011)



**Figure 1.** Schematic flowchart of electrostatic force assisted exfoliation of prepatterned few-layer graphenes (EFEG), which includes (a) initial setup with a HOPG template bearing prepatterned relief features, (b) application of a voltage between the HOPG template and the Si substrate after they are brought into contact, and (c) exfoliation of prepatterned few-layer graphenes by electrostatic force as the HOPG template is separated from the substrate. In EFEG, due to the thin screening depth in graphite ( $<0.5$  nm), only several outermost graphene monolayers are dragged by the electrostatic force, preferably leading to a thin exfoliation thickness of FLGs.



# Effect of an external electric field on the shape of a dielectric sessile drop

- Di Marco et al 2013
  - Insulating fluids: dielectrophoretic and electrostrictive forces
  - Dielectric polar fluid, relative electric permittivity i.e. ethanol: investigation of dielectrophoretic and electrostrictive forces and exclude free charge migration from the system
  - Volumic electric force that acts on a fluid

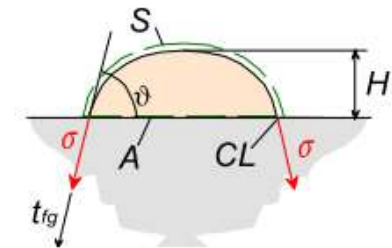
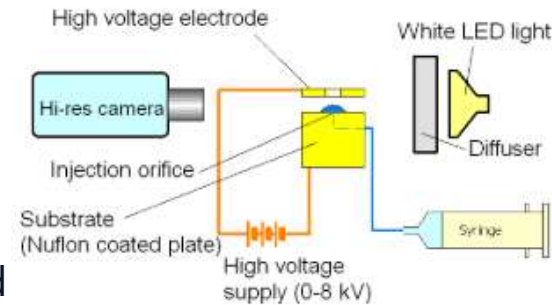


Figure 1 Schematics of the considered drop

$$\mathbf{f}'''_e = \rho_{FC} \mathbf{E} - \frac{\epsilon_0 E^2}{2} \text{grad} \epsilon_R + \frac{1}{2} \epsilon_0 \text{grad} \left[ \rho \left( \frac{\partial \epsilon_R}{\partial \rho} \right)_T E^2 \right] \quad (1)$$

Coulomb's force  
- Free charges

Dielectrophoresis  
- force exerted in a non-homogenous dielectric liquid by an electric field,

Electrostriction

- Deformation of a dielectric medium as a function of an applied electric field.
- Deformation is independent of the direction of the applied field and proportional to the square of the field.

- Tian et al 2011 (Numerical studies)

$$\vec{F}_{ef} = \nabla \cdot \tau^E = q \vec{E} - \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 \nabla \epsilon + \nabla \left( \frac{1}{2} E^2 (\rho \partial \epsilon / \partial \rho) \right) \quad (3)$$

When an interface is present within the fluid, it is convenient to reformulate the volumic force as the divergence of a stress tensor

$$\mathbf{f}'''_e = \text{div} \underline{\mathbf{T}}_e \quad (2)$$

where  $\underline{\mathbf{T}}_e$  is the Maxwell stress tensor, and its components are [10]

# Dielectrophoresis Vs. Electrostriction

Coulum forces	Dielectrophoresis DEP force	Electrostriction force
$\rho_{FC} \mathbf{E}$	$\frac{\epsilon_0 E^2}{2} \text{grad} \epsilon_R$	$+\frac{1}{2} \epsilon_0 \text{grad} \left[ \rho \left( \frac{\partial \epsilon_R}{\partial \rho} \right)_T E^2 \right]$
<p>Die <b>Coulomb-Kraft</b> ist die fundamentale elektrostatische Kraft zwischen zwei geladenen Teilchen. Sie ist proportional zum Produkt der Ladungen und nimmt mit dem Quadrat des Abstands ab.</p>	<p>Die <b>dielectrophoretische Kraft</b> tritt auf, wenn ungeladene Teilchen in einem <b>inhomogenen elektrischen Feld</b> bewegt werden. Die Richtung der <b>Bewegung</b> hängt von der relativen Polarisierbarkeit des Teilchens im Vergleich zum Medium ab.</p>	<p>Electrostriction ist eine nichtlineare, feldabhängige mechanische Reaktion eines Dielektrikums auf ein elektrisches Feld. Sie spielt eine Rolle in vielen technologischen Anwendungen und unterscheidet sich von anderen elektrischen Kraftphänomenen wie der dielektrischen Polarisationskraft oder der elektrostatischen Anziehung.</p>

# Numerical simulation of deformation of a droplet in a stationary electric field

- Emyam et al 2014
  - Dissertation
  - Case: Waterdrops on high voltage insulators (-> deformation of the drops due to the strong electrical field)
  - Basics
    - References: Supeene 2008: Deformation of a droplet; Ko 2000: A fully non-linear theory of electro-magneto-hydrodynamics
  - P. 23 Basic models
  - Polarization- apply e field
    - accompanied by deformation and exchange of heat (not generally negligible)
    - fluid dielectric is sensitive to temperature
    - If free charges (electrons, ions) → conductive property
    - No free charges ("perfect dielectric")
    - applied electric field on the bound and/or free charges results in mechanical forces
      - forces (per unit volume), Kelvin body force and are instances of the body force  $f_{\Omega}$  in the Navier-Stokes equations (2.13).
      - Navier-Stokes equations for a polarized fluid, the pressure  $p$  also depends on the polarization  $p(p, T, P)$  (Bobbio 2000)

## Materials: dielectric and conductive

Dielectric >> conductive

Dielectric, conductive

Perfect dielectric

Leaky dielectrics

free current density  $J_f$  and the free charge volume density  $\rho_f$  are zero. stationary limit, equations (2.9a) and (2.9b) reduce to  $\nabla \cdot (\epsilon E) = 0$ .

assumptions of this model, see (Saville 1997) and (Supeene et al. 2008), the free charge volume density electro-quasistatics equations (2.9a) and (2.9b) reduce to  $\nabla \cdot J_f = 0$ . free current density  $J_f$  is considered as  $J_c = \sigma E$

$$\mathbf{f}_{\Omega}^K = \rho_f \mathbf{E} + \mathbf{P} \cdot \nabla \mathbf{E}$$

$$p = p_0 + \frac{1}{2} \mathbf{P} \cdot \mathbf{E} - \frac{1}{2} |\mathbf{E}|^2 \rho \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho}$$

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \Phi) = 0$$

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla \Phi) = 0$$

Figure 2.1: The Polarization process



- Emamy et al 2014

- Body force  $f$  (per unit volume) (2.16)
- pressure  $p_0$  appears in our formulations: use the body force instead of the Kelvin body force and from now on, by using  $p$  we mean  $p_0$ , the pressure in the absence of the electric field.
- linear dielectric material, for which  $D = \epsilon(\rho, T)E$ , the above body force simplifies to the Kortweg-Helmholtz body force (see (Bobbio 2000) and (Dulikravich & Lynn 1997)) (2.17)
- Kortweg-Helmholtz body force
  - electrophoretic or the Coulomb force acting on the free charges in an electric field
  - Dielectrophoretic dielectrophoretic or pondermotive force is present where there are high gradients of the permittivity. This is the case in high temperature gradient flows, multi-constituent flows, particulate flows or any time the electric field must pass through contacting media with different permittivities (Dulikravich & Lynn 1997)
  - electrostriction force, accounts for the deformations because of the polarization process. This term is usually smaller than the electrophoretic and dielectrophoretic forces but is present in flows with non-uniform electric field, high pressure gradient or compressible flows.

$$\mathbf{f}_\Omega = \rho_f \mathbf{E} + \mathbf{P} \cdot \nabla \mathbf{E} - \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{P} \cdot \mathbf{E}) + \frac{1}{2} \nabla \left( |\mathbf{E}|^2 \rho \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right) \quad (2.16)$$

$$\mathbf{f}_\Omega^H = \rho_f \mathbf{E} - \frac{1}{2} |\mathbf{E}|^2 \nabla \epsilon + \frac{1}{2} \nabla \left[ |\mathbf{E}|^2 \rho \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right] \quad (2.17)$$

$$\mathbf{T}^M = \epsilon \mathbf{E} \mathbf{E} - \frac{1}{2} \epsilon |\mathbf{E}|^2 \left[ 1 - \frac{\rho}{\epsilon} \left( \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right) \right] \mathbf{I}, \quad (2.18)$$

$$\mathbf{f}_\Omega^H = \nabla \cdot \mathbf{T}^M = \underbrace{\rho_f \mathbf{E}}_1 - \underbrace{\frac{1}{2} |\mathbf{E}|^2 \nabla \epsilon}_2 + \underbrace{\frac{1}{2} \nabla \left[ |\mathbf{E}|^2 \rho \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right]}_3 \quad (2.19)$$

- Kortweg-Helmholtz body force can also be written as the divergence of Maxwell stress tensor (for linear dielectric materials)

- Emamy et al 2014
  - basically two approaches for the numerical modeling of multiphase problems, which are the one-fluid and two-fluid
- Two-fluid approach
- One-fluid approach
  - whole domain and the interface is represented implicitly as the zero iso-surface of a level set function  $\varphi$ .
  - no boundary conditions need to be satisfied at the interface
  - material properties are defined in the whole domain using a Heaviside function of the level set

# Deformation of a droplet in an electric field: Nonlinear transient response in perfect and leaky dielectric media

## • Supeene et al 2008

- numerical investigation of the deformation of a liquid **droplet in another immiscible liquid** under an applied electric field.
- The behavior of both perfect dielectrics and leaky-dielectric systems is analyzed. The simulations investigate the influence of fluid, interface and electrical properties on the dynamic droplet deformation
- build-up of free charges at the interface and convection due to electrohydrodynamic circulation.
- compares numerical simulations with analytical solutions and experimental data to explain deviations from linear perturbation theory and to validate the predictive power even for large deformations

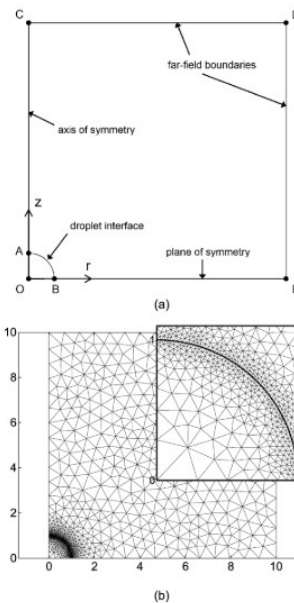
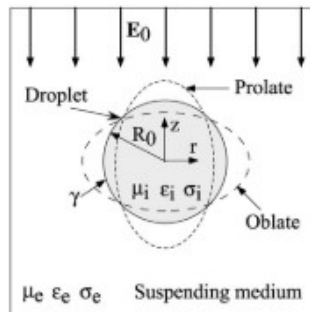


Fig. 2. (a) Two-dimensional axisymmetric geometry for the numerical solution. (b) Typical meshed geometry. Dimensions are scaled with respect to the drop radius. The inset shows the details of the mesh near the droplet boundary.

- how is the derivation carried out? What important assumptions are made?
  - Governing equations: The Navier-Stokes equations (including electrical body force), Poisson equations and Nernst-Planck equations form the basis of the modeling. These describe the fluid flow and the ion transport mechanisms in the two phases (droplet and environment).
  - Interface conditions: The dynamic equations consider continuous variables such as electric potentials and flow velocities at the interface, while ionic concentrations and pressures there are discontinuous. The stress balance at the interface integrates viscous, electrical and interfacial tension forces.
  - Simplified models: For perfect dielectrics the Laplace equation is used, while for leaky dielectric systems an equation for the charge distribution at the interface is added.
  - Numerical implementation: The method is based on the finite element method with a moving boundary representation. Scaling variables are defined to generalize the results. Dynamic boundary conditions model the time-dependent charge convection and relaxation on the interface.
  - Comparison with analytical solutions: The simulation results are compared with the well-known models of O'Konski, Taylor and Melcher to investigate their range of validity for small and large electric fields

# Deformation of a droplet in an electric field: Nonlinear transient response in perfect and leaky dielectric media

- Supeene et al 2008

- Aufbau der FEM-Simulation:

- 1. Geometrie und Koordinatensystem: Achsenymmetrische Geometrie: Die Simulation nutzt ein zylindrisches Koordinatensystem, da der Tropfen aufgrund des elektrischen Feldes symmetrisch entlang der z-Achse deformiert wird. Diese Vereinfachung reduziert den Rechenaufwand, da nur ein Quadrant des Tropfens modelliert werden muss. Reduktion der Domäne: Symmetrieanahmen (Spiegelung im Äquatorialbereich) wurden verwendet, um die Simulation effizienter zu gestalten.
- 2. Diskretisierung und Meshing: Unstrukturierte Dreieckselemente: Ein Delaunay-Triangulationsalgorithmus erzeugte ein feines Netz mit erhöhter Auflösung an der Grenzfläche, da hier hohe Gradienten von elektrischen und mechanischen Variablen erwartet werden. Elementtypen: Quadratische Lagrange-Elemente wurden für alle Variablen außer dem Druck verwendet, der mit linearen Elementen modelliert wurde. Verfeinerung der Grenzfläche: Die Grenzfläche wurde mit etwa 33 Knoten ( $H_{max} = 0.05$ , Abstand der Knoten) modelliert. Tests zeigten, dass eine höhere Auflösung (54 Knoten,  $H_{max} = 0.03$ ) nur minimalen Einfluss auf die Ergebnisse hat, aber den Rechenaufwand erhöht.
- 3. Randbedingungen: Hydrodynamische Randbedingungen: Symmetrie am Tropfenäquator. Ruhebedingungen (keine Strömung) an den äußeren Grenzen der Domäne. Elektrostatische Randbedingungen: Kontinuität des elektrischen Potentials und der Verschiebungsdichte an der Tropfenoberfläche. Gleichmäßiges äußeres Feld ( $E_{\theta} = 0$ ) weit weg vom Tropfen.
- 4. Zeitschritt und Stabilität: Zeitskalierung: Zeit wurde durch die charakteristische Relaxationszeit des Tropfens skaliert ( $\tau = (2\rho e + 3\rho i) R^3 / (24\gamma)$ ), um die Dynamik zu normalisieren. Zeitschrittgröße: Werte wie 0.06 (in radian) wurden verwendet, um stabile Lösungen zu erhalten. Zu große Schritte führten zu instabilen Simulationen

- Tricks

- 1. Bewegliches Netz (Moving Mesh): Lagrangische Methode: Die Knoten des Netzes bewegen sich mit der lokalen Geschwindigkeit des Fluids, was die Nachverfolgung der Tropfendeformation ermöglicht. Quadratische Zeitintegration wurde genutzt, um die Genauigkeit der Knotenbewegung zu erhöhen. Netzqualität: Nach jedem Zeitschritt wurde die Verzerrung des Netzes geprüft, und bei Bedarf ein Remeshing durchgeführt, um numerische Fehler zu vermeiden.
- 2. Numerische Stabilisierung: Adaptive Zeitschritte: Kleinere Zeitschritte wurden zu Beginn verwendet, um Artefakte zu eliminieren und eine konsistente Initialisierung für die Navier-Stokes-Löser (DASPK) zu gewährleisten. Interpolationsmethoden: Ergebnisse des vorherigen Schritts wurden auf das aktualisierte Netz interpoliert, um Spurious Convection zu vermeiden.
- 3. Skalierung und Dimensionierung: Druck, Geschwindigkeit und elektrische Felder: Diese wurden durch charakteristische Größen skaliert (z. B. Maxwell-Stress für Druck), um die Ergebnisse allgemein anwendbar und dimensionslos zu machen.
- 4. Effizienzsteigerung: Multistage-Lösung: Die elektrostatischen und fluidmechanischen Probleme wurden separat gelöst, wobei die elektrostatischen Kräfte als Randbedingungen in das Fluidproblem integriert wurden. Iterative Solver: Optimierte Algorithmen (z. B. DASPK) wurden für nichtlineare und zeitabhängige Probleme eingesetzt.

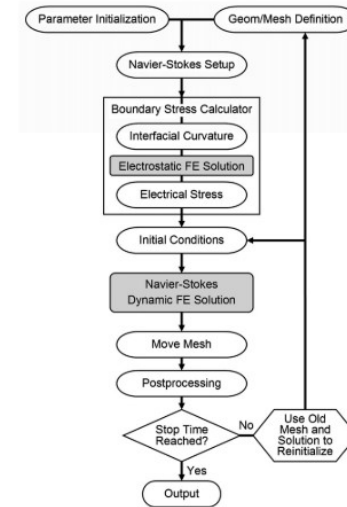


Fig. 3. Flowchart showing the structure of the dynamic finite element solution.

## Wesentliche Erkenntnisse und Tricks:

- **Grenzflächenverfeinerung ist entscheidend:** Eine ausreichende Knotendichte an der Tropfenoberfläche ist entscheidend, da die Maxwell-Stresses hier den größten Einfluss auf die Deformation haben.
- **Nichtlineare Kopplung:** Die Interaktion zwischen elektrischen und hydrodynamischen Kräften erfordert präzise numerische Implementierungen der Stressbedingungen.
- **Adaptive Ansätze:** Der Einsatz adaptiver Netze und Zeitschritte ist zentral, um sowohl Stabilität als auch Effizienz sicherzustellen.



# Three-dimensional modeling of dynamics of liquid dielectric droplets on a wettable surface in the electric field

- Kupershtokh, A. L et al 2020
  - the **three-dimensional modeling of the dynamic behavior of dielectric liquid droplets on a wettable surface under an applied electric field**
  - It is investigated how gravity, surface tension and electrical forces influence the drop shape.
  - Two possible behaviors are described:
    - The droplet reaches an equilibrium shape after initial oscillations.
    - The droplet extends indefinitely along the electric field until it is destroyed.
- The paper deals with:
  - The interaction between hydrodynamic, electric and capillary forces.
  - The use of dimensionless parameters such as the electric bond number ( $BoEBo E$ ) to characterize the droplet behaviour.
  - The numerical simulation of droplet dynamics using the Lattice-Boltzmann method (LBM).
  - The comparison of simulation results with experimental observations.

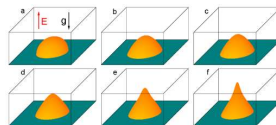


Figure 2. Evolution of droplet in an electric field.  $\epsilon = 400$  (a), 5000 (b), 10000 (c), 50000 (d), 60000 (e), 62000 (f).  $Bo = 100$ ,  $Bo = 23$ ,  $Bo = 1.0417$  ( $\theta = 48.5^\circ$ ),  $Bo = 133$ ,  $Bo = 146$ ,  $Bo = 0.17$ . Lattice 432x432x224.

## 2. Methodik und Herleitung:

## Simulation Vs math. Modell

### • Mathematische Modellierung:

- **Governing Equations:** Die Hydrodynamik des Tropfens wird durch die Lattice-Boltzmann-Gleichung (LBE) beschrieben. Diese berücksichtigt die Helmholtz-Kräfte, die durch das elektrische Feld wirken:

$$\mathbf{F} = \epsilon_0 \nabla \left( \frac{\mathbf{E}^2}{2} \right) - \frac{\mathbf{E}}{2} \nabla \epsilon,$$

- **Van-der-Waals-Kräfte:**

$$P = \frac{8T\rho}{3 - \rho} - 3\rho^2,$$

### • Numerische Methode:

- **Lattice-Boltzmann-Methode (LBM):** Die D3Q19-Variante der LBM wurde verwendet, um die nichtlinearen Strömungsphänomene zu simulieren. Diese Methode ermöglicht die einfache Integration von Helmholtz-Kräften und Grenzflächenbedingungen.
- **Grenzflächenmodellierung:** Die Wechselwirkungskräfte zwischen Flüssigkeit und Oberfläche wurden durch eine "Exact Difference Method" modelliert, die auch den Kontaktwinkel berücksichtigt

### • Simulationseinstellungen:

- **Initialzustand:** Ein halbkugelförmiger Tropfen wird auf einer benetzbaren Elektrode platziert.
- **Parametervariation:** Die elektrischen Bond-Zahlen ( $BoEBo\_EBoE$ ) und der Kontaktwinkel wurden variiert, um verschiedene Tropfendynamiken zu untersuchen.
- **Rechenressourcen:** Simulationen wurden mit zwei GPUs (Titan Xp) und CUDA für parallelisierte Berechnungen durchgeführt.

### • Herleitung der Tropfendynamik:

1. **Gleichgewichtszustand:** Bei niedrigen elektrischen Bond-Zahlen erreichen die Tropfen nach anfänglichen Schwingungen eine Gleichgewichtsform.

2. **Unbegrenzte Verlängerung:** Überschreitet Bon-Zahl einen kritischen Wert, beginnt der Tropfen sich entlang des Feldes zu strecken. Drei Phasen wurden identifiziert:

1. **Phase 1:** Näherung eines Gleichgewichts zwischen Gravitation, Oberflächenspannung und elektrischen Kräften.
2. **Phase 2:** Langsame Verlängerung entlang des elektrischen Feldes.
3. **Phase 3:** Unbegrenzte Verlängerung und Zerstörung durch Spitzenwachstum.

# Lattice Boltzmann modelling and study of droplet equatorial streaming in an electric field

- Wang et al 2024
- The aim of the paper is to **gain a better understanding of the phenomenon of droplet equatorial streaming. Two central influencing factors are investigated: the electric field strength ( $E_0$ ) and the conductivity contrast ( $1/R$ ).** The authors note that previous studies provide only limited information on the behavior of droplets with high conductivity contrast ( $1/R > 2000$ ). Similarly, the systematic study of electric field strength has not yet been comprehensively performed.
- To close this research gap:
  - A Lattice Boltzmann Model (LBM) was developed to simulate the dynamics of the droplet during equatorial streaming.
  - The influence of a strong electric field and different conductivity ratios was investigated in an extended parameter range.
  - The model was validated by comparison with analytical solutions, previous simulations and experiments, successfully reproducing the phenomenon of Coulomb emission from droplets.
  - The mechanisms of droplet fragmentation were analyzed and a phase diagram was constructed to predict the different decay mechanisms of equatorial streaming

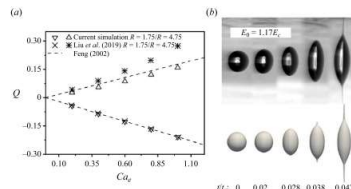


Figure 4. (a) Comparison of  $Q$  at steady state under different  $R$  and  $C^*U_0$  with theoretical solutions and previous simulations. (b) Comparison between current simulation results (bottom) and previous experiments (Gottum & Beauchamp 2005) (top) for the Rayleigh fission of a methanol droplet in a strong electric field.

Name der Gleichung	Kurzbeschreibung	Autoren, die sie verwendet haben
(2.5) Poisson-Gleichung für das elektrische Feld	Beschreibt die elektrostatische Potenzialverteilung	Luo et al. (2020)
(2.7) Ladungserhaltungsgleichung	Beschreibt die Konvektion und Relaxation der Oberflächenladung	Wagoner et al. (2021), Sengupta et al. (2017)
(4.2) Kräftegleichung für die Tropfendeformation	Modelliert das Gleichgewicht zwischen Kapillarkraft, Viskositätskraft und elektrischer Feldkraft	Brosseau & Vlahovska (2017)
(4.3) Nichtdimensionale Gleichung zur Tropfenevolution	Beschreibt die transiente Entwicklung der Tropfengeometrie in einem elektrischen Feld	Esmaeeli & Sharifi (2011), Mandal et al. (2014)
(4.6) Bedingung für das Auftreten von Fingering Breakup	Mathematische Bedingung für das Auftreten von Fingering-Streaming bei hohen elektrischen Feldstärken	Brosseau & Vlahovska (2017)
(3.1) Vereinfachte Gleichung für die Ladungsrelaxation	Analytische Lösung für die Relaxation der Ladungsdichte	Collins et al. (2008, 2013)
(3.2) Analytische Lösung für die Ladungsdichte	Berechnet die exponentielle Relaxation der Oberflächenladung	Feng (2002)

- Erfolgreiche Simulation des equatorial streaming:** Das entwickelte Lattice-Boltzmann-Modell konnte die gesamte Prozesskette des equatorial streaming reproduzieren, einschließlich der kontinuierlichen Abspaltung von Flüssigkeitsringen, deren Fragmentierung und der Bildung von Satellitentropfen.
- Einfluss von Feldstärke und Leitfähigkeit:** Simulationen im erweiterten Parameterbereich zeigten, dass bei hoher elektrischer Feldstärke und starkem Leitfähigkeitskontrast ein neues Phänomen auftritt, das als Fingering equatorial streaming bezeichnet wird.
- Dynamik der Tropfenevolution:** Die Simulationen zeigten, dass die Tropfendeformation stark durch das Verhältnis von Kapillarkraft, elektrischer Feldkraft und Viskosität beeinflusst wird. Die vorgeschlagenen mathematischen Modelle zur Tropfenverformung stimmen gut mit den Simulationsergebnissen überein.
- Zerfallsmechanismen und Phasendiagramm:** Durch eine detaillierte Analyse wurden die Bedingungen für die verschiedenen Zerfallsmechanismen ermittelt. Ein phasendiagramm wurde erstellt, das als Leitfaden zur Steuerung dieser Mechanismen dienen kann.

# Gravity-capillary waves on the free surface of a liquid dielectric in a tangential electric field

- Shapiro et al 2003b
  - investigates the equilibrium behavior of sessile liquid droplets on solid surfaces under the influence of surface tension, external fields (e.g. electric and gravitational fields) and material properties (e.g. dielectric constants and electrical conductivities).
  - It develops an energetic minimization method to predict the drop shape and quantify the relevant physical effects.
  - Special focus areas are:
    - Electrowetting-on-Dielectric (EWOD): How does an applied voltage influence the contact angle change?
    - Line term (1/R dependence): When do such terms occur, and how do they influence the drop shape?
    - Saturation of the contact angle: Why does the contact angle stop changing with increasing voltage?

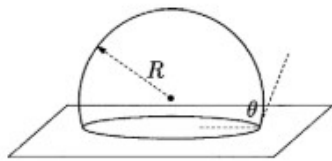


FIG. 1. Spherical drop geometry is parametrized by radius  $R$  and (apparent) contact angle  $\theta$ .

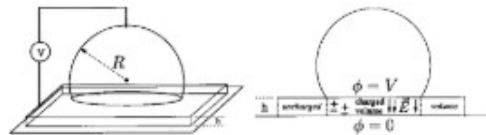


FIG. 2. Left: Conducting drop atop an insulating dielectric layer of thickness  $h$ . The voltage  $V$  is applied between the bottom-most flat conducting electrode and the electrode inserted into the top of the drop. Right: Schematic showing resulting dipole moments  $\pm$  in the dielectric immediately under the liquid/solid contact area; here the electric field  $\mathbf{E} = -(0,0,V/h)$  points down as shown by the arrows. The electric field is zero everywhere else.

## 2. Methodik und Herleitung:

### • Mathematische Modellierung

Die Autoren setzen eine **Energie-Minimierungsstrategie** ein, um die Tropfenform aus einer energetischen Perspektive zu bestimmen. Der Gesamtenergie-Ansatz umfasst:

1. **Oberflächenenergien** (+ls, +lg, +gs)
2. **Gravitationsenergie**
3. **Elektrostatistische Energie** (Kapazitive Ladung im Tropfen und im Substrat)

Sie leiten eine **modifizierte Young-Gleichung** her, die verschiedene Effekte berücksichtigt. Die mathematische Formulierung der Energie-Mindestbedingung führt auf folgende Gleichung:

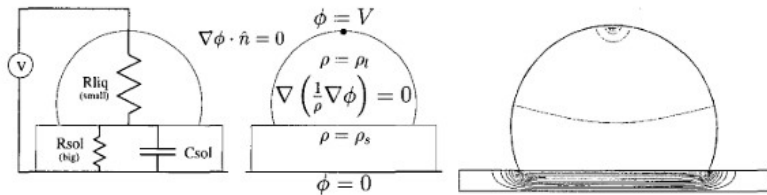
$$\cos(\theta) = \frac{\gamma_{gs} - \gamma_{ls}}{\gamma_{lg}} + \frac{1}{R} f(V, \epsilon, h)$$

### • Ergebnisse

- Ein leitfähiger Tropfen auf einem isolierenden Substrat führt exakt zur Young-Lippmann-Gleichung.
- Ein dielektrischer Tropfen auf einem leitfähigen Substrat zeigt **Linienterm-Effekte** (1/R-Abhängigkeit).
- Widerstände in der Flüssigkeit erklären die **Kontaktwinkelsättigung**, da die gespeicherte elektrische Energie im Festkörper durch die begrenzte Leitfähigkeit des Tropfens beeinflusst wird.
- Die Autoren verwenden sowohl **analytische Skalierungsanalysen** als auch **numerische Lösungen der Maxwell-Gleichungen**, um die elektrostatischen Energien für verschiedene Szenarien zu berechnen.

# Modeling of electrowetted surface tension for addressable microfluidic systems: dominant physical effects, material dependences, and limiting phenomena

- Shapiro et al 2003
  - modeling of **electrowetting-induced surface tension** for addressable microfluidic systems. It investigates the dominant physical effects, material dependencies and limiting phenomena.
  - The aim is to provide a precise theoretical description of the equilibrium shape of a liquid droplet under the influence of external fields (e.g. **electric fields and gravitation**). Various **material properties such as dielectric constants, resistances and surface tension coefficients are taken into account**. The authors show that a conductive liquid on a dielectric solid exactly reproduces the Young-Lippmann equation, while a slightly resistive drop explains contact angle saturation effects.



## 2. Methodik und Herleitung:

### Mathematische Modellierung

Das Paper basiert auf einem **Energie-Minimierungsansatz** sowie Lösungen von **Maxwells Gleichungen**, um die elektrostatischen Effekte zu beschreiben. Es wird eine exakte Ableitung einer modifizierten Young-Gleichung durchgeführt, die sowohl die elektrische als auch die mechanische Balance berücksichtigt. Wesentliche Formeln sind:

#### 1. Energie-Minimierung:

$$dE(R, \theta; p) = 0$$

mit  $R$  als Tropfenradius,  $\theta$  als Kontaktwinkel und  $p$  als Systemparameter.

#### 2. Modifizierte Young-Gleichung:

$$\gamma_L \cos \theta - (\gamma_{LS} - \gamma_{SG}) = 0$$

Diese Gleichung wird durch zusätzliche Terme erweitert, wenn elektrische Felder oder Materialeigenschaften wie dielektrische und kapazitive Effekte berücksichtigt werden.

#### 3. Kapazitive Energie eines perfekten Leiters auf einem dielektrischen Substrat:

$$E_{cap} = \frac{1}{2} \epsilon_0 \frac{V^2}{h}$$

Hierbei ist  $\epsilon_0$  die Permittivität des Vakuums,  $V$  die angelegte Spannung und  $h$  die Dicke der dielektrischen Schicht.

#### 4. Kontaktwinkelsättigung durch Flüssigkeitswiderstand:

$$U = \frac{\epsilon_0 V^2}{h \gamma_{LG}}$$

wobei  $U$  die dimensionslose Elektrowetting-Zahl ist.

### Ergebnisse

- Das Paper zeigt zudem experimentelle Daten, die die theoretischen Vorhersagen unterstützen und bestätigt, dass die Kontaktwinkelsättigung maßgeblich durch den elektrischen Widerstand der Flüssigkeit beeinflusst wird.



# Electrohydrodynamic pressure enhanced by free space charge for electrically induced structure formation with high aspect ratio

- Tian et al 2014b
  - electrically induced structure formation (EISF) in polymer films by electrohydrodynamic (EHD) forces. So far, mainly perfect dielectric polymers with low electrical conductivity, which are only deformed by the Maxwell voltage due to bound charges, have been investigated. However, these only led to structures with a low aspect ratio.
  - The aim of the work is to **increase the aspect ratio of the generated structures by converting a perfect dielectric polymer into a leaky dielectric polymer by doping with organic salt**. This leads to additional free space charges, which increase the electrohydrodynamic forces and thus enable a higher deformation.

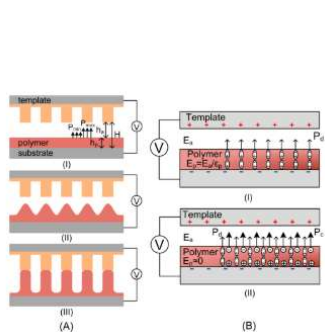
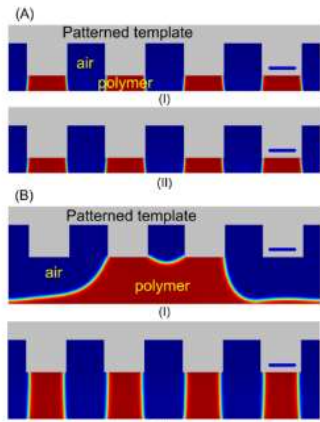


Figure 1. (A) Sketch of EISF spatially modulated by a structured template with a maximum EHD pressure  $P_{max}$  below the protrusive undersides of the template and a minimum  $P_{min}$  below the template cavities. (B) Components of the driving pressure induced electrically in a perfect dielectric polymer (I) and in a leaky dielectric polymer (II).



perfect dielectric polymer (I) and a leaky dielectric polymer (II)

## 2. Methodik und Herleitung:

### Mathematische Modellierung

### Simulation:

- Vergleich zwischen perfekten und leaky dielectric Polymeren:** Es wurde eine Leitfähigkeit von  $1.34 \times 10^{-5} \text{ S/m}$  für das dotierte Polymer gewählt, vergleichbar mit entionisiertem Wasser.
  - Initiale Luftspalte:** Experimente mit verschiedenen Luftspalten ( $6 \mu\text{m}$ ,  $20 \mu\text{m}$ ,  $39 \mu\text{m}$ ) zeigten, dass das leaky dielectric Polymer Strukturen mit höherem Aspektverhältnis erzeugt.
  - Positive Rückkopplung:** Höhere Polymerhöhen erzeugen eine verstärkte elektrische Feldintensität, welche das Wachstum weiter beschleunigt.
  - Oberflächenspannungseffekte:** Die Form der Strukturen ist nicht perfekt gerade, sondern eher katenoïdförmig aufgrund der Minimierung der Oberflächenenergie.
  - Optimierung durch elektrische Felder:** Es wurde gezeigt, dass ein zu hoher Luftspalt trotz hoher Spannung die Strukturierung behindern kann, da der effektive Druck nicht ausreicht, um die viskose Kraft und die Oberflächenspannung zu überwinden.
- Ergebnisse:**
- Höheres Aspektverhältnis durch freie Raumladungen: Das leaky dielectric Polymer kann Strukturen mit einem signifikant höheren Aspektverhältnis erzeugen als ein perfektes dielektrisches Polymer. Dies ist auf den **zusätzlichen Coulomb-Druck** und die **verstärkte elektrische Feldintensität durch Abschirmeffekte** zurückzuführen.
  - Experimentelle und numerische Bestätigung: Numerische Simulationen und Experimente zeigen, dass ein leaky dielectric Polymer mit einer Leitfähigkeit vergleichbar zu entionisiertem Wasser eine effektivere Strukturformung ermöglicht. Die Strukturen wachsen schneller und stabiler, wobei das Polymer besser an das Vorlagenmuster angepasst wird.
  - Optimierung durch elektrische Felder: Die elektrohydrodynamische Druckverteilung spielt eine entscheidende Rolle für die endgültige Form der Strukturen. Durch geschicktes **Variieren der Luftspalte und der angelegten Spannung kann das Wachstum gezielt gesteuert werden**.

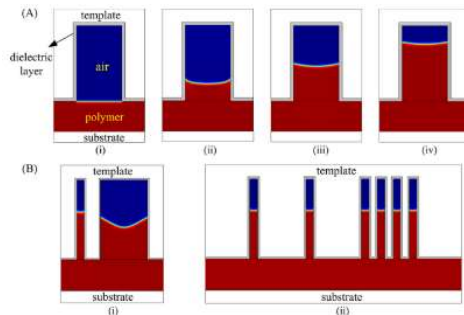
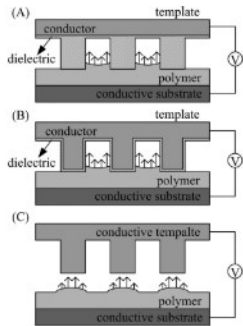
Die Autoren führen eine theoretische und numerische Analyse durch, die die Rolle freier Ladungen in der elektrohydrodynamischen Strukturbildung untersucht. Die zugrunde liegenden Gleichungen umfassen:

- Cahn-Hilliard-Gleichung** für die Massenerhaltung in einer Zweiphasen-Diffusion:
 
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi) = \nabla \cdot (G \nabla \phi)$$
 wobei  $\phi$  die Phasenfeldfunktion und  $G$  das chemische Potential ist.
- Navier-Stokes-Gleichungen** für die Hydrodynamik:
 
$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}_e + \rho \mathbf{g}$$
 wobei  $\mathbf{f}_e$  die elektrohydrodynamische Kraft und  $\eta$  die Viskosität ist.
- Maxwell-Gleichungen** für das elektrische Feld:
 
$$\nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}) = \rho_e$$
 wobei  $\rho_e$  die Raumladungsdichte ist.
- Ladungstransportgleichung:**

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \rho_e) = -\nabla \cdot (\sigma \mathbf{E})$$
 Hier beschreibt  $\sigma$  die elektrische Leitfähigkeit.

# Numerical Characterization of Electrohydrodynamic Micro- or Nanopatterning Processes Based on a Phase-Field Formulation of Liquid Dielectrophoresis 2013b

- Tian et al 2011, 2013, 2014
  - General numerical description of electrohydrodynamic pattern formation processes (EHDP), including three different methods:
    - Electrostatic Force-Assisted Nanoimprint (EFAN)
    - Dielectrophoresis-Electrocapillary Force-Driven Imprint (DEP-ECF DI)
    - Electrically Induced Structure Formation (EISF)
  - Extension of the model to include surface tension, contact angle, liquid-solid interfacial friction and non-Newtonian viscosity.
  - Important difference: The paper considers not only EISF, but also other electrohydrodynamic structuring processes.
  - New features compared to Paper 2014: More general focus on different electrohydrodynamic processes, not only EISF. **Consideration of additional scale effects, e.g. surface tension and contact angle.**



## 3. Vergleich der Simulationen

### Paper 1 (Langmuir, 2014)

- Vergleich zwischen perfekten und leaky dielectric Polymeren bei verschiedenen Anfangsbedingungen (Luftspalt, Polymerhöhe).
- Simulation des EHD-Drucks auf der Polymeroberfläche.
- Berücksichtigung der freien Raumladungsmigration im leaky dielectric Polymer.
- Verwendung von FEM (COMSOL) zur numerischen Berechnung.

### Paper 2 (Langmuir, 2013)

- Simulation aller drei EHDP-Prozesse (EFAN, DEP-ECF DI, EISF).
- Berücksichtigung von Kontaktwinkeln, Flüssig-Fest-Grenzflächenreibung und nicht-newtonscher Viskosität.
- Detaillierte Analyse der elektrischen Feldverteilung und deren Einfluss auf die Strukturformung.
- Modellierung von Luftblasen in geschlossenen Kavitäten (Kompressibles Medium).

### Paper 3 (Electrophoresis, 2011)

- Simulation der vollständigen dynamischen Entwicklung von Polymerstrukturen, nicht nur die Anfangsphase.
- Verwendung einer flachen vs. gemusterten Vorlage zur Untersuchung unterschiedlicher Musterbildungsmechanismen.
- Simulation der Elektrokoaleszenz eines Wassertropfens in Silikonöl zur Validierung der Methode.
- Analyse der instabilsten Wellenlänge und deren Auswirkungen auf die Strukturperiode.

# Gravity-capillary waves on the free surface of a liquid dielectric in a tangential electric field

- Kochurin et al 2018

- The paper investigates the propagation and interaction of nonlinear gravity capillary waves on the free surface of a deep, non-conducting liquid dielectric under the influence of a tangential electric field.
- In particular, it is analyzed how a strong electric field affects the wave motion and which mechanisms lead to the generation of capillary turbulence.
- Numerical simulations are used to show that waves can move almost undisturbed along or against the direction of the field in strong electric fields. In addition, the interaction of opposing waves leads to the formation of singularities in the surface curvature, causing the system to exhibit chaotic behavior.

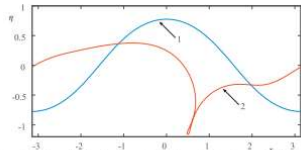


Figure 2. The calculated shape of the boundary is shown at the initial moment (blue curve "1") and at the end of calculation interval  $\eta T_0=0.76$  (red curve "2") for the parameters  $A=0.65, k_1=1, \beta=0$ .

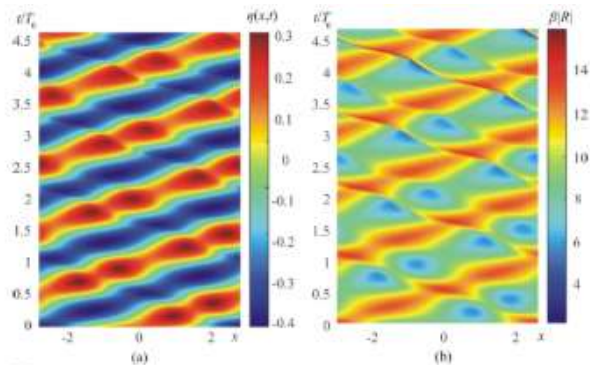


Figure 4. Evolution (a) of the free surface and (b) of the quantity  $\beta|R|_1$ .

## 2. Methodik und Herleitung:

- Mathematische Modellierung

Zur numerischen Simulation der nichtlinearen Oberflächenwellen wird eine zeitabhängige konforme Transformation verwendet, bei der der Bereich, den die Flüssigkeit einnimmt, in eine Halbebene transformiert wird. Die grundlegenden Gleichungen für das Problem sind:

1. Dispersionrelation für lineare Wellen:

$$\omega^2 = gk + \frac{\sigma}{\rho} k^3 + \frac{\varepsilon_0(\varepsilon - 1)E^2}{\rho} k$$

Diese beschreibt die Abhängigkeit der Frequenz  $\omega$  von der Wellenzahl  $k$ , der Schwerebeschleunigung  $g$ , der Oberflächenspannung  $\sigma$ , der Massendichte  $\rho$ , der Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon$  und dem externen elektrischen Feld  $E$ .

2. Gleichungen der Bewegung (Laplace-Gleichungen für das Geschwindigkeits- und das elektrische Potential):

$$\nabla^2 \phi = 0, \quad \nabla^2 \varphi = 0, \quad y < \eta(x, t)$$

mit den Randbedingungen an der Flüssigkeitsoberfläche.

3. Dynamische Randbedingung (nichtstationäre Bernoulli-Gleichung):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{2}(\nabla \phi)^2 + g\eta + \frac{\sigma}{\rho} K - \frac{\varepsilon_0(\varepsilon - 1)}{2\rho} (\nabla \varphi)^2 = 0$$

wobei  $K$  die Krümmung der Flüssigkeitsoberfläche ist.

4. Numerische Lösung mittels konformer Variablen: Durch die konforme Transformation  $z = x + iy \rightarrow w = u + iv$  kann die Bewegungsgleichung in die kompakte Form:

$$\frac{\partial V}{\partial t} + iUV_u - D(RR_w) = 0$$

überführt werden, was eine effizientere Berechnung erlaubt.

- Ergebnisse

- Im starken elektrischen Feld bewegen sich nichtlineare Wellen verzerrungsfrei entlang der Feldrichtung.
- Die Wechselwirkung entgegengesetzter Wellen führt zur Bildung von Singularitäten mit stark ansteigender Oberflächenkrümmung.
- Bei begrenztem elektrischen Feld kommt es zu einer massiven Kaskade von kleinen Kapillarwellen, die das System chaotisch werden lässt.



## A fully non-linear theory of electro-magneto-hydrodynamics

- Ko et al 2000

- fully nonlinear, consistent model for electro-magneto-hydrodynamics (EMHD)
- combines the effects of electric and magnetic fields in electrically conducting fluids that can be polarized and magnetized simultaneously. The aim is to create an analytical model for multidimensional, steady and unsteady, compressible and incompressible flows that takes both external and internal fields into account.
- overcomes the limitations of previous models by incorporating nonlinear effects and electromagnetic interactions and enabling a numerical solution.

- how is the derivation carried out? What important assumptions are made?
  - Fundamentals: The derivation is based on the general laws of continuum mechanics and thermodynamics, including Maxwell's equations and the balance laws (mass, momentum, energy). These are supplemented by material constitutive equations to fully describe the electromagnetic and thermomechanical fields.
  - Simplifications: A “second order approach” is used, where only terms up to second order in electromagnetic fields, deformation rates and temperature gradients are considered. Higher nonlinear terms are neglected, similar to Newtonian fluids.
- Assumptions:
  - The electromagnetic fields and material responses are relatively small.
  - For incompressible flows, the Boussinesq approximation is used (density variations are only considered in the gravitational force).
  - Electromagnetic effects such as electrophoresis and electrocontraction are assumed to be negligible for low velocities.



# Research of mixing dielectric liquids under the electric field influence

- Volkova et al 2016
  - investigate the mixing behavior of dielectric liquids under the influence of an electric field
  - **This is realized in a special device, a capacitive (or electrostatic) electromechanical energy transducer (CEMET).**
  - Both simulations and experiments are carried out in order to:
    - Analyze the movement of fluids under direct current (DC) and alternating current (AC, single-phase and three-phase) fields.
    - Determine the most effective type of electric field for mixing.
    - Measure the speed of the mixing process and the viscosity of the resulting mixture as a function of the applied voltage

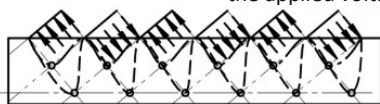


Fig. 2. The ripple effects in three-phase CEMET with liquid rotor.

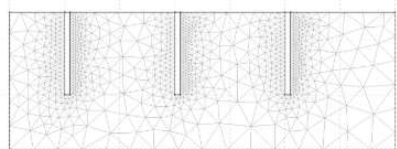


Fig. 6. A horizontal section of the three-phase CEMET field.

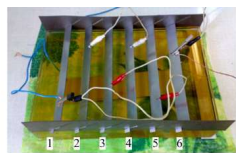


Fig. 8. CEMET with liquid rotor induction type (variant with submersible electrode).

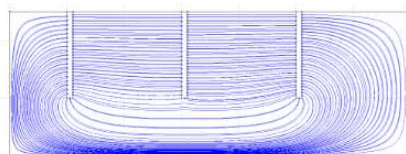


Fig. 7. The three-phase CEMET field at  $\varphi = \pi/2$ .

## 2. Methodik und Herleitung:

### • Mathematische Modellierung

- Dielektrische Flüssigkeiten entwickeln unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes ein **Dipolmoment, das die Flüssigkeitsbewegung** verursacht.
- Die Kräfte im System werden durch die **Helmholtz-Gleichung** beschrieben:  $\nabla \times (\epsilon \nabla D) = 0, \nabla \times (\epsilon \nabla D) = 0$ , wobei  $D$  die elektrische Verschiebungsdichte und  $\epsilon$  die Permittivität der Flüssigkeit ist.
- Für die **dreiphasige Wechselspannung (AC) wurde eine Formel für die Gesamtkraftwirkung** hergeleitet:  $F(t) = \epsilon_0 \epsilon A^2 (u_0^2 + u_{\max}^2 \cos(2\omega t))$ ,  $F(t) = 2 \epsilon_0 \epsilon A (u_0^2 + u_{\max}^2 \cos(2\omega t))$ , wobei  $A$  die Fläche der Elektroden,  $u_0$  die Anfangsspannung und  $u_{\max}$  die Maximalspannung ist.

### • Simulationseinstellungen:

- Die elektrische Feldverteilung wurde mit der Finite-Elemente-Methode (FEM) in BETAField V.1.4 berechnet.
- Die Feldstruktur in verschiedenen horizontalen und vertikalen Querschnitten wurde analysiert, um Strömungsmuster zu identifizieren.

### • Ergebnisse:

- DC-Feld: Der Flüssigkeitsfluss war nach oben gerichtet.
- Einphasige AC-Spannung: Bei 6 kV trat eine halbwellenförmige Bewegung der oberen Flüssigkeit auf. Bei 12 kV bildete sich eine stabile elektrische Doppelschicht mit 1,5 mm Dicke.
- Dreiphasige AC-Spannung: Turbulenter Fluss wurde erreicht, die Mischgeschwindigkeit stieg mit der Spannung an.
- Optimale Mischbedingungen: Bei 10 kV wurde das beste Mischverhalten beobachtet, während bei 12 kV Entladungen auftraten

## Research of Dielectric Breakdown Microfluidic Sampling Chip

- Jiang et al 2013
  - develop and investigate a microfluidic chip that utilizes dielectric breakdown to propel fluids through electroosmotic flow.
  - Unlike conventional microfluidic systems that require external or integrated electrodes, **this design replaces electrodes with conductive solutions in the microchannels**. The goal is to reduce production complexity, minimize operating current and increase safety.
- Production of the chips:
  - PDMS (polydimethylsiloxane) was chosen for its flexibility and ease of processing, Lithography process + UV NIL
- Operating principle: The channels were filled with conductive solution, which was electrically activated by applying a voltage between reservoirs at the ends of the channel.
- Dielectric breakdown occurred at the isolation barrier between channels, creating an electric field that allowed electroosmotic flow. The flow velocity was determined by monitoring the current flow in the channel.
- Experiments:
  - Pressure and velocity measurements: A microsyringe pump system was used to inject the liquid at controlled velocities. Pressure simulations showed that the operating pressure had to be adjusted to avoid leakage.
  - Electroosmotic flow test: A DC voltage was applied after injection and the measured currents in the microampere range indicated the electroosmotic flow.

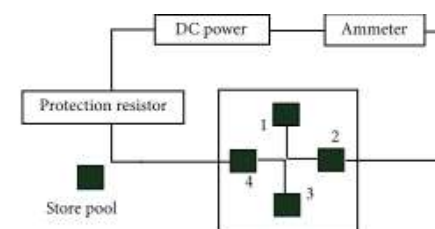


FIGURE 1: The structural and experimental principle chart of electroosmotic flow chip.



FIGURE 4: The silicon wafer's lithography graphics photo.

**Breakdown refers to the electroosmotic flow through a 10  $\mu\text{m}$  membrane (PDMS isolator)**

# Short axis contact in the chaining of ellipsoidal particles of polar molecule dominated electrorheological fluid

Bao et al 2010

- The paper investigates the **chain formation of ellipsoidal particles in a polar molecule-dominated electrorheological fluid (PM-ER)** under an applied electric field.
- understand how particles align along their short axis instead of the long axis **when ferromagnetic materials are embedded in the particle channels** parallel to the short axis.
- It deals with:
  - The theory of PM-ER fluids in which charged particles and polar molecules exhibit an enhanced electroresponse.
  - Simulations with COMSOL Multiphysics to analyze the electric field and the electrostatic energy distribution.
  - Experiments with submicrometer-sized mesoporous silica particles (SBA-15) doped with potassium dihydrogen phosphate ( $\text{KH}_2\text{PO}_4$ ).
  - The influence of particle shape (ellipsoidal vs. spherical) and orientation on the increase in yield stress of PM-ER fluids Translated with DeepL.com (free version).

**Material /particle characteristics in COMSOL**

**2. Methodik und Herleitung:**

**Mathematische Modellierung**

- Die PM-ER-Partikel bestehen aus einem **dielektrischen Kern** mit einer **Hülle aus polaren Molekülen**.

- Dielektrische Eigenschaften werden durch das **Clausius-Mossotti-Modell** beschrieben:

$$p_{\perp} = 4\pi ab^2 \epsilon_2 \frac{\epsilon_{\perp i} - \epsilon_2}{3(\epsilon_2 + (\epsilon_{\perp i} - \epsilon_2)g_{\perp})} E_{\perp 0}$$

$$p_{\parallel} = 4\pi ab^2 \epsilon_2 \frac{\epsilon_{\parallel i} - \epsilon_2}{3(\epsilon_2 + (\epsilon_{\parallel i} - \epsilon_2)g_{\parallel})} E_{\parallel 0}$$

wobei  $a$  und  $b$  die Halbachsen der Ellipsoide sind,  $\epsilon$  die Dielektrizitätskonstanten und  $g_{\perp}, g_{\parallel}$  Geometriefaktoren sind.

- Ein Verhältnis für den optimalen **Kurzachsen-Ketteneffekt** wurde durch das Maximum der Differenz  $\Delta p$  der Dipolmomente hergeleitet:

$$\Delta p = p_{\perp} - p_{\parallel} > 0.$$

- Die Simulation basiert auf der **Poisson-Gleichung** für das elektrische Potential:

$$-\nabla \cdot (\epsilon_0 \epsilon_r \nabla V) = \rho.$$

Das resultierende elektrische Feld ist:

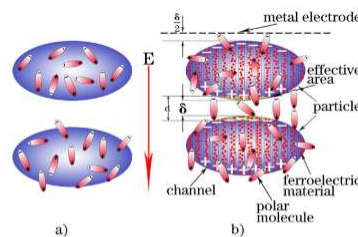
$$E = -\nabla V.$$

**Simulationseinstellungen:**

- Die Simulation berechnete das elektrische Feld zwischen Partikeln mit und ohne ferromagnetisches Dotiermaterial.
- Finite-Elemente-Methode (FEM) wurde genutzt, um die Feldverteilung und elektrostatische Energie zu bestimmen.
- Ergebnisse zeigen, dass die Einlagerung von  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  in die SBA-15-Kanäle zu einer höheren lokalen Feldstärke führt, die eine bevorzugte Kurzachsen-Ausrichtung begünstigt

**Ergebnisse:**

- Die Simulation zeigt, dass die Einlagerung von ferroelektrischen Materialien die Feldverteilung verändert und eine bevorzugte Kurzachsen-Ausrichtung induziert.
- Experimente mit modifizierten SBA-15-Partikeln bestätigten diesen Effekt, was zur Erhöhung der mechanischen Stabilität des elektroeologischen Fluids führte.
- Das Modell wurde durch FEM-Simulationen verifiziert und bietet eine Erklärung für die beobachteten Effekte in der Praxis.



**Figure 4.** (a) Polar molecules adopt a random distribution on the particle surface when the external electric field  $E = 0$ . (b) When  $E$  is sufficiently large, polar molecules are absorbed on the effective area between two adjacent particles become aligned along the field. The polar molecule length is  $d$ , and  $\delta$  is the separation between two particles.



# Enhancement of the dielectric response in polymer nanocomposites with low dielectric constant fillers

- Thakur et al 2017
  - **enhancement of the dielectric response in polymer nanocomposites by using low-dielectric fillers** instead of high-dielectric nanofillers.
  - The aim is to increase **the energy storage capacity of polymer-based capacitors without reducing the electrical breakdown strength.**
  - It deals with:
    - The preparation and characterization of polyetherimide (PEI) nanocomposites with different nanofillers (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO, SiO<sub>2</sub>, BaTiO<sub>3</sub>, BN).
    - The investigation of filler size and concentration on the dielectric constant.
    - A new mechanism hypothesis that interphase effects at the interface between polymer matrix and nanoparticles enhance the dielectric response. Simulations and modeling to confirm the experimental results.
  - **Materials:**
    - Polyetherimid (PEI) als Polymermatrix (T<sub>g</sub> ≈ 217 °C, K = 3.2).
    - Nanofüllstoffe mit geringer Dielektrizitätskonstante: Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (5 nm, 20 nm, 50 nm) MgO (20 nm) SiO<sub>2</sub> (20 nm) BaTiO<sub>3</sub> (50 nm) BN (70 nm)

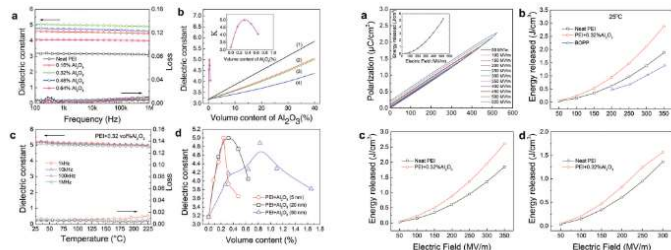


Fig. 1 (a) Room temperature dielectric properties of PEI/alumina (20 nm particle size) nanocomposites at different alumina nanoparticle loadings (in vol%) vs. frequency. (b) Dielectric constant (at 1 kHz) of nanocomposite films of PEI/alumina (20 nm particle size) vs. nanofiller volume content and comparison with several widely used dielectric models of diphasic dielectric composites (lines with no data points): curves: (1) parallel model, (2) Maxwell model, (3) Lichtenecker model, and (4) series model, see the ESI† for these models. Inset shows an expanded view of the dielectric constants of the composite films vs. alumina loading. Experimental data points are shown and lines are drawn to guide the eye. (c) Dielectric properties vs. temperature of the

Fig. 2 (a) Charge–discharge cycles of PEI/alumina (20 nm) nanocomposites with 0.32 vol% alumina under different electrical fields at 10 Hz and room temperature. Inset: discharged energy density deduced from the charge–discharge cycle data. (b–d) Discharged energy density of PEI/alumina (20 nm) nanocomposites with 0.32 vol% loading at different temperatures (room temperature, 100 °C, and 150 °C), and their comparison with that of neat PEI and BOPP (room temperature), measured under 350 MV m<sup>-1</sup> at 10 Hz. In (b–d), data points are shown and curves are drawn to guide the eye. Data for BOPP were collected from ref. 22.

## 2. Methodik und Herleitung:

### • Mathematische Modellierung

- Klassische Modelle für Komposit-Dielektrika (Maxwell, Lichtenecker, Parallelmodell) erklären nicht die beobachtete Steigerung der Dielektrizitätskonstante.
- Eine neue interphasige Modellierung wurde entwickelt: Die Grenzschicht zwischen Polymer und Füllstoff hat eine räumlich variierende lokale Dielektrizitätskonstante:

$$K_{\text{interface}}(r) = K_M + (K_2 - K_1)e^{-g}, \quad g = (r/r_0)^2$$

- $K_M$ : Dielektrizitätskonstante der Polymermatrix
- $K_1$ : Reduzierte Dielektrizitätskonstante in der inneren Grenzschicht
- $K_2$ : Erhöhte Dielektrizitätskonstante in der äußeren Grenzschicht
- $r_0$ : Charakteristische Breite der Grenzschicht
- Simulationen mit Phasenfeldmodellen zeigen: Die dielektrische Antwort ist am höchsten, wenn Nanopartikel in geringer Konzentration (~0.3 Vol%) vorhanden sind.
- Der Effekt ist auf eine Reduzierung der Dipol-Restriktionen in der Grenzschicht zurückzuführen

### • Ergebnisse:

- Die maximale Erhöhung der Dielektrizitätskonstante (>55%) tritt bei einer extrem niedrigen Nanopartikelkonzentration (0.3 Vol%) auf.
- Keine Hochdielektrizitäts-Füllstoffe notwendig → Vermeidung von lokaler Feldverstärkung und Durchbruchfestigkeitsverlust.
- Grenzflächen-Dipol-Wechselwirkungen sind entscheidend für dielektrische Verbesserungen.
- **Die Simulationen stimmen mit den experimentellen Messungen überein.**



# Modeling of Insulating Nanocomposites-Electric and Temperature Fields

- Venkatesulu et al 2013

- investigates the mechanisms behind the improved dielectric strength of nanocomposites, in particular their behavior under electric fields and temperature stress.
- The authors use simulations to analyze the electric field distributions, resistance losses and temperature curves within a nanocomposite.
- Nanocomposites consist of a **polymer matrix with embedded nanoparticles**. A central topic of the work is the so-called **“interaction zone” (IZ) around the nanoparticles, whose electrical conductivity and dielectric constant differ from those of the polymer matrix and the nanoparticles**. This can lead to **unexpected effects on dielectric strength**.
- The authors analyze different models of the interaction zone and evaluate their influence on electric field distribution, temperature rise and ultimately the dielectric strength of the material.
- COMSOL
  - Nanopartikel (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)
  - Primäre Interaktionszone (1st Core) – direkt um das Partikel, stark gebunden an die Polymermatrix.
  - Sekundäre Interaktionszone (2nd Core) – eine äußere Schicht mit variablen elektrischen Eigenschaften

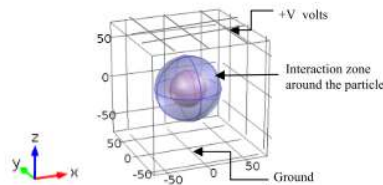


Figure 1. Unit cell (142 nm x142 nm x142 nm) model of a nanocomposite.

## 2. Methodik und Herleitung:

- Mathematische Modellierung

Untersucht werden verschiedene Modelle für die elektrische Leitfähigkeit und die dielektrische Konstante der Interaktionszone. Dabei werden sowohl lineare als auch nichtlineare Materialmodelle betrachtet.

Mathematische Formulierungen

- Elektrostatistische Feldverteilung wird durch die Laplace-Gleichung beschrieben:

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla \phi) = 0$$

wobei  $\phi$  das elektrische Potential und  $\sigma$  die elektrische Leitfähigkeit ist.

- Berechnung des elektrischen Feldes:

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi$$

- Dielektrische Relaxationszeit:

$$\tau_n = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r}{\sigma}$$

wobei  $\epsilon_0$  die Permittivität des Vakuums,  $\epsilon_r$  die relative Permittivität und  $\sigma$  die Leitfähigkeit ist.

- Temperaturverteilung durch Joulesche Erwärmung:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \sigma E^2$$

Hierbei sind  $k$  die Wärmeleitfähigkeit,  $\rho$  die Dichte,  $c_p$  die spezifische Wärmekapazität und  $T$  die Temperatur.

- Nichtlineare Leitfähigkeitsmodelle:

$$\sigma(E) = \sigma_0 e^{\alpha E^p}$$

mit den Konstanten  $\alpha$  und  $p$ , die das nichtlineare Verhalten beschreiben.

- Ergebnisse "The Mechanism of the Breakdown Strength: Hypotheses"

- Die Interaktionszone ist der entscheidende Faktor für die elektrische und thermische Stabilität von Nanokompositen. Die vielversprechendsten Hypothesen sind:
  - Hypothese 1: Niedrigere Leitfähigkeit der Interaktionszone (weniger Feldmaxima und Wärmeverluste).
  - Hypothese 3: Lineare Erhöhung der dielektrischen Konstante in der Interaktionszone (gleichmäßigere Feldverteilung).
  - Hypothese 2 ist nur unter der Bedingung einer verbesserten thermischen Stabilität der Interaktionszone realistisch.
- Die Ergebnisse betonen die Wichtigkeit der Grenzflächen zwischen Nanopartikeln und Polymermatrix für die Verbesserung der Durchschlagsfestigkeit.

# A generalized continuous surface tension force formulation for phase-field models for multi-component immiscible fluid flows

- Kim et al 2009
  - new phase-field method for modeling surface tension effects in systems with **multiple immiscible fluids**.
  - The challenge in modeling such systems lies in the correct description of the interaction forces at the phase boundaries, especially when **more than three liquid components are involved**.
  - The method is based on a continuous force formulation for the surface tension and can be extended to any number of liquid components without the need for additional decision criteria. The main goal is to develop a general mathematical description that is numerically efficient and provides physically correct results.
  - Key topics:
    - Modeling the surface tension with the phase-field approach
    - Extension for four or more components
    - Avoidance of overdetermined equation systems
    - Numerical simulations to verify the model

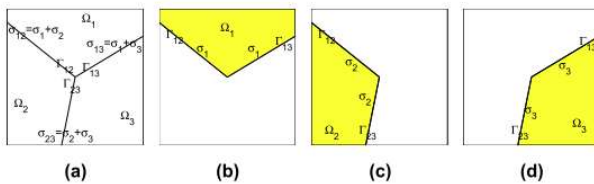


Fig. 1. Schematic of domain. (a)  $\sigma_{ij}$  denotes the surface tension coefficient of the interface  $\Gamma_{ij}$  of fluids  $\Omega_i$  and  $\Omega_j$ . (b) Phase specific surface tension coefficient,  $\sigma_i$ , on interfaces,  $\Gamma_{12}$  and  $\Gamma_{13}$ . (c) and (d) are similarly defined.

## 2. Methodik und Herleitung:

### • Mathematische Modellierung

**Governing Equations (Steuernde Gleichungen)**

Die Zusammensetzung der vier Flüssigkeiten (A, B, C, D) wird durch die Phasenvariablen  $c_i$  dargestellt, die durch die Cahn-Hilliard-Gleichung beschrieben werden:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c_i = M \Delta \mu_i, \quad i = 1, 2, 3, 4$$

wobei  $\mu_i$  das chemische Potential ist, das durch

$$\mu_i = \frac{\delta F}{\delta c_i} - \epsilon^2 \Delta c_i + \lambda(c)$$

gegeben ist. Die Navier-Stokes-Gleichung für inkompressible Fluide lautet:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\eta(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) + \mathbf{S}_F$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

Dabei ist  $\mathbf{S}_F$  die Oberflächenspannungskraft, die mit einer kontinuierlichen Kraftformulierung implementiert wird:

$$\mathbf{S}_F = \sum_{i < j} \frac{\sigma_{ij}}{2} [s_f(c_i) + s_f(c_j)] d(c_i, c_j)$$

wobei  $s_f(c_i)$  eine modifizierte Oberflächenspannungsfunktion und  $d(c_i, c_j)$  eine geglättete Dirac-Delta-Funktion ist.

### • Numerische Methoden

- Diskretisierung der Gleichungen auf einem **staggered grid** mit einer Marker-and-Cell (MAC)-Methode
- Verwendung eines **nichtlinearen Multigrid-Algorithmus** zur schnellen Lösung der Gleichungen
- Testläufe mit verschiedenen **vier-Komponenten-Flüssigkeitsgemischen**

### • Simulationen und Ergebnisse

- Zur Validierung der Methode wurden verschiedene Simulationen durchgeführt, darunter:
  1. **Spinodale Entmischung:** Phasenverhalten eines Vierkomponenten-Fluidsystems, basierend auf zufällig verteilten Anfangskonzentrationen.
  2. **Druckverteilung in stationären Tropfen:** Vergleich der simulierten Druckverteilung mit der Laplace-Gleichung zur Überprüfung der physikalischen Korrektheit.
  3. **Dynamik von Tropfen in einer anderen Flüssigkeit:** Untersuchung der Wechselwirkungen und Koaleszenz von Tropfen im Rahmen eines mehrkomponentigen Fluids.