

Расчёт температурного градиента на границе испаряющейся капли при помощи  
компьютерного моделирования

С.Д. Ефимов<sup>1,2</sup>, П.В. Лебедев-Степанов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Центр фотохимии Российской академии наук.

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

В связи с широкой областью применения inkjet технологий, их изучению уделяется всё больше внимания со стороны учёных из разных стран мира. Высыхающая на подложке капля представляет собой открытую диссипативную систему, в которой происходят процессы самоорганизации по мере испарения растворителя, кристаллизация или осаждение растворенного вещества с образованием упорядоченных твердофазных структур.

Зачастую самым важным фактором, влияющим на самоорганизацию растворённых веществ в капле, являются потоки жидкости, возникающие вследствие различных механизмов переноса энергии. Одним из таких является разница температуры на границе капли, возникающая вследствие более интенсивного испарения жидкости с края капли. Авторами [1] была получена оценка (1) для этого значения, позволяющая спрогнозировать характер гидродинамических потоков внутри испаряющейся капли.

$$\Delta T \sim \frac{\Delta H \rho_s D h}{k R} \quad (1)$$

Целью нашей работы стало уточнение оценочной формулы при помощи нового математического пакета Comsol. В нашей математической модели внутри капли решалось уравнение теплопроводности, а снаружи капли – уравнение диффузии

Для проверки корректности построенной модели были использованы значения [2] для распределения концентрации испаряющегося пара. Полученные результаты оказались очень близки ( $\delta \sim 1-2\%$ ), что позволило сказать о корректно созданной модели.

Были проведены расчёты по измерению температур на границе капель разных размеров, с разными контактными углами на плоской, не нагреваемой подложке. При анализе этих результатов установлено, что для капель небольшого объёма размер не влияет на разность температур, возникающую на границе капли, что согласуется с оценочной формулой (1).

Как показало моделирование, наибольший вклад в изменение этого параметра вносит вариация контактного угла. При анализе полученных данных было установлено, что оценочная формула довольно близка к результатам, полученным в ходе моделирования (Рис.1), но всё же требует уточнения. Для этого разность значений, полученных Comsol и формулой, полученной ранее, была аппроксимирована методом наименьших квадратов.

В результате нами была получена формула для оценки перепада температуры, знание которой позволяет определить условия достижения конвективной неустойчивости:

$$\Delta T \sim \frac{\Delta H \rho_s D h}{k R} (1 - \chi) \left( 0,001 \left( \frac{\alpha}{10} \right)^3 - 0,033 \left( \frac{\alpha}{10} \right)^2 + 0,330 \left( \frac{\alpha}{10} \right) + 0,263 \right), \quad (2)$$

где -  $\alpha$  это контактный угол, который принимает значения от 0 до 90 градусов.

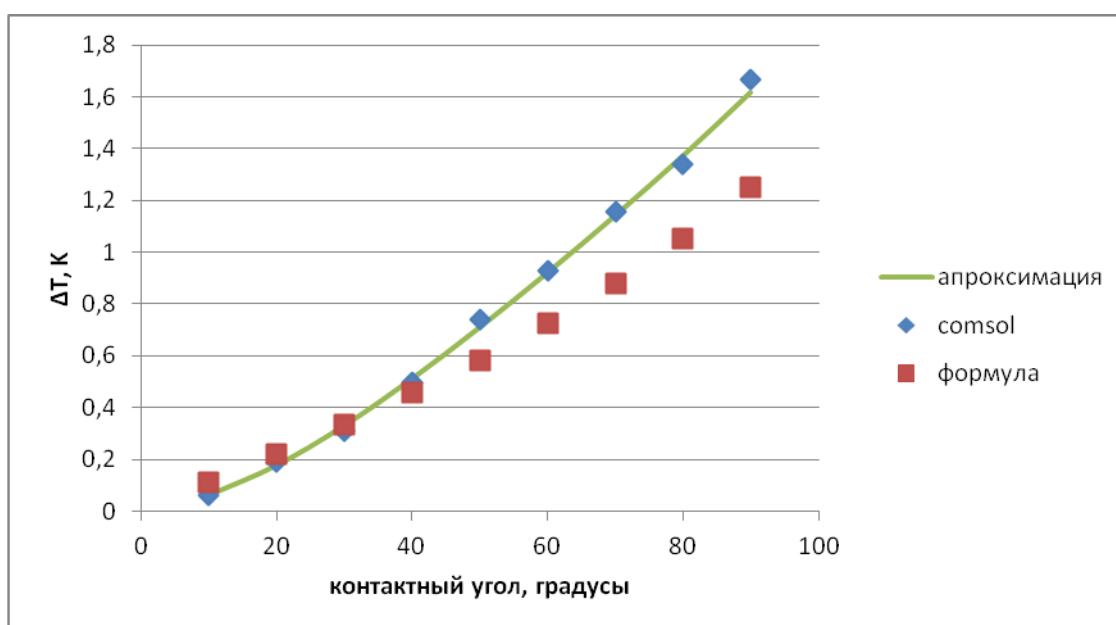


Рис. 1. Сравнение оценочной формулы (1) с точным расчётом (2)

### Литература

1. Lebedev-Stepanov P.V., Vlasov K.O. Simulation of self-assembly in an evaporating droplet of colloidal solution by dissipative particle dynamics. Colloids and Surfaces A : Physicochem. Eng. Aspects 432 (2013) 132-138.
2. Hu H., Larson R.G. J. Evaporation of a Sessile Droplet on a Substrate. Phys. Chem. B 2002, 106, P. 1334.