

Моделирование распределения частиц внутри тонких каплей раствора при неоднородном испарении

И. В. Водолазская, В. М. Дьякова

*Физико-технический факультет
Астраханский государственный университет
ул. Татищева, д. 20а, Астрахань, Россия, 414056*

При испарении капли коллоидного раствора, размещённой на подложке, при условии закрепления на подложке линии трёхфазной границы силы поверхностного натяжения приводят к появлению течений в капле. Если испарение капли происходит при однородных внешних условиях, то усреднённые по высоте капли течения имеют направление от центра капли к её краю, где потеря растворителя наибольшая. Частицы растворенного вещества переносятся этими течениями к краю капли, накапливаются там и образуют твёрдый осадок на подложке после полного испарения растворителя. Диффузия частиц оказывает влияние на форму осадка. Изменяя условия испарения и свойства раствора, можно менять структуру твёрдого осадка.

В работе представлена простая модель испарения тонкой капли раствора на подложке при неоднородных внешних условиях. Модель базируется на законе сохранения вещества. В предложенной математической модели рассчитывается радиальная скорость течения, усреднённая по высоте капли. Численное решение уравнения конвекции–диффузии даёт картину перераспределения растворенных частиц в капле из-за неоднородных условий испарения. В модели исследуется влияние на перераспределение коэффициента диффузии частиц и размера отверстия (неоднородности условий испарения). Если капля размещается под непроницаемой маской с круглым отверстием, то испарение происходит в основном под отверстием и силы поверхностного натяжения направляют течение в эту область для компенсации потери жидкости, сюда же переносится и растворенное вещество.

Ключевые слова: капля на подложке, испарение, сохранение вещества, течение, диффузия.

1. Введение

При испарении жидкости, расположенной на горизонтальной гидрофильной подложке, могут возникать капиллярные течения, которые переносят растворенные в жидкости частицы вещества. Одновременно внутри капли происходит диффузия частиц, их осаждение на подложку, взаимодействие частиц друг с другом. Все эти процессы приводят к тому, что после полного испарения жидкости частицы вещества образуют на подложке твёрдый слой с характерной структурой. Если изменять, например, условия испарения, то структура слоя изменяется.

В экспериментах, описанных в работах [1–3] капли или плёнки растворов размещались в различные неоднородные условия испарения с помощью различных непроницаемых препятствий над свободной поверхностью жидкости. После полного испарения рельеф твёрдого осадка на подложке, образованного частицами растворенного вещества, различался. Максимумы толщины твёрдого слоя соответствовали участкам наибольшего испарения, а минимумы размещались под препятствиями. Размер растворенных частиц также влиял на картину распределения частиц.

В представленной работе исследуется распределение частиц растворенного вещества в капле коллоидного раствора, испаряющегося на горизонтальной подложке под маской с круглым отверстием в центре капли.

2. Описание модели и основные уравнения

Условия испарения и форма капли (плёнки) имеют ось симметрии, поэтому задача решается в цилиндрической системе координат. Начало координат поместим в центре основания капли, как показано на рис. 1, ось z направим вертикально вверх. Введём обозначения: v — радиальная скорость капиллярного течения, J — плотность потока пара со свободной поверхности раствора, h — толщина капли, R — радиус основания капли, который во все время испарения считается постоянной величиной. Так как капля считается тонкой, то все величины, зависящие от координаты z , усредняем по высоте. В модели не учитывается осаждение частиц и взаимодействие между частицами. Температура системы считается постоянной.

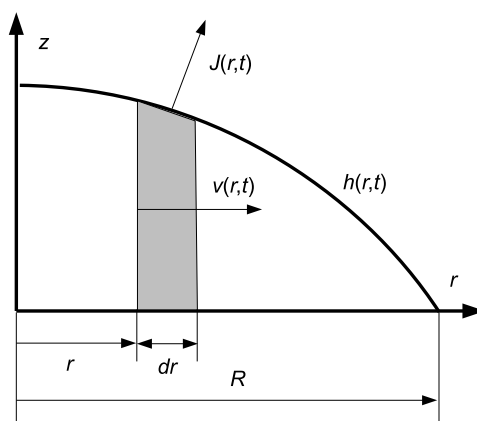


Рис. 1. Геометрические параметры капли

Основные уравнения — это закон сохранения растворителя [1] и уравнение конвекции-диффузии [4] для растворенных частиц вещества (1). Так как для капли малого объёма форма свободной поверхности определяется поверхностным натяжением, то в модели считается, что в любой момент времени свободная поверхность капли является сферическим сегментом.

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} &= -\frac{1}{r} \frac{\partial (rhv)}{\partial r} - \frac{J}{\rho} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial h}{\partial r}\right)^2}, \\ \frac{\partial (hC)}{\partial t} &= -\frac{1}{r} \frac{\partial (rChv)}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial (rhD \frac{\partial C}{\partial r})}{\partial r}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь ρ — плотность жидкости, величина постоянная, C — концентрация частиц растворенного вещества, D — коэффициент диффузии частиц, в данной модели величина постоянная.

При переходе к безразмерной форме уравнений в качестве характерного размера системы использовался радиус основания капли R , а в качестве характерного времени — время релаксации диффузионных процессов $t_d = R^2/D$.

Плотность потока пара с поверхности раствора непосредственно под непроницаемой маской считалась равной нулю, а под отверстием в маске описывалась модельным законом Дэвиса [5] с поправкой Фишера [6]:

$$\begin{cases} \Theta(x, \tau) = \Theta_0 \frac{1 - \exp(-A(d-x)^2)}{K + L(x, \tau)}, & x \leq d, \\ 0, & x > d, \end{cases} \quad (2)$$

где Θ , x , τ , L , d — плотность потока пара, радиальная координата, время, высота капли и радиус отверстия в безразмерной форме, а K и A — параметры.

3. Полученные результаты

На рис. 2(а) представлены результаты численного расчёта усреднённой радиальной скорости течения вдоль капли для различных радиусов отверстий в маске. Скорости приведены для момента времени, равного примерно половине времени испарения капли (все величины даны в относительных единицах). Для малых отверстий проекция скорости течения остаётся отрицательной (вынос вещества происходит в направлении центра капли), но максимум величины этой проекции смещается и всегда соответствует радиусу отверстия. Для больших радиусов отверстия характер течения меняется: в центральной части капли течения имеют направления от центра капли, но при приближении к краю капли течение изменяет своё направление на обратное. Для открытой капли течение имеет направление от центра капли к её краю [1]. В соответствии с течениями происходит перераспределение частиц растворенного вещества.

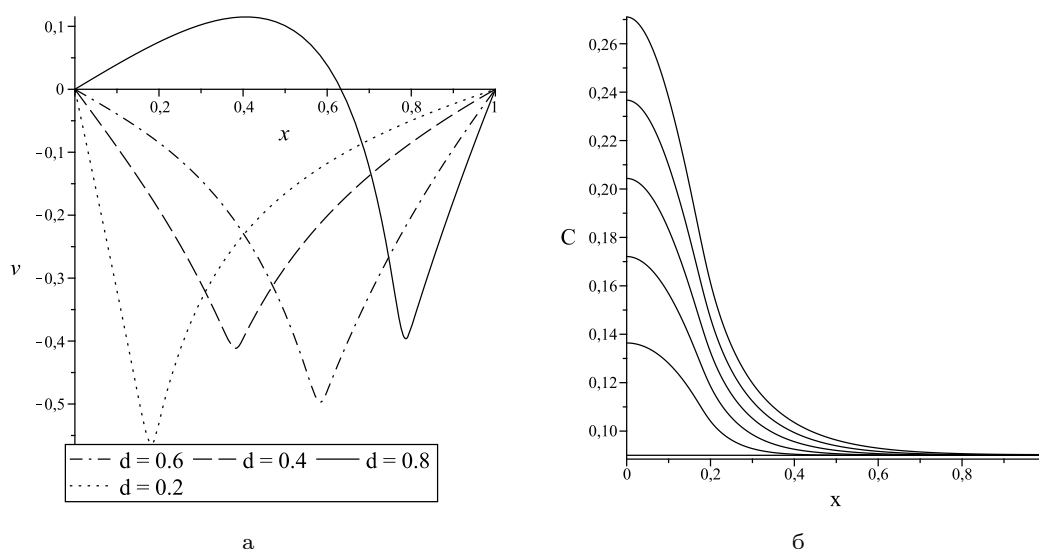


Рис. 2. (а) Усреднённая по высоте капли скорость течения для различных диаметров отверстий в маске. (б) Пространственно-временная динамика (снизу вверх) концентрации частиц растворенного вещества в капле

На рис. 2(б) представлена пространственно-временная динамика концентрации частиц для отверстия маски $d = 0,2$. С течением времени (снизу вверх) по мере испарения растворителя концентрация частиц в капле растёт, причём под отверстием накопление частиц происходит быстрее. В модели концентрация частиц не ограничивалась сверху.

С увеличением радиуса отверстия маски максимум концентрации частиц уширяется и перемещается к краю отверстия, как это представлено на рис. 3 для частиц с малым и большим коэффициентом диффузии. Кривые рассчитаны для момента времени, равного половине времени испарения капли. Частицы с большим коэффициентом диффузии распределяются вдоль капли за счёт диффузии более равномерно, а частицы с меньшим коэффициентом диффузии распределяются в соответствии с внутренними течениями в капле.

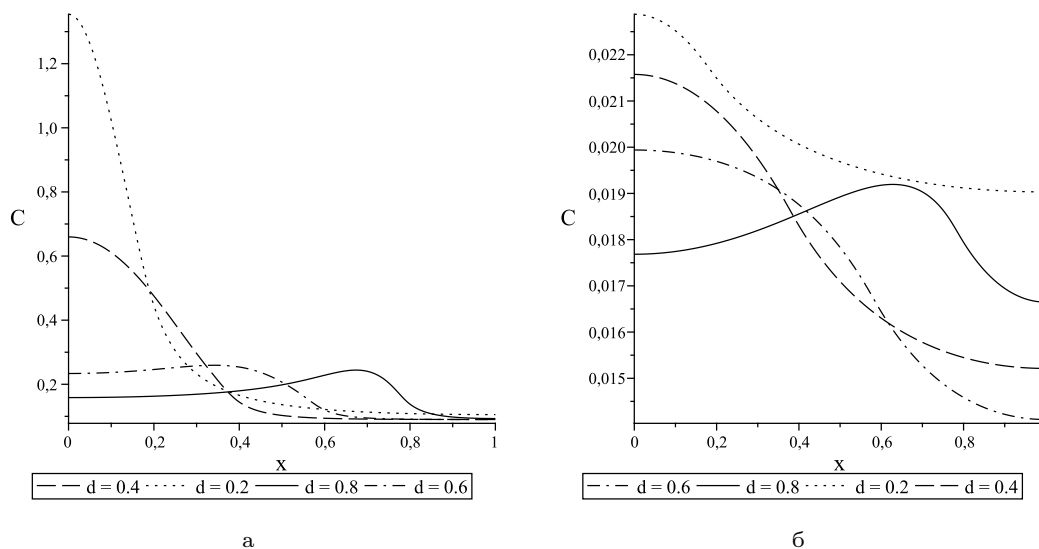


Рис. 3. Распределение в капле концентрации частиц растворенного вещества для различных диаметров отверстий в маске: (а) — для частиц с малым коэффициентом диффузии, (б) — с большим коэффициентом диффузии

4. Заключение

В рамках модели, базирующейся на законах сохранения вещества, исследовалось влияние условий испарения и диффузии на распределение частиц растворенного вещества внутри капли раствора малого объёма. Капля размещалась на горизонтальную подложку под непроницаемую маску с отверстием, ограничивающей испарение. В условиях закрепления трёхфазной линии при малых размерах отверстия маски, находящегося над центром капли, течения направлены от края капли к её центру, то есть под отверстие, там и происходит накопление частиц растворенного вещества, переносимых течением. С увеличением площади свободной поверхности капли, с которой происходит испарение, направление течений изменяется, вынос частиц вещества происходит к краю отверстия.

Литература

1. Contact Line Deposits in an Evaporating Drop / R. D. Deegan, O. Bakajin, T. F. Dupont et al. // *Phys. Rev. E*. — 2000. — Vol. 62, No 1. — Pp. 756–765.
2. Harris D. J., Conrad J. C., Lewis J. A. Evaporative Lithographic Patterning of Binary Colloidal Films // *Phil. Trans. R. Soc. A*. — 2009. — Vol. 367. — Pp. 5157–5165.
3. Dips and Rims in Dried Colloidal Films / C. Parneix, P. Vandoolaeghe, V. S. Nikolayev et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — Vol. 105. — P. 266103.
4. Okuzono T., Kobayashi M., Doi M. Final Shape of a Drying Thin Film // *Phys. Rev. E*. — 2009. — Vol. 80. — P. 021603.
5. Anderson D. M., Davis S. H. The Spreading of Volatile Liquid Droplets on Heated Surfaces // *Phys. Fluids*. — 1995. — T. 7.
6. Fischer B. J. Particle Convection in an Evaporating Colloidal Droplet // *Langmuir*. — 2002. — Vol. 18. — Pp. 60–67.

UDC 517.958, 004.942 PACS 07.05

**Modeling of Redistribution of Particles Arising from the
Nonuniform Evaporation of a Thin Droplet****I. V. Vodolazskaya, V. M. Dyakova***Department of Physics and Technology
Astrakhan State University
20a, Tatischev str., Astrakhan, Russia, 414056*

When a colloidal droplet with pinned contact line evaporates on a substrate, surface tension produce a fluid flow. Usually the flow directs to the contact line and the solute in the drop is dragged by this flow, where it accumulates. The deposit remains on the edge of the drop and forms a solid ring after complete evaporation of the liquid. The conditions of evaporation and solution properties affect on deposit structure.

We propose simple model of sessile thin drop desiccation under nonuniform evaporation. The model is based on mass conservation and has numerical solution. If the droplet is covered by a "mask" with hole, evaporation primarily occurs under the hole so that surface tension drives a flow of liquid to replenish this loss. In the proposed physical model a radial flow velocity was studied and the redistribution of component in the droplet arising from the non-uniform evaporation under a mask was predicted. The effect of diffusion and hole radius on the component redistribution was studied too.

Key words and phrases: sessile drop, evaporation, mass conservation, flow, diffusion.