

**Доклад по теме:**

**«Компьютерное моделирование  
гидродинамических потоков в испаряющейся  
капле жидкости на плоской подложке»**

Автор: *студент НИЯУ «МИФИ»*  
**Власов К.О.**

Научный руководитель: *к. ф.-м. н., нач. лаб. ЦФ РАН*  
**Лебедев-Степанов П.В.**

# Введение

- Основоположником теории испарения капель был *Максвелл*, который еще в 1877 г. описал случай стационарного испарения полусферической капли.
- Сегодня существуют различные модели испарения капли, которые обладают рядом особенностей, что мешает использовать их при моделировании процесса испарения капли.
- Особый интерес в процессе испарения капли представляет осаждение раствора из испаряющейся капли, приводящее к образованию кольцеобразного осадка.

# Испарение капли происходит в два этапа

В 1-ом этапе контактная линия заливает (пиннинг)  
контактный угол уменьшает

**1-ый этап** Уменьшение контактного угла

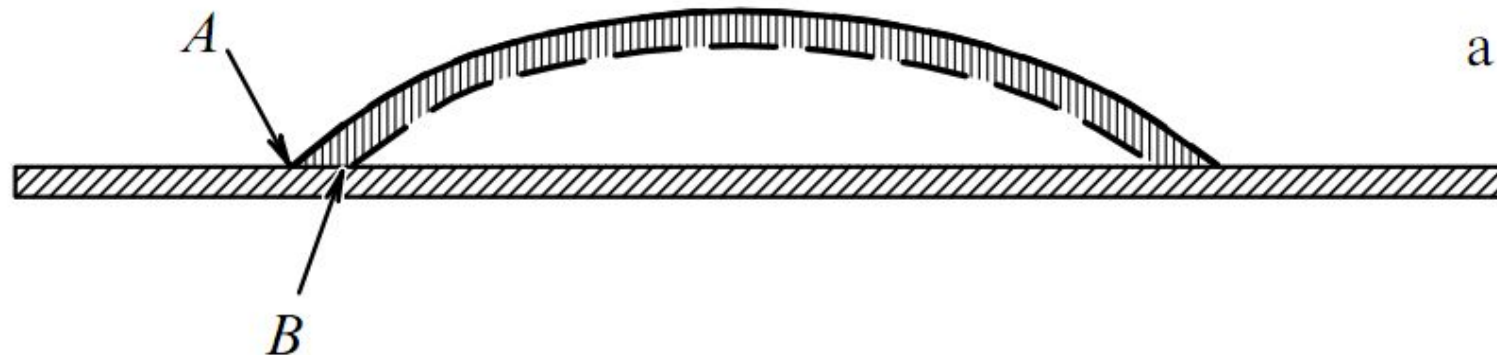


Когда  $\theta$  достигает критического значения контактная  
линия начинает отступать это второй этап

**2-ой этап** Движение контактной линии

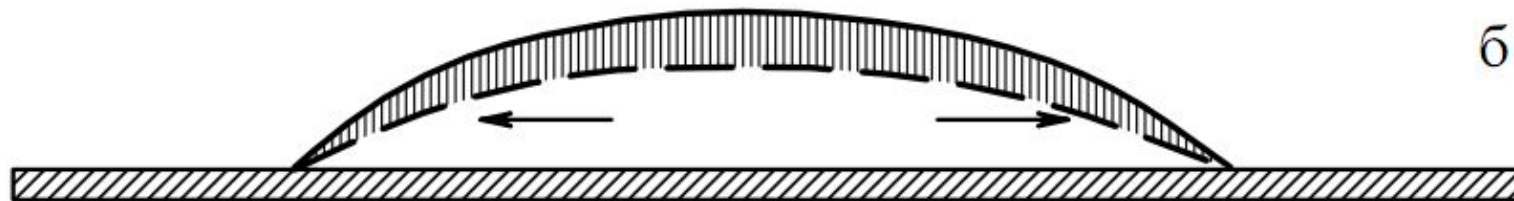


# Возникновения радиального течения в капле



а) Случай испарения с постоянным углом :

В этом случае форма капли не изменяется. Заштрихованный слой капли испаряется. Контактная линия смещается из точки A в точку B.



б) Случай пиннинга контактной линии:

Происходит изменение формы поверхности капли. Чтобы удержать контактную линию, растворитель должен восполнять потери на краю капли. В капле возникает радиальное течение. Поэтому после испарения капли остается кольцеобразный осадок.

# Актуальность

- Актуальность данной работы связана с потребностью расчета динамики гидродинамических потоков внутри испаряющейся капли в рамках задачи самосборки наночастиц.
- Самосборка наночастиц представляет особый интерес для применения в таких областях как микроэлектроника и медицина.
- Сегодня компьютерное моделирование с последующей визуализацией все шире используется в науке и технике как мощное вспомогательное средство.

# Цели работы

## Моделирование процесса испарения:

- Поиск моделей испарения капли пригодных для моделирования «реальных» задач.
- Создание программы, моделирующей процесс испарения капли и сравнение результатов с экспериментальными данными.

## Моделирование потоков внутри капли:

- Разработка собственной математической и компьютерной модели потоков внутри испаряющейся капли.
- Компьютерная визуализация потоков внутри капли и сравнение результатов с теорией.

# Моделирование процесса испарения

- После изучения различных решений для динамики испарения капли мы остановились на математической модели, описанной в статье *Ларсона* и *Ху*.
- В качестве платформы для написания программы для расчета динамики высыхания капли нами был выбран язык программирования C++.
- В качестве входных данных для нашей программы были использованы пары экспериментальных значений  $R$  и  $h$  на каждом шаге высыхания.

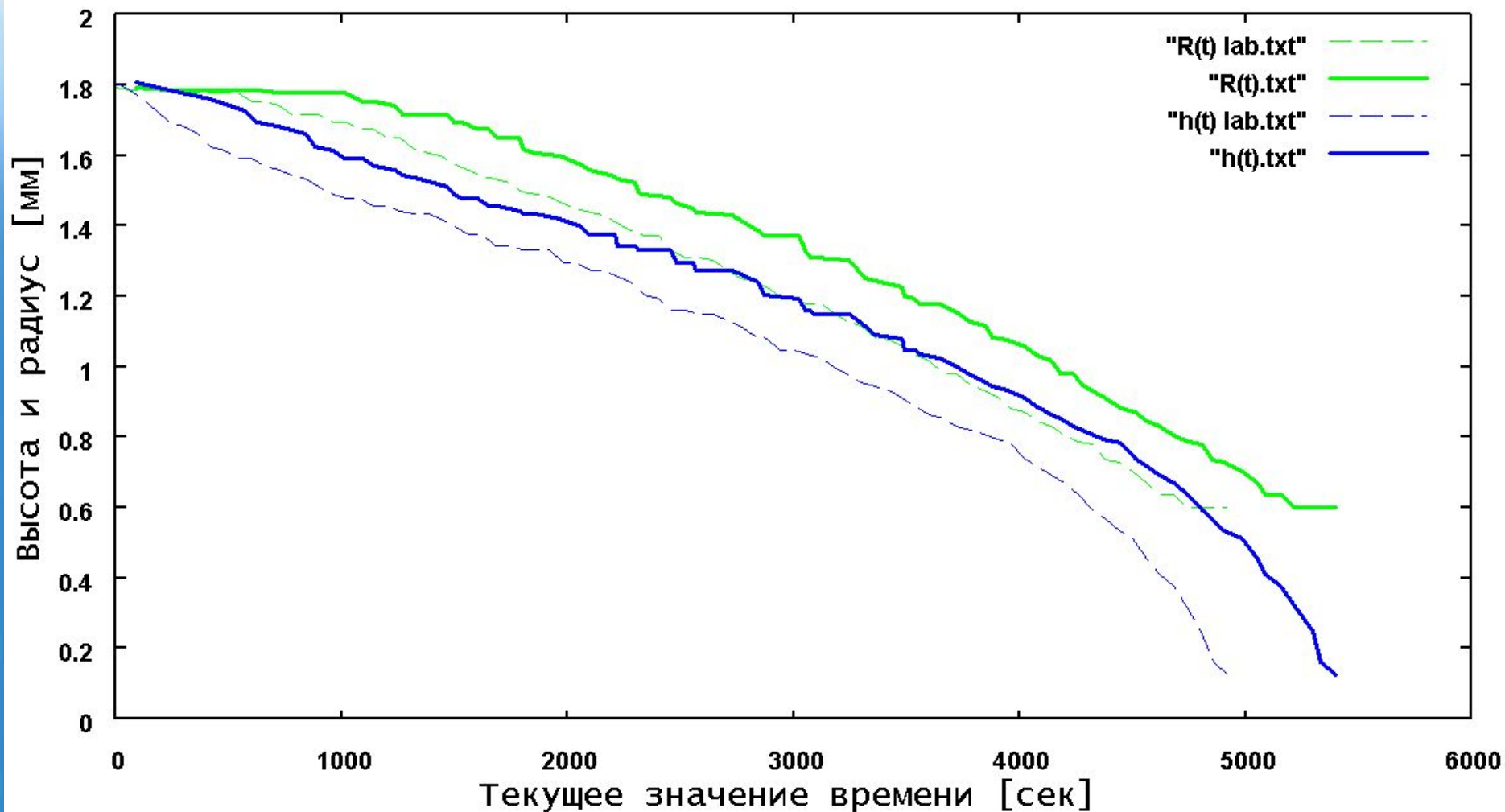


График зависимости высоты и радиуса испаряющейся капли от времени в случае ручного нанесения капли.

( $V \approx 12$  мкл,  $N = 28\%$ ,  $T = 20$  °C, гидрофобная подложка)



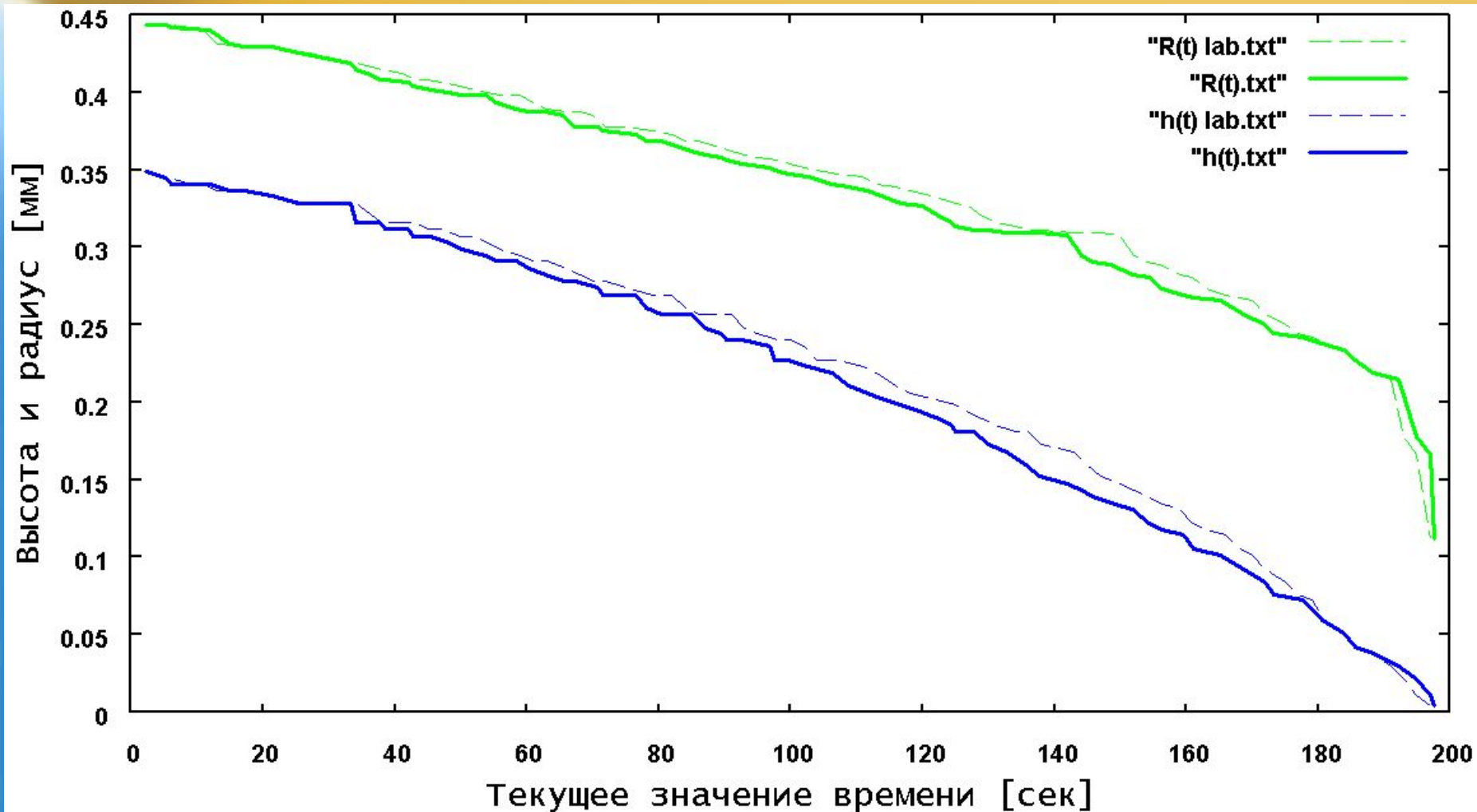
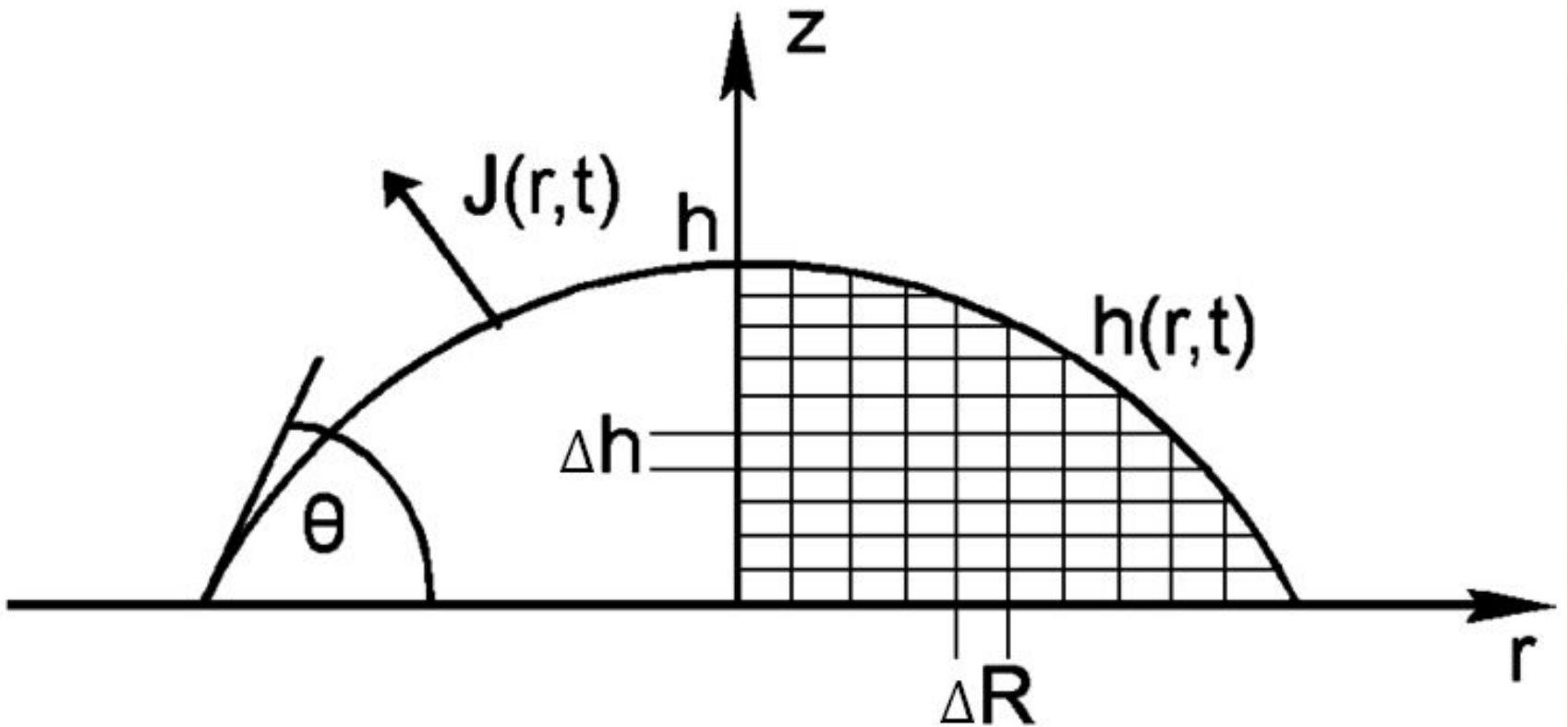


График зависимости высоты и радиуса испаряющейся капли от времени в случае нанесения капли прибором Jetlab II.  
( $V \approx 0.15$  мкл,  $H=30\%$ ,  $T=24$  °C)

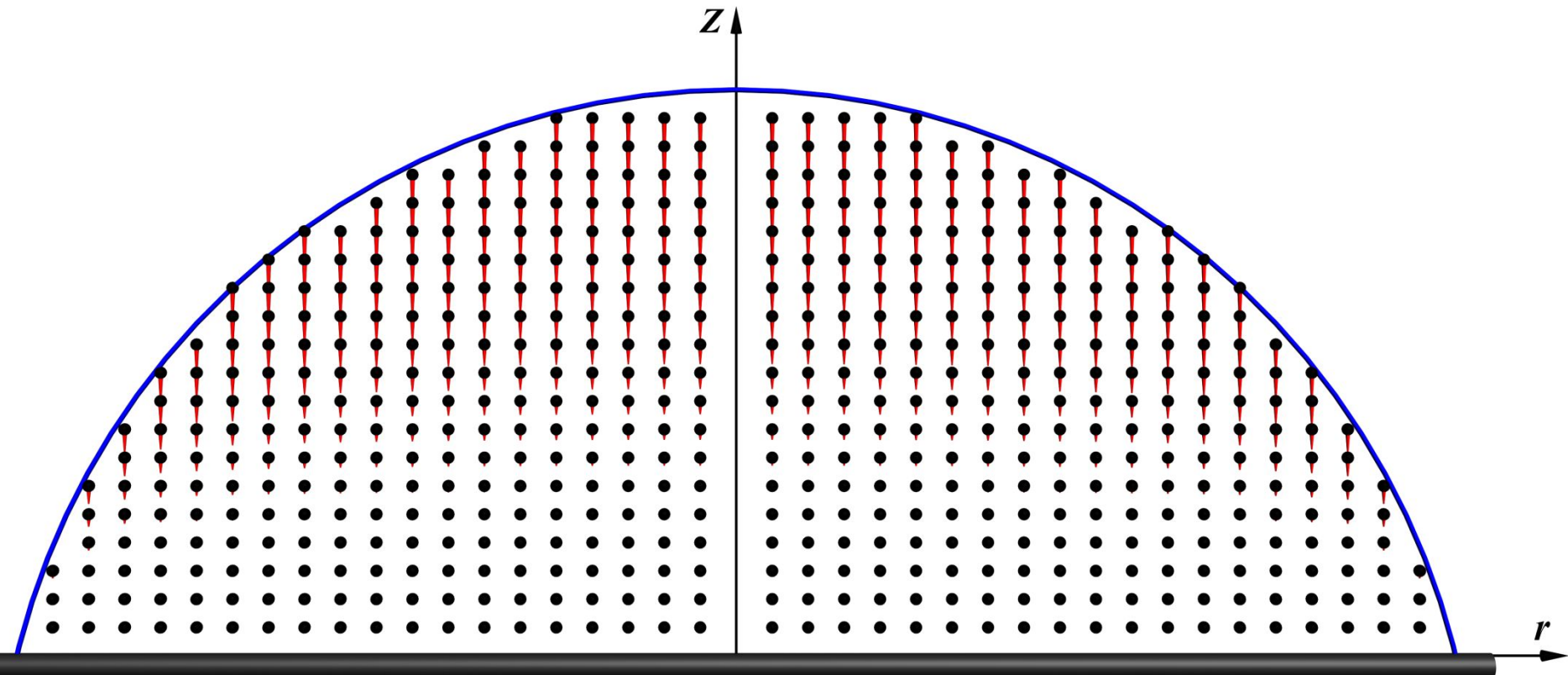
# Моделирование потоков внутри капли

- Тестирование разработанной компьютерной модели испарения капли, показало *возможность применения ее на практике.*
- Поэтому следующей задачей стала доработка нашей программы, добавляющая *расчет динамики потоков внутри испаряющейся капли.*
- Однако если в случае моделирования испарения капли, мы сравнивали результаты с экспериментом, то *проверка расчета потоков возможна путем сравнения с теорией.*
- Для этого *были визуализированы* выходные данные, в целях ускорения данной проверки и улучшения ее качества.

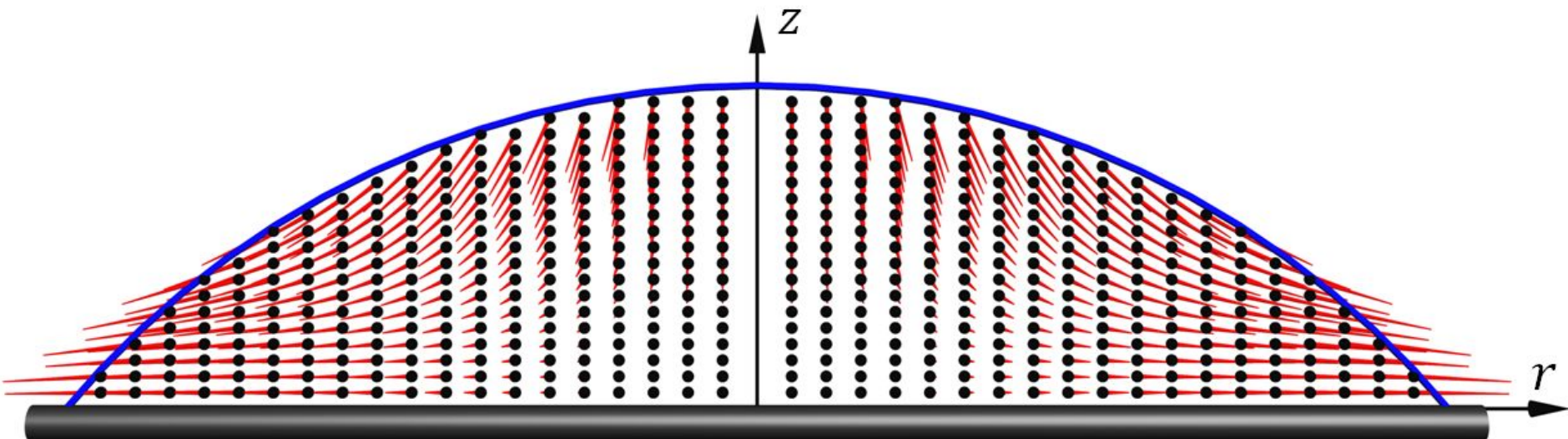


Неподвижная сферическая капля в системе координат с характерной сеткой разбиения.

Точками изображены узлы сетки разбиения, а длина и направление векторов соответствуют характеру гидродинамических потоков внутри капли.

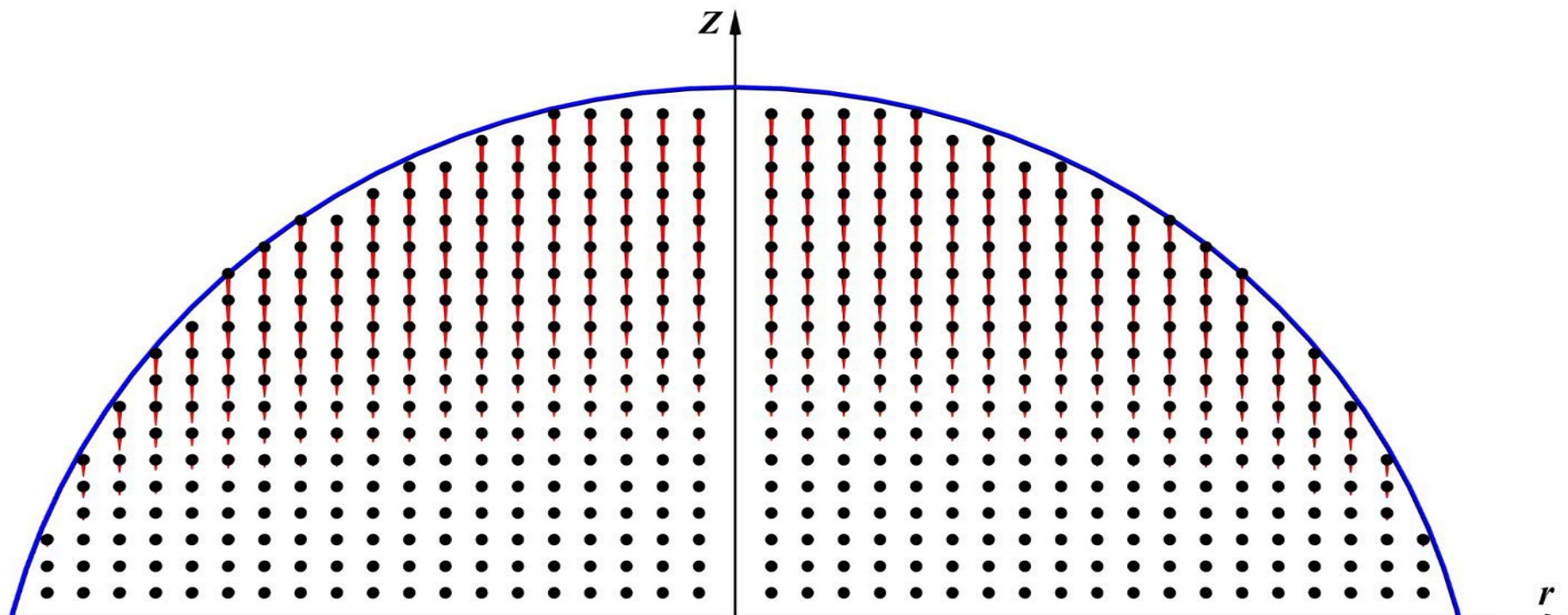


Визуальная картина моделирования потоков в случае испарения с постоянным углом.



Визуальная картина моделирования потоков в случае пиннинга контактной линии.

# Динамика потоков в процессе испарения капли



В предельном случае пиннинга контактной линии потоки будут иметь максимально выраженный радиальный характер.

В то время как в предельном случае испарения с постоянным углом, радиальные течения жидкости будут выражены слабо .

# Итоги:

- ✓ Создана программа моделирующая испарение капли произвольной формы. Проверена возможность применения ее на практике.
- ✓ Разработана собственная математическая и соответствующая ей компьютерная модели для описания динамики потоков.
- ✓ Показано возникновение радиальных течений жидкости, направленных к краям капли и перемещающих растворенные вещества на периферию капли, что согласуется с современной теорией.
- ✓ Дальнейший интерес представляет моделирование и визуализация поведения растворенных в капле частиц, а также учет большего числа различных параметров.

# СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

## ЛИТЕРАТУРА

1. Фукс Н.А. Испарение и рост капель в газообразной среде. — М.: Издательство Академии наук СССР, **1958**. — 93с.
2. Maxwell, J. C. Collected Scientific Papers, Cambridge, II **1890** 625.
3. Hu, H.; Larson, R. G. Langmuir **2005**, 21, 3963-3971.
4. Hu, H.; Larson, R. G. J. Phys. Chem. B **2002**, 106, 1334-1344.
5. Тарасевич Ю. Ю. "Механизмы и модели дегидратационной самоорганизации биологических жидкостей" УФН 174 779–790 (2004).
6. К.О. Власов , П.В. Лебедев-Степанов. Компьютерная визуализация гидродинамических потоков внутри испаряющейся микрокапли жидкости // "Научная визуализация". 2010. Т. 2.4 С. 72 - 75.