

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОКАПИЛЛЯРНОЙ СБОРКИ КОЛЛОИДНОГО КЛАСТЕРА ПРИ ИСПАРЕНИИ ЖИДКОЙ ПЛЕНКИ В НЕРАВНОМЕРНО НАГРЕТОЙ ЯЧЕЙКЕ

К. Н. Кондрашова¹, К. С. Колегов^{1,*}, И. В. Водолазская¹

¹Астраханский государственный университет им. В.Н. Татищева, Астрахань, Россия

*e-mail: konstantin.kolegov@asu-edu.ru

Аннотация. Управление термокапиллярной сборкой кластера частиц важно для различных приложений в области создания фотонных кристаллов, для микро- и оптоэлектроники, формирования мембран для биотехнологий и очистки поверхности для лабораторий на чипе. Цель текущей работы заключается в понимании основных механизмов, влияющих на сборку таких кластеров, которые являются объектом нашего исследования. Здесь предложена двумерная математическая модель, описывающая перенос частиц термокапиллярным потоком в неравномерно нагретой ячейке в процессе испарения жидкости. Это позволило нам изучить один из основных механизмов, инициирующих зарождение кластера частиц. Будет ли та или иная частица циркулировать вместе с потоком или остановится в районе нагревателя, положив начало зарождающемуся кластеру, зависит от соотношения силы тяжести и силы вязкого трения. Результаты численных расчетов показали, что для малых концентраций частиц с ростом объемной плотности теплового потока Q уменьшается доля частиц, попадающих в кластер. Это связано с тем, что при увеличении Q термокапиллярный поток усиливается, что уменьшает вероятность попадания частиц в кластер.

Ключевые слова: коллоидный кластер, скопление частиц, термокапиллярный поток, неравномерный нагрев, испарение жидкости в открытой ячейке

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, проект № 22-79-10216 (<https://rscf.ru/project/22-79-10216/>).

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Ссылка для цитирования: Кондрашова К.Н., Колегов К.С., Водолазская И.В. Моделирование термокапиллярной сборки коллоидного кластера при испарении жидкой пленки в неравномерно нагретой ячейке. *Коллоидный журнал / Colloid journal*. 2026. Т. 88. № 1. С. 21–36. <https://doi.org/10.31851/S0023291226010023>

Поступила в редакцию 03.09.2025

После доработки 27.10.2025

Принята к публикации 30.10.2025

SIMULATION OF THE THERMOCAPILLARY ASSEMBLY OF A COLLOIDAL CLUSTER DURING THE EVAPORATION OF A LIQUID FILM IN AN UNEVENLY HEATED CELL

K. N. Kondrashova¹, K. S. Kolegov^{1,*}, I. V. Vodolazskaya¹

¹Astrakhan Tatishchev State University, Astrakhan, Russia

*e-mail: konstantin.kolegov@asu-edu.ru

Abstract. The control of the thermocapillary assembly of colloidal particle clusters is important for a variety of applications, including the creation of photonic crystals for microelectronics and optoelectronics, membrane formation for biotechnology, and surface cleaning for laboratory-on-chip devices. The aim of the current work is to understand the main mechanisms influencing the assembly of such clusters, which are the object of our research. Here we consider a two-dimensional mathematical model describing the transfer of particles by a thermocapillary flow in an unevenly heated cell during the evaporation of a liquid. This gave us the opportunity to study one of the main processes that triggers the formation of a particle cluster. Whether the particle will move with the flow or stop at the heater, becoming the basis for the cluster, is determined by the ratio between gravity and the drag force. The results of numerical calculations show that, for small particle concentrations, their fraction entering the cluster decreases as the volumetric heat flux density Q increases. The reason for this is an increase in the thermocapillary flow with an increase in the volumetric heat flux Q . In our conclusion, it reduces the probability of particles entering the cluster.

Keywords: colloidal cluster, particles assembly, thermocapillary flow, uneven heating, liquid evaporation in open cell

Funding. This work is supported by Grant No. 22-79-10216 from the Russian Science Foundation (<https://rscf.ru/en/project/22-79-10216/>).

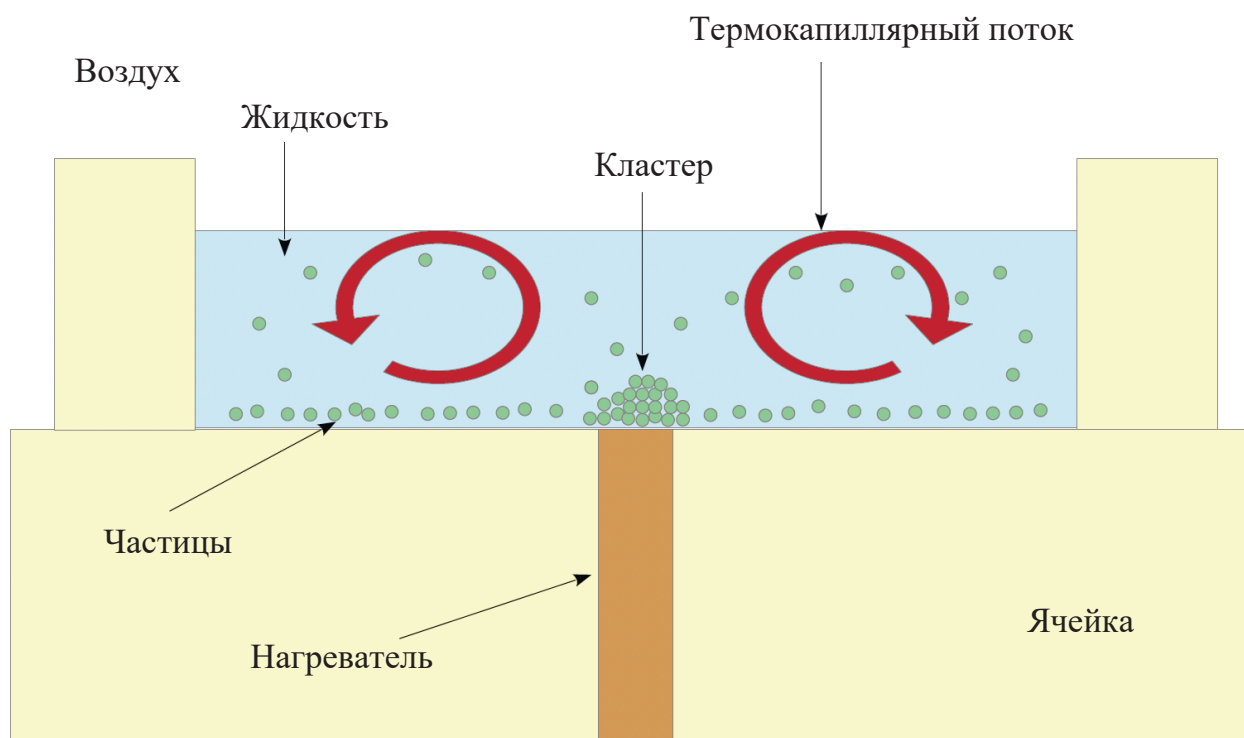
Conflict of interests. The authors of this work declare that they have no conflict of interest.

For citation: Kondrashova K.N., Kolegov K.S., Vodolazskaya I.V. Simulation of the Thermocapillary Assembly of a Colloidal Cluster during the Evaporation of a Liquid Film in an Unevenly Heated Cell. *Kolloidnyy Zhurnal / Colloid Journal*. 2026;88(1):21–36. (In Russ.) <https://doi.org/10.31851/S0023291226010023>

Received September 03, 2025

Revised October 27, 2025

Accepted October 30, 2025



ВВЕДЕНИЕ

Испарение капель и пленок зачастую сопровождается формированием различного вида коллоидных структур [1]. Один из способов влияния на этот процесс заключается в неравномерном пространственном нагреве подложки. Градиент температуры твердой поверхности оказывает влияние на гидродинамику в жидком слое. Таким образом возможно управлять переносом коллоидных частиц.

В эксперименте [2] изучали влияние размера частиц и градиента температуры подложки на эффект кофейных колец. При стандартных комнатных условиях на месте высохшей капли формировался кольцевой осадок, что связано с переносом частиц капиллярным потоком к периферии капли. Размер частиц влиял на режим контактной линии («закрепление» или «закрепление–скольжение»). Градиент температуры подложки приводил к возникновению потока Марангони, который также влиял на перенос частиц. Это приводило к возникновению асимметрии в форме осадка или к другой геометрии осадка [2]. Увеличение температуры подложки относительно температуры окружающей среды приводило к увеличению ширины кольцевого осадка (с наличием центральной истощенной зоны) вплоть до формирования сплошного пятна [3]. В другом эксперименте с каплей по мере роста температуры подложки проявлялся переход от осадка в виде «кофейного кольца» к «кофейному глазу», геометрия которого включала узкий кольцевой осадок и массивное центральное пятно внутри этого

кольца [4]. Результаты моделирования также продемонстрировали такое изменение геометрии осадка при увеличении температуры подложки [5]. Численное моделирование и натурные эксперименты были проведены для случая частичного нагрева подложки, когда капля воды с частицами полистирола зажата в ячейке Хеле-Шоу боковыми пластинами, расположенными перпендикулярно горизонтальной подложке [6]. Такая конфигурация ячейки позволила перейти к рассмотрению 2D-задачи. Для разных режимов нагрева структура потока была визуализирована методом PIV и рассчитана с помощью уравнений гидродинамики. Кроме того, были проведены эксперименты для 3D-капель с целью получения снимков геометрии осадков. По этим снимкам построены профили концентрации частиц (доля частиц в локальной подобласти по отношению к общему количеству частиц) относительно радиальной координаты для разных режимов нагрева [6]. Влияние температуры подложки T_s и концентрации наночастиц оксида алюминия на геометрию осадка на месте высохшей капли изучали в эксперименте [7]. Для некоторого диапазона значений ключевых параметров наблюдалось образование осадка в форме двойного кольца. Такой осадок включает «кофейное кольцо» и внутреннее кольцо [7]. Бинарная смесь частиц разного размера использовалась в эксперименте с каплей, высыхающей на нагретой подложке [8]. В зависимости от температуры подложки наблюдались пять отличительных паттернов осадка: относительно однородный паттерн, окруженный кольцом в форме диска, почти неоднородный

паттерн внутри толстого внешнего кольца, «двойной кольцевой» паттерн, «розообразный» паттерн и набор концентрических колец, образующихся в результате «прилипания–скольжения» контактной линии. Кольцевой осадок для случая бинарной смеси состоял из двух подколец, разделенных небольшим зазором. Внешнее кольцо состояло из мелких частиц, в то время как внутреннее включало, как правило, крупные частицы [8]. Авторы [9] провели похожие эксперименты и дополнительно изучили влияние параметра, связанного с отношением диаметра мелких частиц к диаметру крупных, d_s/d_l . Построенная фазовая диаграмма показала при каких значениях параметров T_s и d_s/d_l наблюдается самосортировка частиц по размеру внутри кольца [9]. Для неравномерного нагрева открытой ячейки с жидкостью в центральную часть дна ячейки был вмонтирован медный стержень, подсоединенный к элементу Пельтье [10]. Возникающий градиент температуры на свободной поверхности жидкости приводил к возникновению термокапиллярного потока жидкости. Перенос частиц потоком влиял на формирование кластера частиц в центральной области ячейки. Численно рассчитанная скорость потока по порядку величины хорошо согласовывалась с результатами измерений методом PIV [10]. Предложенная 1D-модель позволяет рассмотреть лишь усредненную по высоте жидкого слоя горизонтальную скорость потока, но она не дает возможности судить о 2D-структуре потока [10]. Моделирование показало, что с течением времени концентрация частиц растет в районе нагревателя. Такая технология может быть полезна в манипулировании микрочастицами, включая твердые частицы, полимеры, клетки, мицеллы, белки и микроэмульсии, взвешенные в жидкой среде (см. ссылки в работе [11]). Результаты численных расчетов потока чистой жидкости (без частиц) в испаряющейся капле предсказали возможность управления структурой потока за счет изменения точки локального нагрева подложки [12]. Другое численное исследование [13] показало, что при температуре $T_s = 25^\circ\text{C}$ в испаряющейся капле преобладает капиллярный поток. При $T_s = 50^\circ\text{C}$ доминирует тепловой поток Марангони. Кроме того, в работе [13] изучено влияние отношения плотности частиц к плотности жидкости, ρ_p/ρ_l , на перенос частиц потоком жидкости. Влияние концентрации наночастиц на структуру осадка, остающегося после высыхания капли на разогретой подложке ($T_s = 80^\circ\text{C}$), изучалось численно и экспериментально в работе [14]. При относительно низкой концентрации раствора образовывалось сплошное пятно. Когда концентрация наночастиц была относительно высока, наблюдался эффект кофейного кольца [14]. В работе [15] исследовалось влияние двух нагревателей, вмонтированных в подложку, на структуру потока чистой жидкости в испаряющейся пленке с помощью предложенной математической модели. Для разных режимов нагрева была показана соответствующая структура потока. Влияние седиментации частиц на структуру осадка после высыхания подвешенной капли на подложках разной смачиваемости исследовалось в работе [16]. Полученные структуры осадков сравнивались со структурами для

случая сидячей капли. Регулируя температуру окружающей среды, возможно управлять формированием массива микроиголок при высыхании пленки полимерного раствора [17]. Такие устройства полезны для трансдермальной доставки лекарств в медицине.

В этой работе продолжаются исследования, начатые в работах [10, 11], в которых рассматривается случай с вмонтированным в дно открытой ячейки нагревателем. Цель текущей работы заключается в изучении влияния объемной плотности теплового потока на формирующийся кластер и в понимании механизма, приводящего к появлению центрального кластера.

МЕТОДЫ

Физическая постановка задачи

Рассмотрим жидкость в открытой цилиндрической ячейке, в центр дна которой вмонтирован нагреватель (рис. 1). Ячейка состоит из стеклянного кольца, приклеенного к подложке из оргстекла. В центр дна ячейки вмонтирован медный стержень, который соединен с элементом Пельтье. Ячейка заполняется изопропиловым спиртом (изопропанол) с добавлением полистироловых микросфер. Задача имеет осевую симметрию и решается в цилиндрической системе координат (r, z) . Геометрические параметры системы и свойства материалов приведены в табл. 1 и 2, их значения взяты из работы [10].

Динамическую вязкость жидкости μ и плотность ρ_l считаем постоянными величинами, так как рассматриваем малую концентрацию частиц. Жидкость считаем несжимаемой.

Математическая модель

Для расчета скорости течения жидкости, $\vec{v} = (v_r, v_z)$, воспользуемся уравнениями неразрывности и Навье-Стокса,

$$\operatorname{div} \vec{v} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v}, \vec{\nabla}) \vec{v} = -\frac{1}{\rho_l} \nabla p + \frac{\mu}{\rho_l} \Delta \vec{v}, \quad (2)$$

где p – это давление. Операторы Набла и Лапласа в цилиндрической системе координат имеют вид $\nabla p = \left(\frac{\partial p}{\partial r}, \frac{\partial p}{\partial z} \right)$ и $(\Delta \vec{v})_{r,z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_{r,z}}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 v_{r,z}}{\partial z^2} - \frac{v_{r,z}}{r^2} \delta_{r,z}$, где $\delta_r = 1$ и $\delta_z = 0$.

Распространение тепловой энергии в жидкой среде описывается с помощью уравнения теплопереноса

$$\rho_l c_l \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{v}, \vec{\nabla}) T \right) = \operatorname{div} (\kappa_l \nabla T). \quad (3)$$

Также запишем уравнение теплопроводности для стеклянной ячейки:

$$\rho_s c_s \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div} (\kappa_s \nabla T), \quad (4)$$

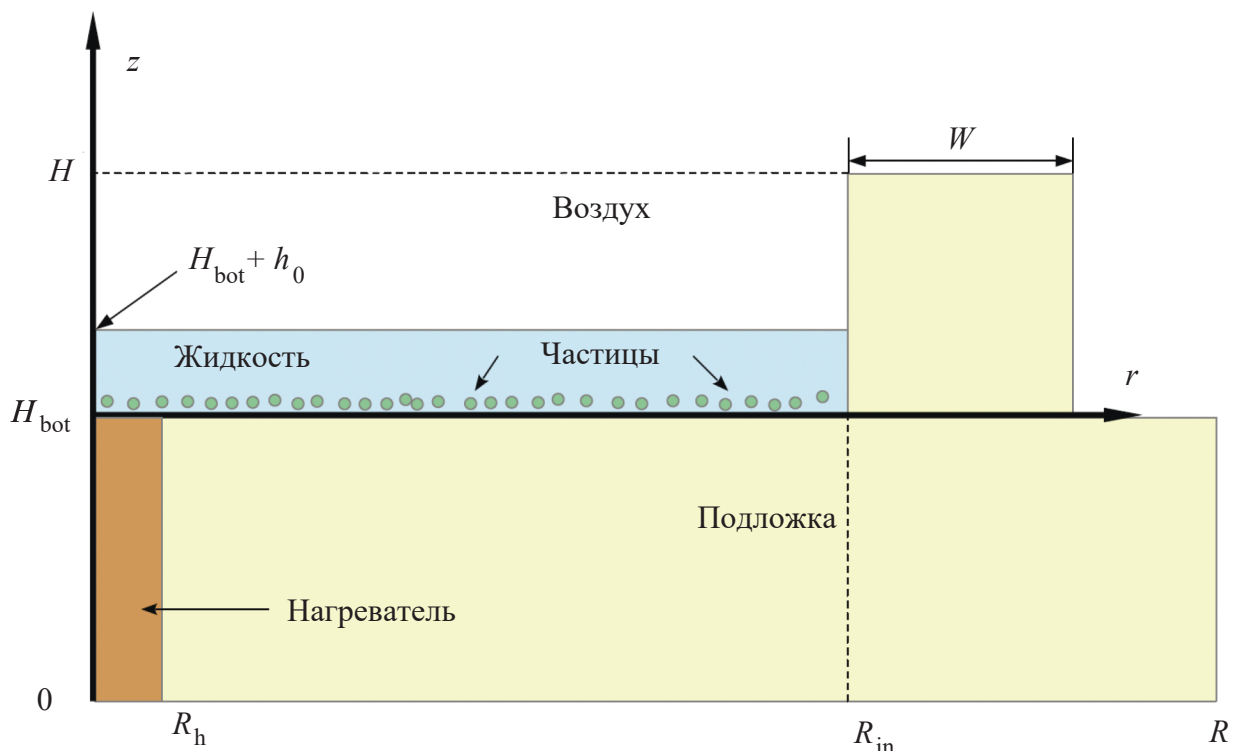


Рис. 1. Область решения задачи

Таблица 1. Геометрические параметры системы

Символ	Описание	Значение, мм
h_0	Начальная толщина пленки	0.7
r_p	Радиус частицы	0.025
H_{bot}	Толщина дна ячейки	3
R_h	Радиус нагревательного элемента	0.6
R_{in}	Внутренний радиус ячейки	10
W	Толщина стенки ячейки	4
H	Высота стенки ячейки	4
R	Радиус подложки	19.5

и для медного стержня:

$$\rho_{rod} c_{rod} \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div} (\kappa_{rod} \nabla T) + Q, \quad (5)$$

где Q — объемная плотность теплового потока ($\text{Вт}/\text{м}^3$). В этой модели используется единое обозначение температуры T для каждой подобласти, так как уравнения (3)–(5) можно переписать в виде одного общего уравнения, в котором значения параметров меняются в зависимости от подобласти, для которой оно рассчитывается.

Кроме того, конвективное слагаемое, содержащееся в (3), и тепло от источника Q в (5) могут автоматически зануляться в тех подобластях, где они не требуются.

Предполагаем, что частицы маленькие, их концентрация мала, и они не влияют на течение жидкости. Это позволяет независимо рассчитать поле скорости жидкости \vec{v} и скорости частиц \vec{u} . Движение частицы массой m_p определяется вторым законом Ньютона:

$$m_p \frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{F}_d + \vec{F}_g + \vec{F}_A, \quad (6)$$

Таблица 2. Физические параметры материалов^a

Символ	Описание	Величина, ед. изм.
L	Теплота парообразования изопропанола	75×10^4 Дж/кг
M	Молярная масса изопропанола	0.06 кг/мол
ρ_l	Плотность изопропанола	786 кг/м ³
ρ_s	Плотность оргстекла	2500 кг/м ³
ρ_p	Плотность полистироловых частиц	1050 кг/м ³
ρ_{rod}	Плотность меди	8960 кг/м ³
P_v	Парциальное давление паров изопропанола в воздухе	4.23×10^3 Па
T_0	Температура воздуха	298.15 К
T_{sat}	Температура насыщения паров изопропанола	355.4 К
μ	Динамическая вязкость изопропанола	2.43×10^{-3} Па·с
c_l	Удельная теплоемкость изопропанола	2605 Дж/(кг·К)
c_s	Удельная теплоемкость оргстекла	780 Дж/(кг·К)
c_{rod}	Удельная теплоемкость меди	385 Дж/(кг·К)
κ_l	Коэффициент теплопроводности изопропанола	0.13 Вт/(м·К)
κ_s	Коэффициент теплопроводности оргстекла	0.748 Вт/(м·К)
κ_{rod}	Коэффициент теплопроводности меди	400 Вт/(м·К)
α_{air}	Коэффициент теплоотдачи воздуха	5.6 Вт/(м ² ·К)
α_l	Коэффициент теплоотдачи изопропанола	216 Вт/(м ² ·К)
α_s	Коэффициент теплоотдачи оргстекла	2.5 Вт/(м ² ·К)
σ_0	Коэффициент поверхностного натяжения изопропанола	22×10^{-3} Н/м
σ'	Температурный коэффициент поверхностного натяжения изопропанола, $\sigma' = \partial\sigma/\partial T$	-8×10^{-5} Н/(м·К)

^a Индексы l , s и p показывают отношение какого-либо параметра к жидкости, твердому телу (стеклянная ячейка) и частицам соответственно. Значения параметров указаны для температуры 20°C.

здесь сила сопротивления среды $\vec{F}_d = m_p(\vec{v} - \vec{u}) / \tau_p$, время отклика частиц $\tau_p = \rho_p d_p^2 / (18\mu)$, диаметр частиц $d_p = 2r_p$, сила тяжести $\vec{F}_g = m_p \vec{g}$ (\vec{g} – ускорение свободного падения), сила Архимеда $\vec{F}_A = -\rho_l V_p \vec{g}$ и объем частиц $V_p = 4\pi r_p^3 / 3$. В уравнении (6) пренебрегаем присоединенной массой, так как число Стокса $St = \tau_p / \tau_f \approx 3 \cdot 10^{-4} \ll 1$. Здесь характерное время изменения потока рассчитано по формуле $\tau_f = \rho_p h_0^2 / \mu \approx 0.2$ с.

Начальные и граничные условия

В начальный момент времени ($t = 0$) частицы распределены случайным образом вблизи дна ячейки из-за седиментации ($\rho_p / \rho_l \approx 1.34$; рис. 1). Скорость течения

и скорость частиц равны нулю, температура жидкости и ячейки соответствует температуре окружающей среды T_0 , свободная поверхность жидкости плоская:

$$\vec{v} = 0, \vec{u} = 0, T = T_0, h = h_0.$$

Нижняя граница подложки является теплоизолированной, $\partial T / \partial n = 0$, \vec{n} – вектор нормали к границе. На границе «ячейка–воздух» $\{r = R_{in}, z = (H_{bot} + h)..H\}$, $\{r = R_{in}..(R_{in} + W), z = H\}$, $\{r = R_{in} + W, z = H_{bot}..H\}$, $\{r = (R_{in} + W)..R, z = H_{bot}\}$ $\{r = R, z = 0..H_{bot}\}$ учтен теплообмен с окружающей средой с использованием закона Ньютона-Рихмана:

$$\kappa_s \frac{\partial T}{\partial n} = \lambda_s (T_0 - T), \lambda_{s,l} = \left(\frac{1}{\alpha_{s,l}} + \frac{1}{\alpha_{\text{air}}} \right)^{-1}.$$

В этой эмпирической закономерности $\lambda_{s,l}$ – коэффициент теплопередачи. На свободной поверхности жидкости [$r = 0..R_{\text{in}}, z = h$] учитывается также поток тепла, связанный с потерей тепловой энергии в результате испарения:

$$\kappa_1 \frac{\partial T}{\partial n} = \lambda_1 (T_0 - T) - LJ,$$

где J – плотность потока пара. На оси симметрии (ось OZ) нет теплового потока через эту ось, $\partial T / \partial r = 0$ ($r = 0$). На границах «жидкость–стекло» [$\{r = R_{\text{h}}..R_{\text{in}}, z = H_{\text{bot}}\}, \{r = R_{\text{in}}, z = H_{\text{bot}}..(H_{\text{bot}} + h)\}$], «жидкость–медь» [$r = 0..R_{\text{h}}, z = H_{\text{bot}}$] и «стекло–медь» [$r = R_{\text{h}}, z = 0..H_{\text{bot}}$] учитываем равенство температур и тепловых потоков:

$$T_{l,\text{rod},s} = T_{\text{rod},s,l}, \kappa_{l,\text{rod},s} \frac{\partial T_{l,\text{rod},s}}{\partial n} = \kappa_{\text{rod},s,l} \frac{\partial T_{\text{rod},s,l}}{\partial n}.$$

Здесь индексы при T используются исключительно для удобства восприятия и понимания физического смысла граничных условий. Следует помнить, что функция температуры в модели одна.

В модели учитывается скорость движения свободной границы жидкости \vec{v}_{mesh} , вызванное течением жидкости и испарением. Нормальная к поверхности компонента скорости границы выражается как

$$\vec{v}_{\text{mesh}} \cdot \vec{n} = \left(\vec{v} - \frac{J}{\rho_1} \vec{n} \right) \cdot \vec{n}.$$

На границе жидкости и ячейки [$\{r = 0..R_{\text{in}}, z = H_{\text{bot}}\}, \{r = R_{\text{in}}, z = H_{\text{bot}}..H_{\text{bot}} + h\}$] скорость потока жидкости равна нулю, $\vec{v} = 0$, вследствие наличия вязкого трения и непротекания подложки и стенки ячейки.

На свободной поверхности жидкости использовались следующие граничные условия [18],

$$\frac{d\sigma}{d\tau} = \mu \left(\frac{\partial v_n}{\partial \tau} + \frac{\partial v_\tau}{\partial n} - v_\tau \frac{\partial \phi}{\partial \tau} \right), p - P_v = P_L + 2\mu \frac{\partial v_n}{\partial n},$$

где $\vec{\tau}$ – касательный к поверхности вектор, направленный перпендикулярно вправо, если смотреть вдоль направления вектора нормали (в производных по направлению вектору стрелочка сверху опущена для краткости), $P_L = \sigma(1/R_1 + 1/R_2)$ – давление Лапласа, R_1, R_2 есть главные радиусы кривизны на свободной поверхности, $d\sigma/d\tau = \sigma' \partial T / \partial \tau$, ϕ – угол между вектором $\vec{\tau}$ и осью r (или угол между вектором \vec{n} и осью z) [19]. Детали расчета $\partial \phi / \partial \tau$ описаны в работе [20]. Кроме того, на оси симметрии $v_r = 0$ и $\partial v_z / \partial r = 0$ [19].

Скорость частиц на свободной поверхности жидкости и на оси симметрии рассчитывается как $\vec{u} = \{v_r, v_z - u_{\text{sed}}\}$, где $u_{\text{sed}} = 2r_p^2(\rho_p - \rho_l)g / (9\mu)$ – скорость седиментации частиц.

На границах жидкости и ячейки условие отражения частиц с сохранением кинетической энергии имеет вид $\vec{u} = \vec{u}_c - 2\vec{n} \cdot (\vec{n} \cdot \vec{u}_c)$, где \vec{u}_c – скорость частицы при столкновении с границей.

Так как контактная линия значительно удалена от центра ячейки, где происходит сборка кластера, используем простое граничное условие для краевого угла смачивания $\theta = \pi/2$.

Замыкающие соотношения

Плотность потока пара определяется по формуле Герца-Кнудсена, в которой учитывается зависимость давления насыщенных паров от температуры [10]:

$$J = \alpha_{\text{evap}} \sqrt{\frac{M}{2\pi RT_{\text{sat}}}} (P_{\text{sat}}(T) - P_v), \quad (7)$$

где коэффициент аккомодации $\alpha_{\text{evap}} = 9 \cdot 10^{-4}$ (значение этого параметра подбиралось так, чтобы время испарения примерно соответствовало экспериментальному значению), R есть газовая постоянная, P_{sat} – давление насыщенного пара, которое рассчитывалось по эмпирической формуле [10]:

$$P_{\text{sat}} = A_2 + \frac{A_1 - A_2}{1 + \exp((T_l - x_0) / \Delta x)},$$

где $A_1 = -1762.7$, $A_2 = 503914.8$, $x_0 = 383.2$, $\Delta x = 20.5$.

В этой модели используем линейную аппроксимацию для описания зависимости поверхностного натяжения от температуры, $\sigma = \sigma_0 + \sigma'(T_l - T_0)$.

Численное моделирование

Для решения поставленной задачи использовалось программное обеспечение *COMSOL Multiphysics* (версия 6.2), были выбраны следующие модули: “*Laminar flow*”, используемый для расчета полей скорости и давления потока однофазной жидкости в режиме ламинарного течения; “*Heat transfer in solids and fluids*”, предназначенный для моделирования теплопередачи в твердых телах и жидкостях посредством теплопроводности, конвекции и излучения; “*Particle tracing for fluid flow*” для моделирования и отслеживания движения микро- и макроскопических частиц в жидкости.

Использовалась двумерная геометрия осесимметричной поверхности, было построено несколько подобластей (для медного стержня, ячейки и жидкости в соответствии с табл. 1). Для подобласти, соответствующей жидкому слою, определена подвижная сетка с предельно

минимальным размером ячеек сетки (extremely fine), для остальных подобластей выбрано мельчайшее значение размера ячеек сетки (fine). Кроме того, использовалось адаптивное уточнение сетки (Adaptive Mesh Refinement).

Для геометрии, соответствующей стержню, был выбран материал “copper” из библиотеки *COMSOL Multiphysics*. Для других областей удельная теплоемкость, теплопроводность и плотность, а также динамическая вязкость для изопропилового спирта были прописаны вручную. Значения всех используемых параметров соответствуют табл. 2.

Для моделирования были созданы два решателя: *Study1* для расчета гидродинамики и *Study2* для отслеживания движения частиц. В *Study1* использовался нелинейный метод с постоянным коэффициентом демпфирования, равным 0.9, максимальное число итераций равно 10, максимальный допустимый шаг по времени 0.1 с. В *Study2* использовался автоматический высоконелинейный метод с начальным и минимальным коэффициентами демпфирования 10^{-4} и 10^{-8} соответственно. Число итераций равно 250, максимальный допустимый шаг по времени 0.5 с.

Чтобы имитировать перекачивание частиц по поверхности дна ячейки, была введена подобласть Ω_{bot} вблизи дна с отключенной силой тяжести, $\Omega_{\text{bot}} \in [r = R_{\text{h}}..R_{\text{in}}; z = 0..h_{\text{crit}}]$, где $h_{\text{crit}} \ll h_0$. Для расчетов взято значение $h_{\text{crit}} = d_p$. Этот грубый подход не позволяет учесть силу трения качения, то есть является нулевым приближением.

В результате численного расчета были построены температурное поле ячейки с жидкостью, поле скорости для жидкости и траектории частиц для разных моментов времени. Все расчеты выполнялись до момента времени, когда толщина пленки в каком-либо месте достигала значения, близкого к критической толщине h_{crit} , так как далее по времени следует ожидать термокапиллярный разрыв пленки с образованием локального сухого пятна.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Проведена серия вычислительных экспериментов для разных значений объемной плотности теплового потока Q и количества частиц в системе N_{tot} . Каждый расчет движения частиц повторялся пять раз, после чего результат усреднялся по всем испытаниям. Для расчета погрешности использовалось среднеквадратичное отклонение (начальное расположение частиц генерировалось случайным образом), (рис. 2). Поле температуры и скорости потока рассчитывалось по одному разу для каждого из рассматриваемых значений параметров N_{tot} и Q . Время расчета зависит от N_{tot} и варьирует от нескольких часов до одного или двух дней (Intel(R) Core(TM) i7–5820K, CPU 3.3 GHz, RAM 32 Gb, SSD 128 Gb (system), SSD 1 Tb (data)).

В эксперименте [10] в районе нагреваемого медного стержня наблюдалась сборка кластера частиц. Наши

расчеты позволяют понять, как степень нагрева влияет на долю частиц, попадающих в кластер. На рис. 2а показана зависимость N_c/N_{tot} от значения параметра Q . Здесь N_c – количество частиц, попавших в кластер. С ростом Q величина N_c/N_{tot} уменьшается вне зависимости от выбранного значения N_{tot} (50, 100 или 125). Это связано с тем, что скорость термокапиллярного потока зависит от Q . Например, на рис. 3 показано увеличение значения максимальной скорости v_{max} при возрастании объемной плотности теплового потока. Рассмотрены лишь малые концентрации, поэтому стоит предположить, что, возможно, при большем числе частиц динамика, показанная на рис. 2а, изменится. Чтобы делать прогнозы для случая с высокой концентрацией частиц, необходимо при построении модели учесть зависимость вязкости от концентрации, так как это влияет на гидродинамику. Кроме того, при большом числе частиц в кластере образуется сложная структура с множеством микропор, представляющих собой пустоты между упакованными микрочастицами. В этих порах необходимо учитывать фильтрационные потоки. Жидкость проходит через поры, в то время как переносимые потоком частицы застревают в этой структуре при столкновении с ней.

К сожалению, *COMSOL Multiphysics* не позволяет учесть размер частиц, так как предполагается, что частицы – это точки. Таким образом, наша модель не позволяет прогнозировать форму кластера. Возможно, объем частиц можно имитировать с помощью какого-либо потенциала взаимодействия. Но здесь для простоты предполагается, что частицы не взаимодействуют. Другой способ учета объема частиц заключается в разработке алгоритма расчета и кода программы, например, как это было сделано ранее при описании испарительной самосборки частиц в высыхающей на подложке капле [21].

Доля частиц, оказавшихся в центральном кластере, растет с течением времени (рис. 2б). Попадет частица в кластер или продолжит свой путь, уносимая циркулирующим потоком Марангони, в рамках предложенной модели зависит от противоборства силы тяжести F_g и силы вязкого трения F_d , если не брать во внимание силу Архимеда, так как $F_g > F_A$. На наш взгляд, это один из основных механизмов, влияющих на формирование кластера, который инициирует этот процесс. Но в реальности на дальнейший рост кластера могут дополнительно влиять и другие факторы: изменение вязкости из-за локального роста концентрации, столкновение частиц, трение частиц о дно ячейки при переносе (трение качения) и прочее.

Оценим критическое значение вертикальной компоненты скорости потока, относительно которого можно судить о преобладании седиментации или переносе частицы восходящим потоком. Частица, оказавшаяся в районе медного стержня, попадает в кластер, если $F_g \downarrow_z > F_d \downarrow_z$. Это условие можно записать как $m_p g > (v_z - u_z)m_p/\tau_p$. При переносе частиц в сторону нагревателя вдоль дна ячейки потоком жидкости продолжительное время их вертикальная скорость

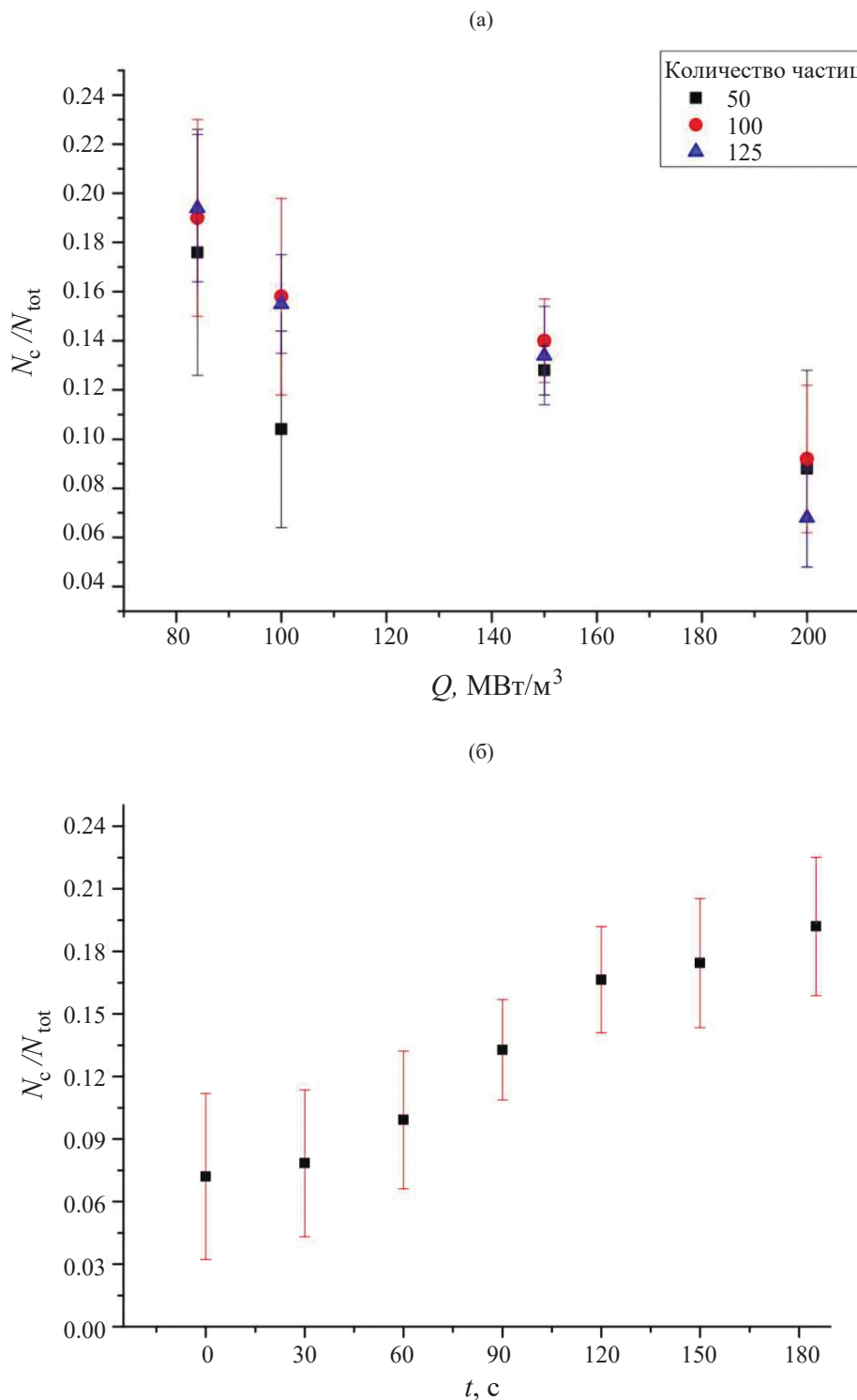


Рис. 2. Зависимость доли частиц в центральном кластере (а) от степени нагрева и (б) от времени ($Q = 84$ МВт/м³, $N_{tot} = 125$)

$u_z = 0$, поэтому получаем неравенство $\tau_p g > v_z$. Частица попадает в кластер, если вертикальная компонента скорости потока \vec{v} меньше скорости $\tau_p g$. В противном случае частица захватывается восходящим потоком,

и ее циркуляция продолжается. Соответственно, чем выше скорость v_{max} ($v_z \sim v_{max}$) (рис. 3), тем больше шансов, что та или иная частица будет вынесена из кластера (рис. 2а).

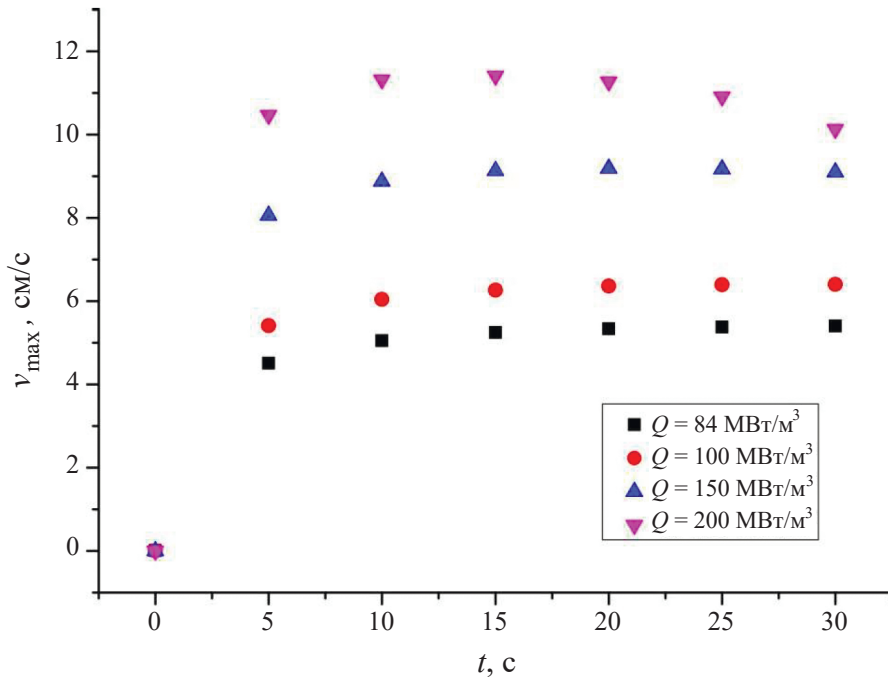


Рис. 3. Зависимость максимальной скорости термокапиллярного потока от времени для нескольких значений Q (погрешность численного расчета меньше размера маркера)

Термокапиллярный эффект приводит к тому, что при неравномерном нагреве форма свободной поверхности искривляется (рис. 4). Это качественно согласуется с результатами по 1D-модели [10] и связано с тем, что возникает градиент поверхностного натяжения из-за перепада температуры. У стенки ячейки жидкий слой

становится выше, так как туда перетекает жидкость, ведь там поверхностное натяжение выше из-за более низкой температуры (рис. 5). В центральной части ячейки наблюдается просадка в толщине жидкого слоя вплоть до появления термокапиллярного разрыва с образованием локального сухого пятна (рис. 5).

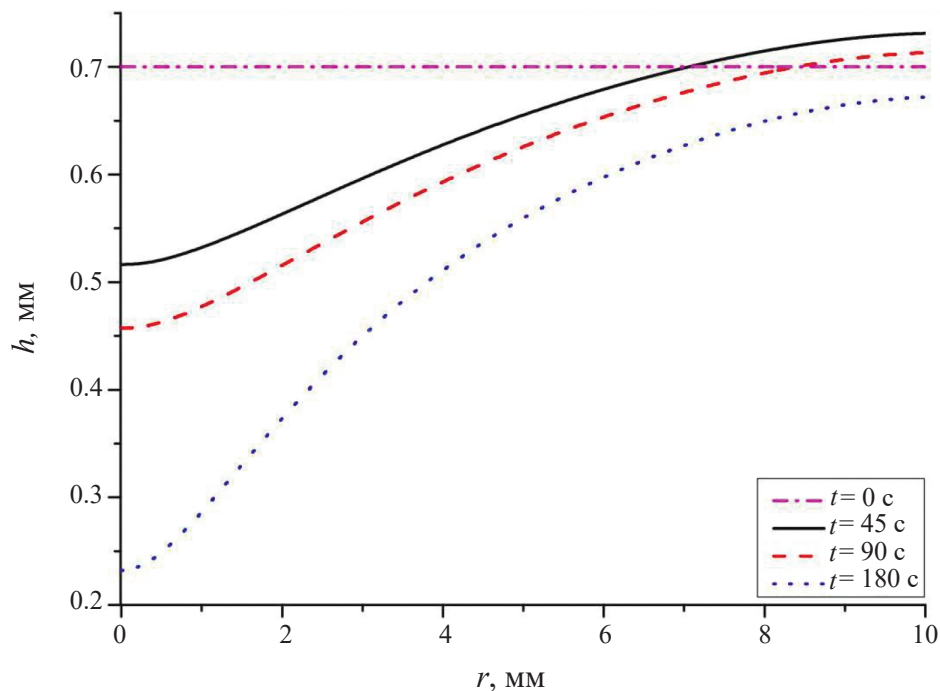


Рис. 4. Высота жидкого слоя в ячейке в разные моменты времени ($Q = 84$ MBT/m³)

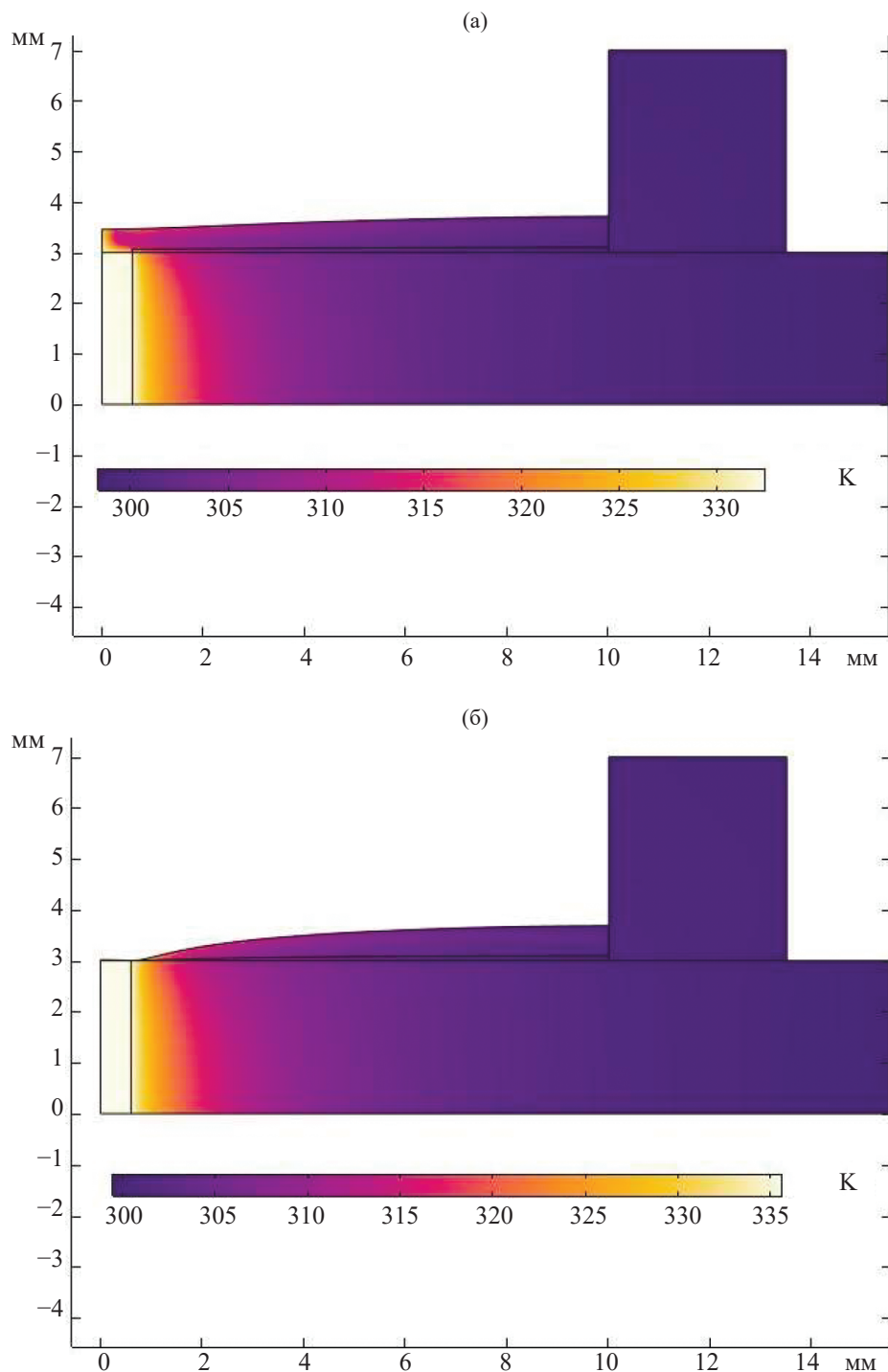


Рис. 5. Поле температуры жидкости и ячейки для (а) $t = 90$ с и (б) 185.4 с ($Q = 84$ МВт/м³)

Дополнительное влияние на утоньшение жидкого слоя в районе нагревателя оказывает неравномерное испарение, так как чем выше температура жидкости, тем более интенсивное испарение происходит (рис. 6). Со временем, по мере

испарения, высота жидкого слоя понижается (рис. 4). При $Q = 84$ МВт/м³ перепад температуры ΔT примерно составляет 34 К. Определим значение числа Марангони, $Ma = -\sigma' \Delta T h_0 / (\mu D_T) \approx 1.258 \cdot 10^4$, где коэффициент температуропроводности $D_T = \kappa_1 / (\rho_1 c_1) \approx 6.3 \cdot 10^{-8}$ м²/с. При

таких относительно больших перепадах температуры, рассматриваемых здесь, возникает сильная термокапиллярная конвекция, описываемая предложенной моделью. Но стоит заметить, что температура не должна превышать критического значения, при котором возникнет кипение жидкости. Кипение может оказать негативное воздействие на самосборку частиц. Кроме того, модель не описывает такой процесс.

Поле скорости потока жидкости представлено на рис. 7. Термокапиллярный поток направлен вдоль свободной поверхности от центра к стенке ячейки из-за положительного градиента поверхностного натяжения (рис. 7). Вдоль дна ячейки поток направлен от стенки к нагревателю. Именно этот циркулирующий поток и приводит к переносу микросфер (рис. 8, мультимедиа доступно онлайн). Максимальное значение скорости потока наблюдается на свободной поверхности жидкого слоя в районе нагревателя, так как здесь наибольшее значение градиента температуры на границе «жидкость–воздух».

Чтобы понять какой из двух процессов, испарение или термокапиллярный поток, оказывает большее влияние на утоньшение жидкого слоя в районе нагревателя, сравним два характерных времени. Оценим характерное время испарения как $t_e = h_0/v_e$, где характерная скорость испарения $v_e = J_{\max}/\rho_l$ (для $Q = 84 \text{ МВт/м}^3$ $J_{\max} \approx 3.25 \cdot 10^{-3} \text{ кг/(м}^2 \cdot \text{с)}$ согласно рис. 6). Характерное время термокапиллярной конвекции может быть оценено по формуле $t_M = h_0/v_M$, где характерная

скорость потока Марангони $v_M \approx 2.5 \cdot 10^{-2} \text{ м/с}$ (рис. 7б). Подставив значения параметров, получаем $t_e \approx 169 \text{ с}$ и $t_M \approx 0.03 \text{ с}$. Стремительное утоньшение жидкой пленки в центральной части ячейки связано с термокапиллярной конвекцией, так как $t_M \ll t_e$. Сухое пятно образуется в результате термокапиллярного разрыва, при котором центральный кластер оказывается вне жидкости. Дальнейшее испарение оставшейся жидкости из ячейки и перенос взвешенных в ней частиц не влияют на размеры этого кластера. Оценим также время тепловой релаксации, $t_r = h_0^2/D_T \approx 7.8 \text{ с}$. Из соотношения $t_M \ll t_r$ следует, что перенос тепла в жидкости за счет конвекции преобладает над теплопроводностью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Управление термокапиллярной сборкой кластера частиц важно для различных приложений в области создания фотонных кристаллов для микро- и оптоэлектроники, формирования мембран для биотехнологий и очистки поверхности для лабораторий на чипе. Важно понять основные механизмы, влияющие на сборку таких кластеров, что наблюдалось ранее в экспериментах [10, 11].

В текущей работе предложена двумерная математическая модель, описывающая перенос частиц термокапиллярным потоком в неравномерно нагретой ячейке в процессе испарения жидкости. Ранее предложенная одномерная модель учитывала лишь перенос частиц

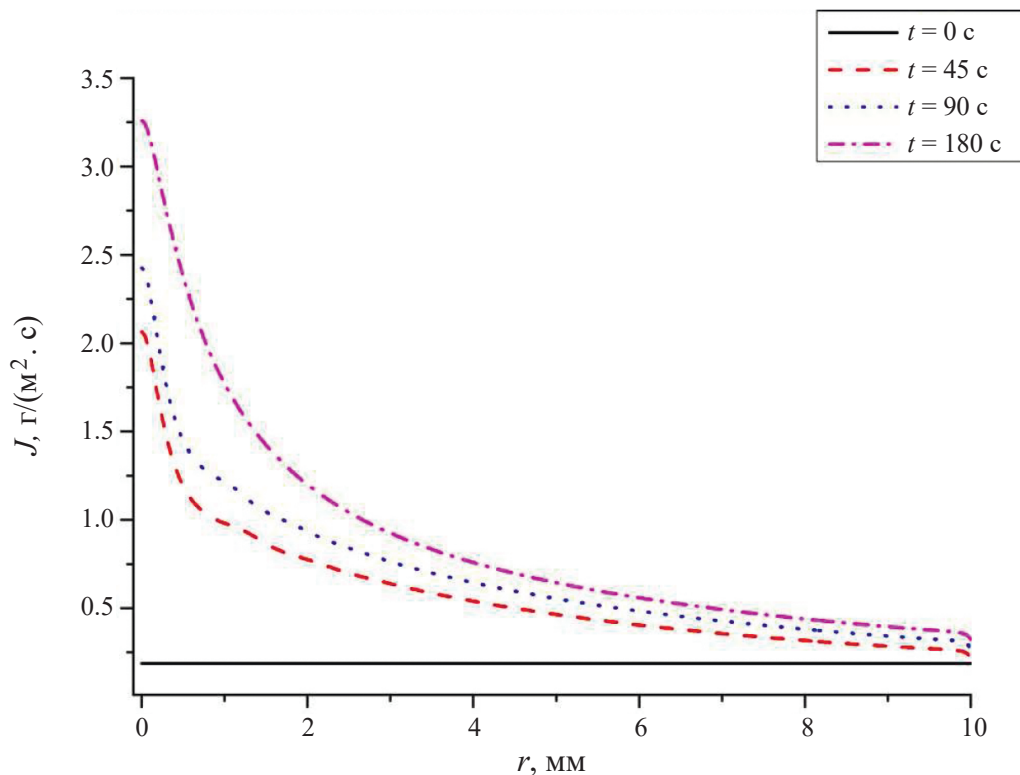


Рис. 6. Локальная плотность потока пара в несколько последовательных моментов времени ($Q = 84 \text{ МВт/м}^3$)

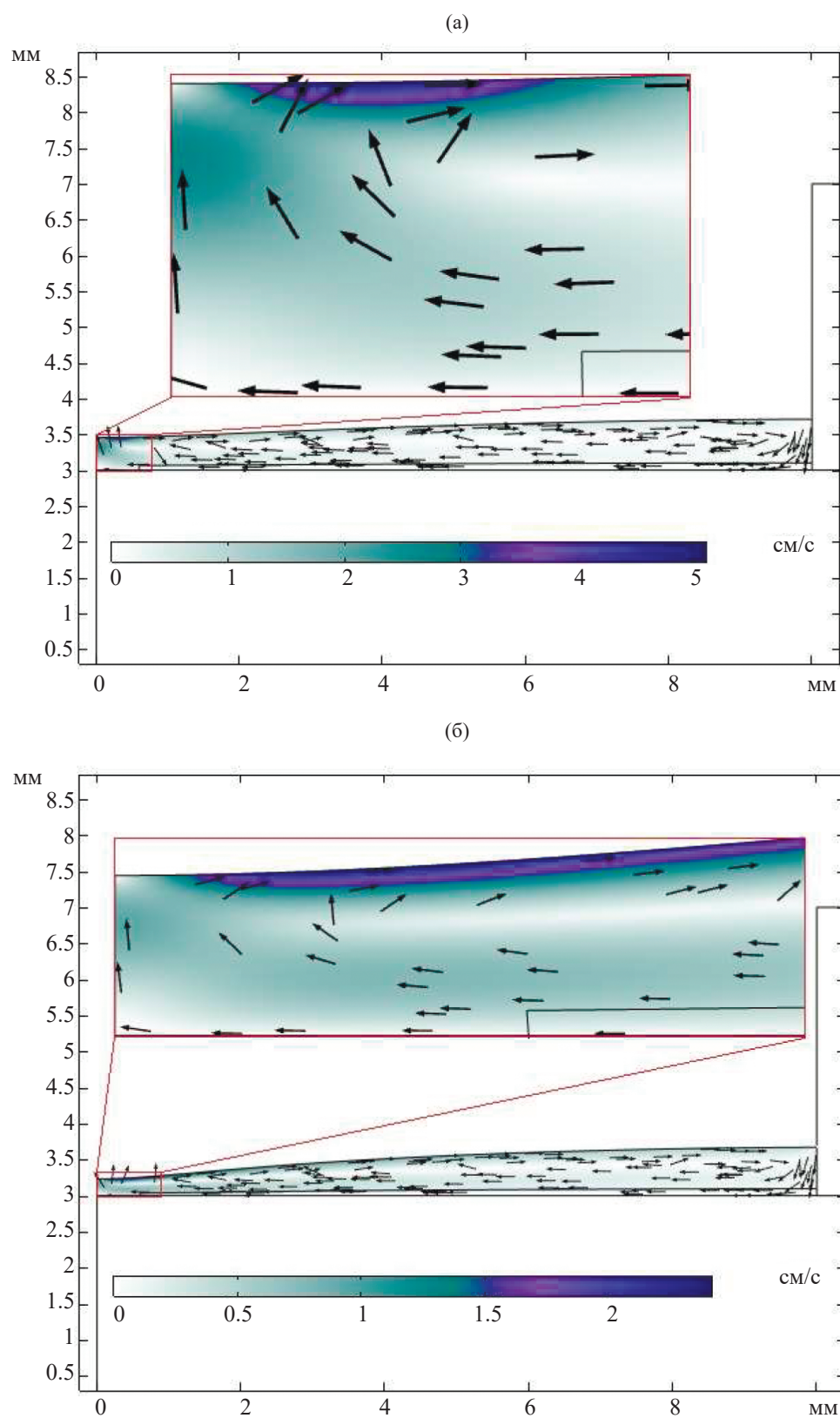


Рис. 7. Поле скорости потока жидкости для (а) $t = 90$ с и (б) 180 с ($Q = 84$ МВт/м³)

$t = 185.2$ с

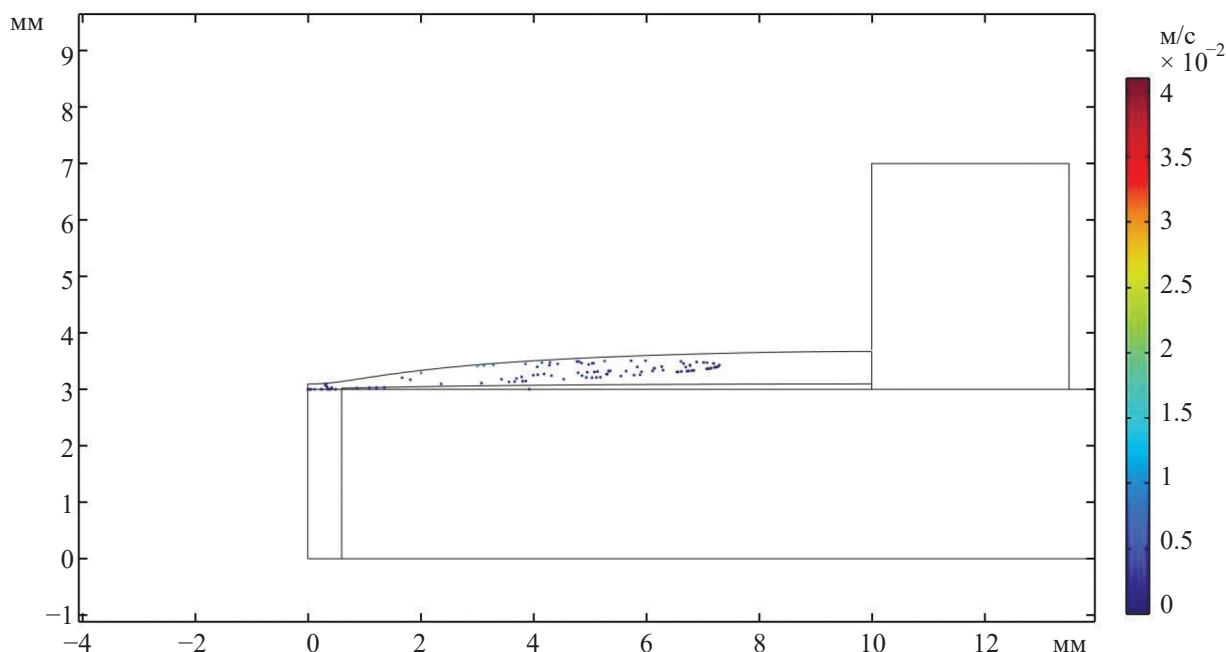


Рис. 8. Динамика частиц при $Q = 84$ МВт/м³ и $N_{\text{tot}} = 125$ (видео доступно в дополнительном материале)

вблизи подложки [10]. Но в реальности часть частиц может циркулировать и в объеме жидкости благодаря восходящему потоку в районе нагревателя. В работе [10] перенос частиц описывался уравнением конвекции–диффузии. Здесь явным образом моделируется движение каждой отдельной частицы. Это позволило нам изучить один из основных механизмов, инициирующих зарождение кластера частиц. Будет ли та или иная частица циркулировать вместе с потоком или остановится в районе нагревателя, положив начало зарождающемуся кластеру, зависит от соотношения силы тяжести и силы вязкого трения. Результаты численных расчетов показали, что с ростом объемной плотности теплового потока Q уменьшается доля частиц, попадающих в кластер. Это связано с тем, что при увеличении Q

термокапиллярный поток усиливается, что уменьшает вероятность попадания частиц в кластер.

Стоит заметить, что данная модель ориентирована на малую концентрацию частиц. Вязкость жидкости может варьировать в зависимости от локальной концентрации. Кроме того, в дальнейшем для построения более точных моделей необходимо учитывать взаимодействие частиц друг с другом, например, их столкновение, и взаимодействие «частица–подложка», например, трение качения. Для описания формы кластера необходимо принимать во внимание объем частиц (две частицы не могут одновременно занимать одно и то же пространство даже частично). Возможно, важным может оказаться тот факт, что скопление частиц образует сеть пор, через которую происходит фильтрация жидкости.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kolegov K.S., Barash L.Y. Applying droplets and films in evaporative lithography // *Advances in Colloid and Interface Science*. 2020. V. 285. P. 102271. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2020.102271>
2. Malla L.K., Bhardwaj R., Neild A. Colloidal deposit of an evaporating sessile droplet on a non-uniformly heated substrate // *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2019. V. 584. P. 124009. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2019.124009>
3. Lama H., Satapathy D.K., Basavaraj M.G. Modulation of central depletion zone in evaporated sessile drops via substrate heating // *Langmuir*. 2020. V. 36. № 17. P. 4737–4744. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.0c00785>

4. *Li Y., Lv C., Li Z., Quéré D., Zheng Q.* From coffee rings to coffee eyes // *Soft Matter*. 2015. V. 11. № 23. P. 4669–4673.
<https://doi.org/10.1039/C5SM00654F>
5. *Zhang C., Zhang H., Zhao Y., Yang C.* An immersed boundary-lattice Boltzmann model for simulation of deposited particle patterns in an evaporating sessile droplet with dispersed particles // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2021. V. 181. P. 121905.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121905>
6. *Thokchom A.K., Majumder S.K., Singh A.* Internal fluid motion and particle transport in externally heated sessile droplets // *AIChE Journal*. 2016. V. 62. № 4. P. 1308–1321.
<https://doi.org/10.1002/aic.15098>
7. *Liu B., Wang S., Chai L., Achkar G.E., Chen A., Theodorakis P.E.* Experimental investigation of nanoparticles distribution mechanisms and deposition patterns during nanofluid droplet evaporation // *The European Physical Journal Applied Physics*. 2020. V. 92. № 1. P. 11101.
<https://doi.org/10.1051/epjap/2020200168>
8. *Parsa M., Harmand S., Sefiane K., Biggerelle M., Deltombe R.* Effect of substrate temperature on pattern formation of bidispersed particles from volatile drops // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2017. V. 121. № 48. P. 11002–11017.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b09700>
9. *Patil N.D., Bhardwaj R., Sharma A.* Self-sorting of bidispersed colloidal particles near contact line of an evaporating sessile droplet // *Langmuir*. 2018. V. 34. № 40. P. 12058–12070.
<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.8b00427>
10. *Al-Muzaiqer M.A., Kolegov K.S., Ivanova N.A., Fliagin V.M.* Nonuniform heating of a substrate in evaporative lithography // *Physics of Fluids*. 2021. V. 33. № 9. P. 092101.
<https://doi.org/10.1063/5.0061713>
11. *Al-Muzaiqer M.A., Ivanova N.A., Fliagin V.M., Lebedev-Stepanov P.V.* Transport and assembling microparticles via Marangoni flows in heating and cooling modes // *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2021. V. 621. P. 126550.
<https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2021.126550>
12. *Lee H.J., Choi C.K., Lee S.H.* Local heating effect on thermal Marangoni flow and heat transfer characteristics of an evaporating droplet // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2022. V. 195. P. 123206.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123206>
13. *Jain A.K., Denner F., van Wachem B.* Dispersion of particles in a sessile droplet evaporating on a heated substrate // *International Journal of Multiphase Flow*. 2024. V. 180. P. 104956.
<https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2024.104956>
14. *Kumar V.A., Sajith V., Sathian S.P.* Influence of nanoparticles on the evaporation of a nanodroplet from solid substrates: an experimental and molecular dynamics investigation // *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2021. V. 615. P. 126227.
<https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2021.126227>
15. *Goncharova O.N., Bekezhanova V.B.* Numerical simulation of thermocapillary convection with evaporation induced by boundary heating, // *Fluid Dynamics and Materials Processing*. 2024. V. 20. № 7. P. 1667–1686.
<https://doi.org/10.32604/fdmp.2024.047959>
16. *Kumar P.L., Thampi S.P., Basavaraj M.G.* Particle size and substrate wettability dependent patterns in dried pendant drops // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2020. V. 33. P. 024003.
<https://doi.org/10.1088/1361-648X/abb64e>
17. *Mansoor I., Stoeber B.* PIV measurements of flow in drying polymer solutions during solvent casting // *Experiments in Fluids*. 2011. V. 50. P. 1409–1420.
<https://doi.org/10.1007/s00348-010-1000-3>
18. *Barash L.Y.* Influence of gravitational forces and fluid flows on the shape of surfaces of a viscous fluid of capillary size // *Physical Review E*. 2009. V. 79. P. 025302.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.79.025302>

19. *Turchaninova M.N., Melnikova E.S., Gavrilina A.A., Barash L.Y.* Fluid flow structures in an evaporating sessile droplet depending on the droplet size and properties of liquid and substrate // *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. V. 1730. P. 012029.
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/1730/1/012029>
20. *Barash L.Y., Bigioni T.P., Vinokur V.M., Shchur L.N.* Evaporation and fluid dynamics of a sessile drop of capillary size // *Physical Review E*. 2009. V. 79. P. 046301.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.79.046301>
21. *Kolegov K.S., Barash L.Y.* Joint effect of advection, diffusion, and capillary attraction on the spatial structure of particle depositions from evaporating droplets // *Physical Review E*. 2019. V. 100. P. 033304.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.033304>