

MODELO DE LA EVAPORACIÓN DE UNA GOTA SÉSIL SOBRE UNA SUPERFICIE SÓLIDA

Moreno, Alejandro D.^{1,2}; Schuster, Jonathan M.^{1,2}; Manzur, Jorge O.¹; Rosenberger, Mario R.^{1,2}; Schvezov, Carlos E.^{1,2}

¹ Programa de Materiales Modelización y Metrología – Instituto de Materiales de Misiones

² Facultad de Ciencias Exactas, Químicas y Naturales. UNaM CONICET.

morenoalejandro@conicet.gov.ar

Palabras Clave: Ángulo de contacto; Gota sésil; Evaporación; Modelo Numérico.

Una gota sésil es una gota apoyada sobre la superficie de un sólido, es un sistema formado por tres fases, el sólido sobre el que se deposita la gota, el líquido que forma la gota y su vapor. Estos tres medios forman a su vez tres interfaces: la superficie externa de la gota (interfaz líquido-vapor), la superficie del sólido mojada (interfaz sólido-líquido) y la superficie del sólido sin mojar (interfaz sólido-vapor). La intersección de estas tres interfaces da lugar a una línea conocida como línea de tres fases o línea de contacto. Se define como el ángulo de contacto al ángulo que forma la tangente a la interfaz líquido-vapor con la superficie del sólido en el punto de contacto de las tres fases hacia el lado de la fase líquida.^[11] Idealmente, una gota de líquido sobre una superficie sólida (plana, homogénea, lisa, rígida e isotrópica) debe tener un valor único de ángulo de contacto en equilibrio, cuyo valor está determinado por las tensiones interfaciales entre el líquido y el sólido; el líquido y el vapor; y el sólido y el vapor. La ecuación básica de mojabilidad (ecuación de Young) se expresa como: $\cos \theta = \frac{\gamma^{SV} - \gamma^{SL}}{\gamma^{LV}}$ (1)

Donde $\gamma^{SV}, \gamma^{SL}, \gamma^{LV}$ son las tensiones interfaciales sólido-vapor, sólido-líquido y líquido-vapor y θ el ángulo de contacto^[11]. Resulta muy difícil determinar el ángulo de contacto en equilibrio utilizando la ecuación (1), y mucho menos su evolución, ya que γ^{SV} y γ^{SL} no son accesibles experimentalmente. El valor del ángulo de contacto es utilizado en la caracterización superficial de metales ya que define la mojabilidad de dicha superficie por el líquido y en el caso de usar agua permite clasificar al material como hidrófobo o hidrófilo^[9]; también es usado para el cálculo de la energía libre superficial del sólido utilizando modelos matemáticos^[16].

Existen pocos estudios relativos al modelado de la evaporación de una gota sésil sobre superficie sólida y en su gran mayoría son realizados sobre polímeros^{[2][3][4][5][6][7][8][10][12][13][15]}. La evaporación de una gota sésil puede dividirse en dos fases: la fase I (*pinned mode*) donde el área de contacto permanece constante y disminuye el ángulo de contacto y la fase II (*unpinned mode*) donde el área de contacto y ángulo de contacto disminuyen con el tiempo^[14].

En este trabajo se implementa un modelo matemático que predice la evolución del ángulo de contacto con respecto al tiempo durante la fase I de una gota sésil sobre una superficie de acero inoxidable.

Se asume que la gota sésil se ajusta al modelo de casquete esférico durante la Fase I de la evaporación^[14]. Se utilizan una combinación de parámetros para definir la forma de la gota: el radio de contacto del área mojada (r), la altura de la gota (h) y el ángulo de contacto (θ). En este trabajo los parámetros del modelo son el radio de contacto y el ángulo de contacto. Es posible determinar el volumen de la gota y el área del casquete esférico en función de los parámetros seleccionados^[12], cuyas ecuaciones se detallan a continuación: $V = \frac{\pi r^3 (2 + \cos \theta)}{3 (1 + \cos \theta)} \tan \frac{\theta}{2}$ (2) $A = \frac{2\pi r^2}{\sin \theta} \tan \frac{\theta}{2}$ (3)

Se deduce un modelo numérico que considera el proceso de evaporación como dependiente de la variación del ángulo de contacto respecto al tiempo y considerar el radio de contacto constante. La ecuación diferencial que describe la razón de evaporación y la aplicación de la regla de cadena, asumiendo que el radio de



contacto es constante en todo el proceso de evaporación, se obtiene: $\frac{dV}{dt} = \frac{\partial V}{\partial r} \frac{dr}{dt} + \frac{\partial V}{\partial \theta} \frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial V}{\partial \theta} \frac{d\theta}{dt}$ (4)

Luego de la ecuación del volumen se obtiene: $\frac{\partial V}{\partial \theta} = \frac{\pi r^3}{(1+\cos \theta)^2}$ (5)

Si el radio es constante, la tasa de evaporación de la gota se considera constante y se produce por un proceso de difusión de vapor en el aire. En consecuencia, la tasa de evaporación puede calcularse usando la primera ley de Fick y está dada por: $\frac{dV}{dt} = -\frac{D}{\rho} \int_S \vec{\nabla} c \cdot d\vec{A} = -\frac{D}{\rho} \int_S \frac{\partial c}{\partial n} dA$ (6)

Donde D es el coeficiente de difusión del vapor de agua, c es la concentración, ρ la densidad del agua y la integral se realiza sobre la superficie S del casquete esférico. Para evaluar la integral Alsan et al.^[12], propone aproximar el gradiente de concentración en la superficie de la gota utilizando un método de diferencias, que es adoptado en este trabajo: $\frac{\partial c}{\partial n} = -\frac{c_\infty - c_{sat}}{r} \sin \theta = -c_{sat} \frac{\phi - 1}{r} \sin \theta$ (7)

Donde ϕ la humedad relativa del ambiente y c_{sat} es la concentración de saturación. Al evaluar la integral (6) se obtiene: $\frac{dV}{dt} = \frac{2\pi D r}{\rho} c_{sat} (\phi - 1) \tan \frac{\theta}{2}$ (8)

Se ha utilizado para los cálculos del modelo de Alsan et al.^[12], sin embargo otros autores han reportado que la transferencia de vapor desde la gota al aire permanece invariable en el tiempo^{[1][14]}. Es posible introducir una simplificación al planteo considerado que la evaporación se produce a una tasa constante para un ángulo de contacto dado. El caso más práctico es considerar el flujo en una gota perfectamente hemisférica, es decir, con un ángulo de contacto de $\theta = 90^\circ$, con lo cual $\tan \frac{\theta}{2} = 1$. De las ecuaciones (4), (5) y (8) se obtiene la ecuación diferencial que se utiliza en este trabajo para predecir la variación del ángulo de contacto con respecto al tiempo en el proceso de evaporación:

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{2Dc_{sat}(\phi-1)}{\rho r^2} (1 + \cos \theta)^2 \quad (9)$$

Al especificar un ángulo de contacto inicial θ_0 , la ecuación (9) predice la evolución del ángulo de contacto de la gota conforme avanza el proceso de evaporación. La evaporación de la gota se asume que se desarrolla en la superficie de la misma en un proceso estacionario. La pérdida de energía latente en el proceso de evaporación se recupera por una transferencia de energía del ambiente con el líquido, permitiendo que la interfaz de la gota evolucione hacia una temperatura estacionaria menor que puede ser estimada a través de las propiedades del ambiente^[1]. Para este trabajo se considera el caso límite isotérmico en que la gota, la superficie y el ambiente se encuentran en equilibrio térmico.

$T_s = T_i = T_\infty [K]$	$D [m^2/s]$	$\rho [kg/m^3]$	$C_{sat} [kg/m^3]$	ϕ
298	$0.22 \cdot 10^{-4}$	997.883	$18.88 \cdot 10^{-3}$	0.55

Tabla 1. Valores utilizados para las propiedades físicas del modelo

Las ecuación (9) es posible integrarla para obtener una solución exacta dada por la ecuación: $\frac{(2+\cos \theta) \sin \theta}{3(1+\cos \theta)^2} = \frac{2D\Delta c}{\rho r^2} t + K$ (10)

Siendo K una constante de integración a determinar en función de las condiciones iniciales. Para resolver el modelo se optó por resolver la ecuación (9) debido a la simplicidad que ofrece la misma frente a la no linealidad de la ecuación (10). Se utilizó el método de Runge-Kutta de cuarto orden implementado en Octave 4.0 Para la simulación se utilizan los valores de las propiedades físicas indicadas en la Tabla 1 obtenidas de la literatura. Para la simulación se consideró los resultados reportados en Schuster et al.^[14], quienes midieron el ángulo de contacto y la altura en intervalos de un minuto utilizando agua desionizada depositada sobre acero inoxidable 316 para estudiar el proceso de evaporación.

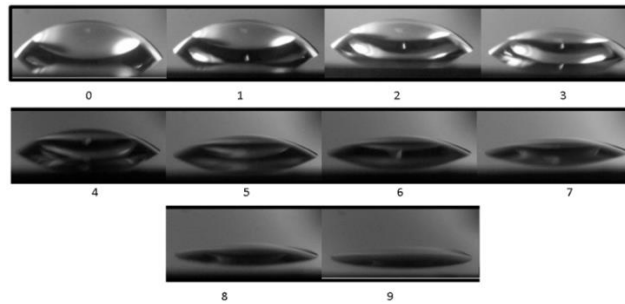


Figura 2. Evolución de la gota sésil en condiciones experimentales durante la fase I. Obsérvese el radio de contacto constante y la variación del ángulo de contacto. Se muestra el tiempo en minutos. Imágenes tomadas en el grupo para el trabajo de la referencia nº15

Se presentan los resultados obtenidos en la simulación comparándolos con los datos del desarrollo experimental de una gota representativa cuyo ángulo de contacto inicial es de 52.59° y un radio de contacto fijo de 1.07 mm (Fig. 2). Estos datos fueron ingresados como condiciones iniciales del modelo y se calculó la evolución del ángulo de contacto en un intervalo de 9 minutos que comprende la fase I de la evaporación, los cuales arrojan un ajuste hasta los primeros 5 minutos del proceso, con un máximo error relativo de 2.4%, Fig. 3. Los siguientes 4 minutos la simulación sobrestima el valor del ángulo de contacto con un máximo error relativo de 22%.

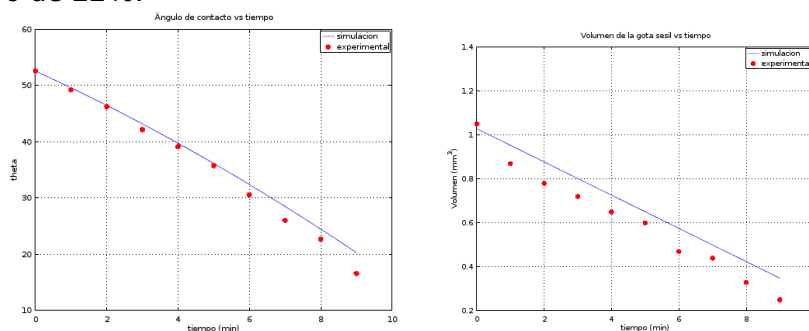


Figura 3. a) Comparación de la evolución ángulo de contacto calculado por el modelo respecto a los valores experimentales. b) Comparación de la evolución del volumen de la gota calculado por el modelo respecto a los valores experimentales.

Se calcularon los valores del volumen utilizando la ecuación (2) a partir de los datos experimentales y los ángulos de contactos predichos^{b)} por el modelo. Debido a la suposición de una tasa de evaporación constante, el modelo ajusta el comportamiento lineal del volumen respecto al tiempo pero sobrestima los valores experimentales, ver Figura 3b. Los datos experimentales son correlacionados con una caída en promedio de $0.074 \pm 0.019 \text{ mm}^3/\text{min}$, valor que puede ser estimado a través de la tasa de evaporación simplificada de la ecuación (8), arrojando un valor de $-0.075557 \text{ mm}^3/\text{min}$, aproximadamente un 2% de error en la estimación.

Se presentó un modelo numérico de evaporación de una gota sésil sobre una superficie sólida inerte para el caso isotérmico.

El modelo provee una buena aproximación a los ángulos de contacto de la gota en la fase I de la evaporación durante los primeros minutos pero sobrestima los valores para al final del proceso. Si bien durante todo el proceso el modelo sobrestima los datos experimentales, esto podría deberse a la estimación de los parámetros ambientales en condición de experimentación ya que el modelo es muy sensible a la variación de dichos parámetros. Se encontró un buen ajuste de la tasa de evaporación calculada con el modelo y la que se obtuvo del ajuste lineal de los resultados experimentales. Se observó que los puntos experimentales, excepto el primer valor, apoyan la propuesta de un modelo de variación constante del volumen en función del tiempo, por lo que el modelo puede considerarse de acuerdo con los resultados experimentales.



REFERENCIAS

1. Cazabat, A.M., & Guéna, G. (2010). *Soft Matter*, 6(12), 2591-2612.
2. Erbil, H.Y., & Meric, R.A. (1997). *The Journal of Physical Chemistry B*, 101(35), 6867-6873.
3. Erbil, H.Y., McHale, G., Rowan, S.M., & Newton, M.I. (1999). *Journal of adhesion science and technology*, 13(12), 1375-1391.
4. Erbil, H.Y. (1998). *The Journal of Physical Chemistry B*, 102(46), 9234-9238.
5. Erbil, H.Y., McHale, G., & Newton, M.I. (2002). *Langmuir*, 18(7), 2636-2641.
6. Gatapova, E.Y., Semenov, A.A., Zaitsev, D.V., & Kabov, O.A. (2014). *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 441, 776-785.
7. Gelderblom, H., Marin, A.G., Nair, H., van Houselt, A., Lefferts, L., Snoeijer, J.H., & Lohse, D. (2011). *Physical Review E*, 83(2), 026306.
8. Kim, J.H., Ahn, S.I., Kim, J.H., & Zin, W.C. (2007). *Langmuir*, 23(11), 6163-6169.
9. Lattner, D., & Jennissen, H. P. (2009). *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, 40(1-2), 108-116.
10. Madrid, M.A., Aguirre Varela, G.G., Castellano, N.E., & Avila, E.E. (2007, June). *ANALES AFA* (Vol. 19, No. 1).
11. Marmur, A. (2006). *Soft Matter*, 2(1), 12-17.
12. Meric, R.A., & Erbil, H.Y. (1998). *Langmuir*, 14(7), 1915-1920.