



Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

С. Ш. Рехвиашвили, А. А. Сокуров, Моделирование свойств малой капли на частично смачиваемой поверхности твердого тела, *ЖТФ*, 2024, том 94, выпуск 4, 554–560

DOI: 10.61011/JTF.2024.04.57525.267-23

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 13.58.211.135

8 января 2025 г., 06:55:55



01

Моделирование свойств малой капли на частично смачиваемой поверхности твердого тела

© С.Ш. Рехвиашвили, А.А. Сокуров

Институт прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН,
360000 Нальчик, Россия
e-mail: rsergo@mail.ru

Поступило в Редакцию 25 октября 2023 г.
В окончательной редакции 3 февраля 2024 г.
Принято к публикации 22 февраля 2024 г.

Приведено аналитическое и численное моделирование ряда физических свойств малой капли, лежащей на частично смачиваемой поверхности твердого тела в условиях термодинамического равновесия. Методика моделирования основана на применении парного межатомного потенциала Леннарда–Джонса и континуального приближения для взаимодействующих атомов. Для вычисления параметров потенциала использована теория функционала электронной плотности в приближении электронного газа. Выведены новые формулы для потенциальной энергии взаимодействия капли с подложкой и удельной работы адгезии, а также сформулировано условие нарушения устойчивости малой капли. Численные расчеты выполнены для системы Li (малая капля)–Ni (подложка).

Ключевые слова: метод функционала электронной плотности, малая капля, удельная работа адгезии, устойчивость, континуальное приближение, парное межатомное взаимодействие.

DOI: 10.61011/JTF.2024.04.57525.267-23

Введение

Малые капли жидкостей и частицы твердых материалов с размерами в единицы — десятки нанометров на поверхностях твердых тел представляют как теоретический, так и практический интерес. Наибольшее распространение в теоретических исследованиях этих нанобъектов получили методы молекулярной динамики и Монте-Карло [1–3]. Даже приближительный подсчет количества опубликованных статей, в которых использовались данные методы, довольно затруднителен. Менее распространенными, к сожалению, стали аналитические термодинамические и статистические методы исследования, хотя они и позволяют получать ценные результаты (см. работы [4–12] и ссылки в них). На практике моделирование и прогнозирование свойств малых капель и частиц на поверхностях твердых тел весьма важно для различных приложений в нанотехнологиях, микроэлектронике и микрофлюидике [13,14].

Известно, что единичные трехмерные островки конденсированной фазы на поверхности твердого тела формируются по механизму Вольмера–Вебера, когда взаимодействие атомов этой фазы между собой сравнимо или сильнее, чем их взаимодействие с атомами подложки [15]. В зависимости от температуры и состава эти островки могут находиться как в жидком (капля), так и в твердом (частица) состоянии. В случае с каплей при изменении термодинамических условий возможен переход от частичного смачивания поверхности с крайним углом $\theta < \pi/2$ к полному смачиванию, когда $\theta \rightarrow 0$. Такой переход правомерно отнести к фазовому переходу первого рода, так как в данном случае производные

термодинамических потенциалов по температуре претерпевают скачки [16]. Заметим, что фазовый переход смачивания в области малых размеров капель имеет некоторые общие черты с первичной кристаллизацией. Вследствие снижения поверхностного натяжения и действия сил притяжения со стороны подложки малая капля может очень быстро растекаться, превращаясь в структурно жесткую тонкую пленку, толщина которой соответствует области действия этих сил. Процесс быстрого растекания жидкости по частично или плохо смачиваемой поверхности иногда называют суперрастеканием (англ. superspreading). Физико-химические причины этого явления сейчас активно обсуждаются [17].

Настоящая работа посвящена моделированию равновесных термодинамических свойств малой капли на частично смачиваемой и атомарно гладкой поверхности. Теоретический подход основан на применении парного межатомного потенциала Леннарда–Джонса (ЛД) и аддитивного континуального приближения [18]. Для расчета параметров межатомного потенциала используется метод функционала электронной плотности; электронные плотности берутся в приближении Хартри–Фока с учетом оболочечной структуры взаимодействующих атомов. Проведены численные расчеты потенциальной энергии взаимодействия капли с подложкой и удельной работы адгезии. Сформулировано условие нарушения механической устойчивости капли с помощью обобщения уравнения Лапласа. Подход справедлив не только для капель, но и для разреженных островковых пленок, в которых расстояния между отдельными островками превышают радиус действия межатомных сил.

1. Расчет параметров потенциала ЛД

В работе для моделирования свойств лежащей капли нами предлагается использовать парный межатомный потенциал ЛД, параметры которого вычисляются из теории функционала электронной плотности [19,20]. При этом потенциал ЛД уже перестает быть чисто эмпирическим.

В разд. 1 во всех формулах используется атомная система единиц ($\hbar = e = m_e = 1$). Рассматривается невалентное взаимодействие двух атомов. Кулоновская составляющая потенциала взаимодействия включает в себя отталкивание между ядрами, отталкивание между электронными облаками и притяжение между ядрами и электронными облаками атомов:

$$\varphi_1 = \frac{Z_a Z_b}{r} + \iint \frac{\rho_a(\mathbf{r}_1)\rho_b(\mathbf{r}_2)}{r_{12}} d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 - Z_b \int \frac{\rho_a(\mathbf{r}_1)}{r_{1b}} d^3\mathbf{r}_1 - Z_a \int \frac{\rho_b(\mathbf{r}_2)}{r_{2a}} d^3\mathbf{r}_2,$$

где индексы „a“ и „b“ обозначают взаимодействующие атомы, r — расстояние между атомами, $Z_{a,b}$ и $\rho_{a,b}$ — заряды и электронные плотности атомов, r_{12} — расстояние между электронами атомов, r_{1b} и r_{2a} — расстояния от электронов до ядер. В сферических координатах все части данного функционала группируются в одно выражение

$$\varphi_1(r) = 16\pi^2 \int_0^\infty \int_0^\infty \rho_a(x)\rho_b(y)I(r, x, y)x^2y^2 dx dy, \quad (1)$$

$$I(r, x, y) = \frac{1}{r} + F(r, x, y) - \frac{2}{r+x+|r-x|} - \frac{2}{r+y+|r-y|}, \quad (2)$$

$$F(r, x, y) = \begin{cases} \frac{2}{r+x+|r-x|}, & y < |r-x|, \\ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{x} + \frac{1}{y} \right) - \frac{r}{4xy} - \frac{(x-y)^2}{4rxy}, & |r-x| < y < |r+x|, \\ \frac{1}{y}, & y > r+x. \end{cases} \quad (3)$$

Квантовая поправка вычисляется по формуле

$$\varphi_2 = \int \left\{ [\rho_a(\mathbf{r}_a) + \rho_b(\mathbf{r}_b)] e_g(\rho_a + \rho_b) - \rho_a(\mathbf{r}_a) e_g(\rho_a) - \rho_b(\mathbf{r}_b) e_g(\rho_b) \right\} d^3\mathbf{r},$$

где $e_g(\rho)$ — объемная плотность энергии электронного газа. В эллипсоидальных координатах получается

интеграл

$$\varphi_2(r) = \frac{\pi r^3}{4} \int_1^\infty \int_{-1}^1 [(\rho_a + \rho_b) e_g(\rho_a + \rho_b) - \rho_a e_g(\rho_a) - \rho_b e_g(\rho_b)] d\mu d\lambda. \quad (4)$$

Объемная плотность энергии электронного газа равна

$$e_g(\rho) = \frac{3}{10} (3\pi^2 \rho)^{2/3} - \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \rho \right)^{1/3} + e_c(\rho), \quad (5)$$

$$e_c(\rho) = \begin{cases} 2.711816\rho^{1/2} - 0.706052\rho^{1/3} - 3.819822\rho^{2/3} - 1.319676\rho^{5/6}, & \rho < \eta_1, \\ -0.7062 - 0.00633 \ln(\rho), & \eta_1 \leq \rho \leq \eta_2, \\ -0.010367 \ln(\rho) - (0.001861 \ln(\rho) + 0.008869)\rho^{-1/3} - 0.062849, & \rho > \eta_2, \end{cases}$$

$$\rho_a(r; \lambda, \mu) = \rho_a \left(\frac{r(\lambda + \mu)}{2} \right), \quad \rho_b(r; \lambda, \mu) = \rho_b \left(\frac{r(\lambda - \mu)}{2} \right),$$

где отдельные слагаемые в (5) отвечают кинетическому, обменному и корреляционному вкладам соответственно, $\eta_1 = 2.387324 \cdot 10^{-4}$ и $\eta_2 = 0.696013$ — параметры сшивки в корреляционном вкладе. Результирующая потенциальная энергия взаимодействия двух атомов есть

$$\varphi = \varphi_1 + \varphi_2. \quad (6)$$

В (1)–(6) требуется задать $\rho_{a,b}$. Наиболее корректно это можно сделать, если воспользоваться квантово-механическими электронными плотностями атомов, вычисленными методом Хартри–Фока [21]. Согласно [22], имеем формулу

$$\rho(\xi) = \frac{Z}{4\pi\xi} \left[\sum_i A_i \exp(-\alpha_i \xi) + \sum_j B_j (\beta_j \xi - 2) \exp(-\beta_j \xi) \right], \quad (7)$$

где Z — заряд ядра атома, A_i , α_i , B_j , и β_j — числовые коэффициенты, которые определяются по данным из [22], ξ — координата, отсчитываемая от ядра атома. Расчет парного межатомного потенциала по (1)–(7) не накладывает никаких ограничений по температуре при дальнейшем рассмотрении взаимодействия в конденсированных фазах.

Интегрирование в (1)–(7) проводилось методом трапеций в ограниченных областях, в пределах которых располагаются „эффективные“ части функций. Область интегрирования для (1) представляла собой квадрат размером 60×60 , а для (4) — прямоугольник размером 2×60 . При этом расстояния в 40 – 60 а.е. уже достаточно велики, чтобы служить хорошим приближением к бесконечности. Расстояние между атомами во всех расчетах изменялось в широком интервале от 0.5 до 20 а.е. с шагом 0.05 а.е.

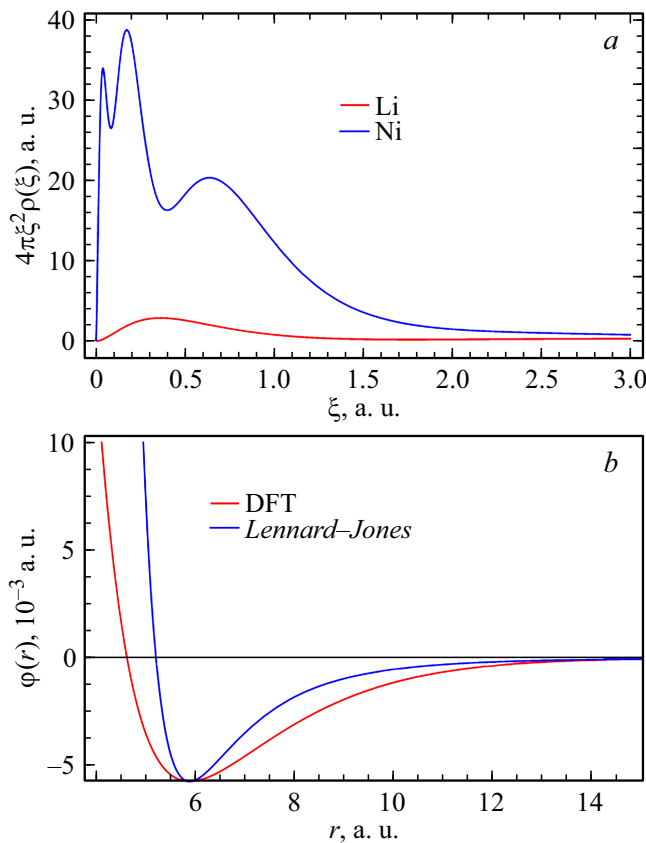


Рис. 1. Результаты расчета парного межатомного взаимодействия Li–Ni: *a* — распределения радиальных электронных плотностей; *b* — потенциальные кривые.

Расчетная сетка состояла из $\approx 5 \cdot 10^8$ точек, что в итоге гарантировало 4–6 верных знаков после запятой. Сам алгоритм был распараллелен для проведения вычислений на графическом процессоре и реализован в программной среде CUDA C++. Это позволило уменьшить время работы программы на порядки.

Параметры потенциала ЛД — равновесное расстояние r_0 и глубина потенциальной ямы D — определялись по табулированной кривой $\varphi(r)$ посредством прямого перебора данных. При этом погрешность по расстоянию соответствует шагу разбиения и в нашем случае не превышает 0.05 а.у. В настоящей работе рассматривалась система Li–Ni. Результаты расчетов приведены на рис. 1. Найденные нами значения равновесного расстояния и глубины потенциальной ямы равны 6.071 и 0.00572 а.у. В [23] приведены эмпирические значения параметров потенциала типа „ n – m “ для взаимодействия гомоатомных пар Li–Li и Ni–Ni. Применение к этим данным правил комбинирования Лоренца–Бертло [2] для гетероатомной пары Li–Ni дает близкие значения 5.443 и 0.00557 а.у.

2. Математическая модель капли

Рассматривается малая капля неполярной и несжимаемой жидкости в форме сферического сегмента, прилегающего к плоской поверхности твердого тела. Краевой угол $\theta < \pi/2$. Геометрия системы показана на рис. 2. Предполагается, что гиббсовские адсорбции на всех границах раздела фаз равны нулю или пренебрежимо малы, т.е. протяженные межфазные слои на этих границах отсутствуют. В этом случае из уравнения Гиббса для любой межфазной границы в системе имеем $d\sigma = 0$ и $\sigma = \text{const}$, где σ — поверхностное натяжение на данной границе. Средние плотности контактирующих фаз также считаются постоянными, т.е. независимыми от давления и пространственных координат. Системы с указанными свойствами наблюдаются в установившемся процессе при $t \rightarrow \infty$ во многих численных экспериментах по методу молекулярной динамики (см., например, [24–27]): при интенсивном межатомном взаимодействии практически все атомы пара захватываются каплей, образуя ее равновесный объем. Сделанные предположения, по нашему мнению, наиболее приемлемы для жидких металлов вдали от фазового перехода испарения. Из-за большого значения поверхностного натяжения малая капля типичного жидкого металла по форме должна быть близка к сферической (см., например, [28,29]). По этой же причине для металла на границе раздела „жидкость–пар“ профиль распределения плотности имеет приблизительно ступенчатый вид, толщина межфазной области стремится к нулю и размерные зависимости поверхностного натяжения и краевого угла можно не принимать во внимание.

Запишем дифференциал свободной энергии капли [29]:

$$dF = \Delta p dV - \sigma_{lv} \cos(\theta_c) d\omega_{sl} + \sigma_{lv} d\omega_{lv} + du, \quad (8)$$

где Δp — избыточное давление, равное разнице между давлением пара и давлением в капле, dV , $d\omega_{sl}$ и $d\omega_{lv}$ — дифференциалы объема капли и площадей раздела фаз,

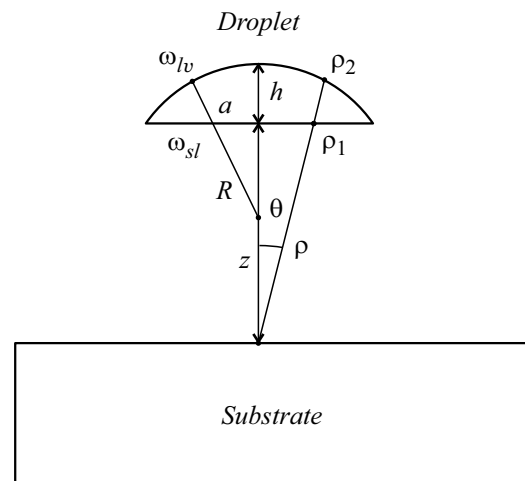


Рис. 2. Модель капли на частично смачиваемой поверхности.

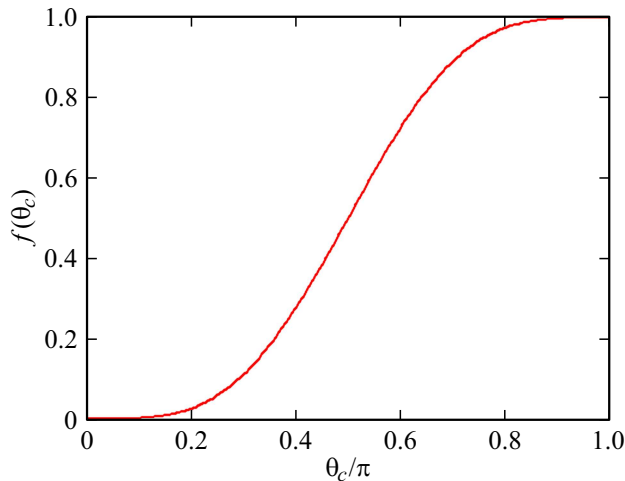


Рис. 3. Зависимость фактора смачивания от краевого угла смачивания.

σ_{lv} — поверхностное натяжение на границе раздела „жидкость–пар“, θ_c — краевой угол смачивания, du — дифференциал энергии взаимодействия капли с подложкой. Из геометрии имеем

$$dV = \pi [2 - 3 \cos(\theta_c) + \cos^3(\theta_c)] R^2 dR,$$

$$d\omega_{sl} = 2\pi \sin^2(\theta_c) R dR,$$

$$d\omega_{lv} = 4\pi [1 - \cos(\theta_c)] R dR,$$

$$h = R[1 - \cos(\theta_c)], \quad a = R \sin(\theta_c),$$

где R — радиус капли, h — высота капли, a — радиус основания капли. С учетом приведенных формул из (8) для капли в состоянии термодинамического равновесия получаем обобщенное уравнение Лапласа

$$\Delta p = \frac{2\sigma_{lv}}{R} + \frac{1}{4\pi R^2 f(\theta_c)} \left(\frac{\partial u}{\partial R} \right)_{eq}, \quad (9)$$

где

$$f(\theta_c) = [2 - 3 \cos(\theta_c) + \cos^3(\theta_c)]/4$$

— фактор смачивания (англ. wetting factor), возникающий в теории гетерогенной нуклеации. График функции $f(\theta_c)$ показан на рис. 3. При достаточно большом R второе слагаемое в (9) можно не учитывать, поэтому имеем обычное уравнение Лапласа.

Найдем теперь энергию взаимодействия капли с подложкой. В континуальном приближении

$$u = n_l n_s \iint \varphi(\mathbf{r}) dV_s dV_l, \quad (10)$$

$$\varphi(r) = D \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right], \quad (11)$$

где $n_{s,l}$ — объемные концентрации атомов подложки и капли, зависящие, вообще говоря, от температуры.

Энергия взаимодействия стороннего атома с полубесконечной подложкой равна

$$u_A(z) = n_s \int \varphi dV = 2\pi n_s \int_z^\infty \varphi(r)(r^2 - rz) dr, \quad (12)$$

где z — расстояние от атома до поверхности подложки. Подставляя (11) в (12) и проводя интегрирование, находим

$$u_A(z) = \frac{u_0}{2} \left[\left(\frac{z_0}{z} \right)^9 - 3 \left(\frac{z_0}{z} \right)^3 \right], \quad (13)$$

$$u_0 = \frac{10}{9} \pi n_s D z_0^3, \quad z_0 = \frac{r_0}{\sqrt[6]{5}},$$

где z_0 и u_0 — равновесное расстояние и глубина потенциальной ямы при взаимодействии „атом–подложка“. Потенциал взаимодействия сферического сегмента с подложкой имеет вид

$$u(z) = n_l \int u_A dV = 2\pi n_l \int_0^{\arctg(a/z)} \sin(\theta) d\theta \int_{\rho_1(z,\theta)}^{\rho_2(z,\theta)} u_A(r) r^2 dr, \quad (14)$$

$$\rho_1(z, \theta) = \frac{z}{\cos(\theta)},$$

$$\rho_2(z, \theta) = (h + z - R) \cos(\theta) + \sqrt{R^2 - (h + z - R)^2 \sin^2(\theta)},$$

где z — расстояние между каплей и подложкой, R — радиус капли, a и h — радиус основания и высота капли, связанные между собой соотношением $a = \sqrt{h(2R-h)}$. Вычисляя внутренний интеграл в (14), находим

$$u(z) = \frac{10}{3} \pi^2 n_s n_l D z_0^6 \int_0^{\arctg(a/z)} \mu(z, \theta) \sin(\theta) d\theta, \quad (15)$$

$$\mu(z, \theta) = \frac{1}{18} \left[\left(\frac{z_0}{\rho_1(z, \theta)} \right)^6 - \left(\frac{z_0}{\rho_2(z, \theta)} \right)^6 \right] + \ln \left(\frac{\rho_1(z, \theta)}{\rho_2(z, \theta)} \right).$$

Множитель перед интегралом в (15) может быть выражен через константу Гамакера [18]. Сам интеграл в (15) не выражается через элементарные функции, но эффективно рассчитывается методом Ромберга.

Равновесное расстояние z_d , на котором капля находится над подложкой, и удельная работа адгезии W капли с подложкой определяются из уравнений

$$\left(\frac{\partial u(z)}{\partial z} \right)_{z=z_d} = 0, \quad (16)$$

$$W_d = -\frac{u(z_d)}{\pi h(2R-h)} = -\frac{u(z_d)}{\pi R^2 \sin^2(\theta_c)}. \quad (17)$$

Уравнение (16) решается численно методом касательных. С другой стороны, для капли имеет место хорошо известное уравнение Юнга–Дюпре

$$W_d = \sigma_{sl} [1 + \cos(\theta_c)] = \sigma_{sl} [1 + \sqrt{1 - (a/R)^2}], \quad (18)$$

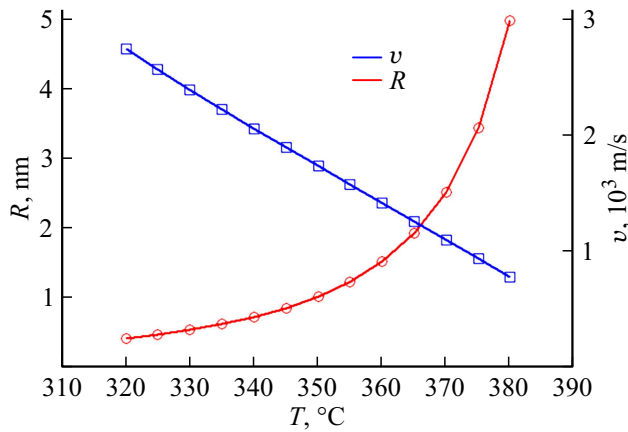


Рис. 4. Температурные зависимости предельного радиуса и скорости растекания литиевой капли на никелевой подложке.

где σ_{sl} — поверхностное натяжение на границе раздела „твердое тело–жидкость“. Уравнения (17), (18) могут быть использованы для теоретического определения σ_{sl} . Равновесная энергия $u(z_d)$ зависит только от R и θ_c (если исключить из нее a и h), и должна входить в уравнение (9).

Используя полученные формулы, можно определить условие фазового перехода смачивания. В отсутствие взаимного растворения веществ полное смачивание, очевидно, произойдет, когда давление в капле, создаваемое межмолекулярными силами со стороны подложки, будет равно или превысит давление Лапласа. Соответствующее условие в нашем случае имеет вид

$$\Delta p = 0. \quad (19)$$

Решая (19) с учетом (9) при заданном угле θ_c , определяем предельное значение радиуса капли R , меньше которого для капли быть не может. Скорость растекания капли v оценивается из равенства гидродинамического и лапласовского давлений: $\rho_l v^2/2 = 2\sigma_{lv}/R$, где ρ_l — плотность жидкости. Отсюда находим формулу

$$v = 2\sqrt{\frac{N_A \sigma_{lv}}{M n_l R}}, \quad (20)$$

где M — молярная масса, N_A — число Авогадро. В (20) под R подразумевается именно предельный радиус капли при заданной температуре.

Ниже приводятся результаты численных расчетов для малой литиевой капли, лежащей на никелевой подложке. Без участия кислорода литий и никель не образуют химическое соединение [30]. Исходные параметры [30–34]:

$$\theta_c(T) = 488.14 - 0.72 T, \quad [\text{deg}],$$

$$\sigma_{lv}(T) = 0.447 - 1.07 \cdot 10^{-4} T - 1.351 \cdot 10^{-8} T^2, \quad [\text{N/m}],$$

$$n_s(T) = 92.252 - 3.345 \cdot 10^{-3} T - 7.413 \cdot 10^{-7} T^2, \quad [\text{nm}^{-3}],$$

$$n_l(T) = 48.37 - 8.607 \cdot 10^{-3} T, \quad [\text{nm}^{-3}],$$

где во всех формулах температура выражена в Кельвинах. Параметры потенциала ЛД, рассчитанные в приближении электронного газа, в привычных единицах измерения равны (для рис. 1): $r_0 = 0.3213$ nm; $D = 0.1556$ eV. На рис. 4 показаны зависимости предельного радиуса и скорости растекания капли от температуры. Можно видеть, что с увеличением температуры предельный радиус увеличивается. Это обусловлено одновременным снижением краевого угла смачивания и поверхностного натяжения. Скорость растекания при этом уменьшается, что объясняется увеличением объема капли. Полученные значения скоростей меньше скорости звука в литии (6000 m/s), поэтому предположение о несжимаемости жидкости при растекании можно считать справедливым.

Параметры адгезии малой капли целесообразно сравнить с аналогичными параметрами для двух массивных образцов с плоской границей раздела между ними. Интегрированием (11) по полупространству находим удельную работу адгезии и равновесное расстояние для двух массивных образцов:

$$W_p = \frac{15}{8} \pi n_l n_s D z_p^4, \quad z_p = \frac{r_0}{\sqrt[6]{15}}. \quad (21)$$

При некоторой температуре, например при $T = 350^\circ\text{C}$, для литиевой капли предельного размера и толстой жидкой пленки лития в контакте с твердой никелевой подложкой из (17) и (21) находим $W_d = 0.2$ J/m² и $W_p = 1$ J/m². Грубая оценка по формуле Жирифалько–Гуда [35] с учетом справочных данных из [36] дает значение удельной работы адгезии $W_p \sim 1.6$ J/m². Таким образом, определяем, что в одних и тех же условиях удельная работа адгезии толстой жидкой пленки значительно превышает удельную работу адгезии малой лежащей капли. Кроме того, зависимости термодинамических характеристик от температуры в случае малой капли проявляются сильнее, чем в случае с толстой жидкой пленкой. Причина всего этого заключается в том, что в области малых размеров геометрия системы играет решающую роль.

Заключение

Исследования межфазных явлений, возникающих за счет физических сил взаимодействия, не теряют актуальности. В работе реализована аналитическая (без компьютерного моделирования методами молекулярной динамики и Монте-Карло) модель малой капли на частично смачиваемой поверхности твердого тела, которая позволила исследовать физические свойства системы. Модель включает в себя расчет из первых принципов параметров парного потенциала ЛД и вычисление на его основе потенциальной энергии и удельной работы адгезии капли. Численные расчеты проведены для системы Li (капля)–Ni (подложка), которая интересна с точки зрения изучения физико-химических свойств электродов литий-ионных аккумуляторов. Смачиваемость элек-

тродов литием в этих аккумуляторах имеет первостепенное значение [37]. Полученные в работе результаты согласуются с [33].

Из проведенных расчетов естественным образом следует, что при фиксированном значении краевого угла равновесное расстояние между каплей и подложкой уменьшается с увеличением объема капли. Физически это объясняется тем, что при переходе от взаимодействия между отдельными атомами к взаимодействию между объемными телами равновесное расстояние должно уменьшаться. Так, например, с потенциалом Леннарда-Джонса равновесное расстояние составляет r_0 , $0.765r_0$ и $0.637r_0$ для систем „атом–атом“, „атом–пластина“ и „пластина–пластина“.

При неполном смачивании поверхности с уменьшением размеров лежащей капли ее удельная работа адгезии возрастает. Это обусловлено увеличением вклада дисперсионных сил притяжения, действующих между каплей и подложкой. На этом же основании предсказывается существование минимального размера капли. Если лежащая капля слишком мала, то избыточное давление, вызываемое межатомными силами со стороны подложки, превышает капиллярное давление, связанное с поверхностным натяжением (т.е. фактически с взаимодействием атомов жидкости между собой), и капля перестает быть устойчивой. Это явление наблюдается в машинных экспериментах [24,27], но в многочисленной литературе количественно не описывается или физика явления вовсе не обсуждается. По нашему мнению, растекание капли вследствие потери ею устойчивости, в частности из-за уменьшения поверхностного натяжения и действия поверхностных сил, может иметь отношение к фазовому переходу первого рода и к так называемому суперрастеканию.

Несомненное преимущество представленной методики моделирования заключается в том, что она применима не только для малой капли, но без уравнений (9), (19) и для твердой частицы на поверхности твердого тела. Для лежащей капли с невысоким значением поверхностного натяжения требуется учитывать отклонение от сферической формы, а также размерную зависимость поверхностного натяжения, что приводит к нелинейным дифференциальным уравнениям типа Башфорта–Адамса [28,35,38–40]. Данная проблема является предметом отдельного рассмотрения.

Благодарности

Авторы выражают благодарность участникам Всероссийской конференции „Поверхностные явления в дисперсных системах“, посвященной 125-летию со дня рождения академика АН СССР П.А. Ребиндера, за обсуждение материалов данной работы и ценные замечания.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] K. Zhou, B. Liu. *Molecular Dynamics Simulation: Fundamentals and Applications* (Elsevier, 2022)
- [2] М. Рит. *Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета* (Регулярная и хаотическая динамика, Ижевск, 2005) [M. Rieth. *Nano-Engineering in Science and Technology: An Introduction to the World of Nano-Design* (World Scientific Publishing Company, 2003)]
- [3] S.K. Das, S.A. Egorov, P. Virnau, D. Winter, K. Binder. *J. Phys.: Condens. Matter*, **30** (25), 255001 (2018). DOI: 10.1088/1361-648X/aac363
- [4] I.W. Plesner. *J. Chem. Phys.*, **40** (6), 1510 (1964). DOI: 10.1063/1.1725355
- [5] A.V. Neimark. *J. Adhes. Sci. Technol.*, **13** (10), 1137 (1999). DOI: 10.1163/156856199X00839
- [6] H.T. Dobbs. *Int. J. Mod. Phys. B*, **13** (27), 3255 (1999). DOI: 10.1142/S0217979299003003
- [7] L. Boinovich, A. Emelyanenko. *Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp.*, **383**, 10 (2011). DOI: 10.1016/j.colsurfa.2010.12.020
- [8] D.S. Corti, K.J. Kerr, K. Torabi. *J. Chem. Phys.*, **135** (2), 024701 (2011). DOI: 10.1063/1.3609274
- [9] Д.В. Татьянаенко, А.К. Щекин. *Коллоид журн.*, **81** (4), 517 (2019). DOI: 10.1134/S0023291219030157 [D.V. Tatyanyenko, A.K. Shchekin. *Colloid J.* **81** (4), 455 (2019). DOI: 10.1134/S1061933X19030153]
- [10] А.И. Русанов. *Коллоид журн.*, **82** (5), 611 (2020). DOI: 10.31857/S0023291220050146 [A.I. Rusanov. *Colloid J.*, **82** (5), 567 (2020). DOI: 10.1134/S1061933X20050142]
- [11] Т.С. Лебедева, Д. Су, А.К. Щекин. *Известия РАН. Механика твердого тела*, **1**, 68 (2020). DOI: 10.31857/S0572329920010183 [T.S. Lebedeva, D. Suh, A.K. Shchekin. *Mechan. Solids*, **55** (1), 55 (2020). DOI: 10.3103/S0025654420010161]
- [12] М.Аа. Gjennestad, Ø. Wilhelmsen. *Fluid Ph. Equilibria*, **505**, 112351 (2020). DOI: 10.1016/j.fluid.2019.112351
- [13] B. Bhushan. *Springer Handbook of Nanotechnology*. 3rd ed. (Springer-Verlag, Berlin, 2010)
- [14] Y. Han, J. Li, T. Chen, B. Gao, H. Wang. *Analyst*, **148**, 4591 (2023). DOI: 10.1039/D3AN01045G
- [15] К. Оура, В.Г. Лифшиц, А.А. Саранин, А.В. Зотов, М. Катаяма. *Введение в физику поверхности* (Наука, М., 2005)
- [16] D. Bonn, D. Ross. *Rep. Prog. Phys.*, **64**, 1085 (2001). DOI: 10.1088/0034-4885/64/9/202
- [17] P.E. Theodorakis, E.R. Smith, R.V. Craster, E.A. Müller, O.K. Matar. *Fluids*, **4** (4), 176 (2019). DOI: 10.3390/fluids4040176
- [18] Ю.С. Бараш. *Силы Ван-дер-Ваальса* (Наука, М., 1988)
- [19] R.G. Gordon, Y.S. Kim. *J. Chem. Phys.*, **56** (6), 3122 (1972). DOI: 10.1063/1.1677649
- [20] M. Waldman, R.G. Gordon. *J. Chem. Phys.*, **71** (3), 1325 (1972). DOI: 10.1063/1.438433
- [21] Г.В. Дедков. *УФН*, **165** (8), 919 (1995). DOI: 10.3367/UFN.0165.199508c.0919 [G.V. Dedkov. *Phys. Usp.*, **38**, 877 (1995). DOI: 10.1070/PU1995v038n08ABEH000100]
- [22] T.G. Strand, R.A. Bonham. *J. Chem. Phys.*, **40** (6), 1686 (1964). DOI: 10.1063/1.1725380
- [23] S. Zhen, G.J. Davies. *Phys. Stat. Sol. (a)*, **78** (2), 595 (1983). DOI: 10.1002/pssa.2210780226
- [24] F. Wang, H. Wu. *Soft Matter*, **9** (24), 5703 (2013). DOI: 10.1039/C3SM50530H

- [25] W. Qiang, B. Wang, Q. Li, W. Wang. Chem. Phys. Lett., **695**, 112 (2018). DOI: 10.1016/j.cplett.2018.02.001
- [26] S.K. Sethi, S. Kadian, G. Manik. Arch. Computat. Methods Eng., **29**, 3059 (2022). DOI: 10.1007/s11831-021-09689-1
- [27] C. Zhao, Y. Lin, X. Wu. Mater. Today Commun., **32**, 103968 (2022). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2022.103968
- [28] С.И. Матюхин, К.Ю. Фроленков. Конденсированные среды и межфазные границы, **5** (2), 216 (2003)
- [29] С.Ш. Рехвиашвили, Е.В. Кишტიкова. Физикохимия поверхности и защита материалов, **50** (1), 3 (2014). DOI: 10.7868/S0044185614010112 [S.Sh. Rekhviashvili, E.V. Kishtikova. Protection Metals Phys. Chem. Surf., **50** (1), 1 (2014). DOI: 10.1134/S2070205114010110]
- [30] А.Б. Алчагиров, Х.Б. Хоконов. ТВТ, **32** (5), 756 (1994). [A.B. Alchagirov, Kh.B. Khokonov. High Temperature, **32** (5), 707 (1994).]
- [31] Б.Б. Алчагиров, Л.Х. Афаунова, Ф.Ф. Дышекова, А.Г. Мозговой, Т.М. Таова, Р.Х. Архестов. ТВТ, **47** (2), 307 (2009). [B.B. Alchagirov, L.Kh. Afaunova, F.F. Dyshekova, A.G. Mozgovoï, T.M. Taova, R.Kh. Arkhestov. High Temperature, **47** (2), 287 (2009). DOI: 10.1134/S0018151X09020205]
- [32] R.N. Abdullaev, Yu.M. Kozlovskii, R.A. Khairulin, S.V. Stankus. Int. J. Thermophys., **36** (4), 603 (2015). DOI: 10.1007/s10765-015-1839-x
- [33] J. Wang, H. Wang, J. Xie, A. Yang, A. Pei, C. Wu, F. Shi, Y. Liu, D. Lin, Y. Gong, Y. Cui. Energy Stor. Mater., **14**, 345 (2018). DOI: 10.1016/j.ensm.2018.05.021
- [34] H.W. Dauison. *Compilation of Thermophysical Properties of Liquid Lithium* (National Aeronautics and Space Administration, Washington, D.C. 1968)
- [35] A.W. Adamson, A.P. Gast. *Physical Chemistry of Surfaces* (Wiley, NY, 1997)
- [36] В.И. Ниженко, Л.И. Флока. *Поверхностное натяжение металлов и сплавов* (Металлургия, М., 1981)
- [37] S.-H. Wang, J. Yue, W. Dong, T.-T. Zuo, J.-Y. Li, X. Liu, X.-D. Zhang, L. Liu, J.-L. Shi, Y.-X. Yin, Y.-G. Guo. Nat. Commun., **10**, 4930 (2019). DOI: 10.1038/s41467-019-12938-4
- [38] А.И. Русанов, В.А. Прохоров. *Межфазная тензиометрия* (Химия, СПб., 1994). [A.I. Rusanov, V.A. Prokhorov. *Interfacial Tensiometry* (Elsevier, 1996)]
- [39] Е.В. Галактионов, Н.Е. Галактионова, Э.А. Тропп. ЖТФ, **86** (12), 17 (2016). DOI: 10.21883/jtf.2016.12.43909.1908 [E.V. Galaktionov, N.E. Galaktionova, E.A. Tropp. Tech. Phys., **61** (12), 1781 (2016).]
- [40] А.А. Сокуров. Конденсированные среды и межфазные границы, **20** (3), 460 (2018). DOI: 10.17308/kcmf.2018.20/583