

# 粗糙壁面上纳米液滴的蒸发特性

陈艳玲<sup>1</sup>, 郭亮<sup>1</sup>, 孙万臣<sup>1</sup>, 蔡宁宁<sup>2</sup>, 宣熔<sup>1</sup>, 王涵<sup>1</sup>, 张峻峰<sup>1</sup>

(1. 吉林大学汽车仿真与控制国家重点实验室, 长春 130025; 2. 吉林大学商学与管理学院, 长春 130012)

## Evaporation characteristics of nanodroplets on rough surfaces

CHENYanling<sup>1</sup>, GUO Liang<sup>1</sup>, SUN Wanchen<sup>1</sup>, CAI Ningning<sup>2</sup>, WANG Han<sup>1</sup>, XUAN Rong<sup>1</sup>, ZHANG Junfeng<sup>1</sup>

(1.State Key Laboratory of Automotive Simulation and Control, Jilin University, Changchun130025, China; 2. School of Business and Management, Jilin University, Changchun130012, China)

**Abstract:** To better solve the wall-wetting problem in internal combustion engines and actively control the evaporation processes of wall-impinging fuel droplets, molecular dynamics (MD) method was used to study the influence of surface temperature, wettability and rough structures on the evaporation processes of droplets. The results show that the morphological changes of droplets are complex during the evaporation processes on surfaces with different temperatures and microstructures. As the solid-liquid interaction coefficient decreases, the thermal resistance of the solid-liquid interface increases, and the number of droplet molecules that change from the liquid phase to the vapor phase decreases significantly. Under the conditions of larger solid-liquid interaction coefficients, the total energy of droplet molecules increases with the increase of surface temperatures. With the decrease of the solid-liquid interaction coefficients, the effects of the surface temperature on the energy between the droplet molecules and the wall atoms weaken. When the solid-liquid interaction coefficient is low, the order of the total energy of the droplet molecules on the surfaces with different microstructures is smooth surface > pit-shaped surface > grid-shaped surface > boss-shaped surface > secondary boss-shaped surface.

**摘要:**为了更好地解决内燃机燃油湿壁问题,对燃油撞壁后的蒸发过程进行主动控制,采用分子动力学方法研究了壁面温度、润湿性及粗糙结构对液滴蒸发过程的影响规律。结果表明:液滴在具有不同温度及微结构表面上的蒸发过程中,其形态变化较复杂。随着固液作用系数的降低,固液界面的热阻增加,由液相转变为气相的液滴分子的数量明显减少。在较大的固液作用系数条件下,随着壁面温度的升高,液滴分子总能量增加。随着固液作用系数的降低,壁面温度对液滴分子与壁面原子间能量的影响减弱。当固液作用系数较低时,在具有不同微结构的壁面上的液滴分子的总能量的排序为:光滑壁面>凹坑状壁面>网格状壁面>凸台状壁面>二级凸台状壁面。

**关键词:**纳米液滴;壁面温度;润湿性;微结构;蒸发过程;分子动力学

**Key words:** nanodroplet; surface temperature; wettability; microstructure; evaporation process; molecular dynamics

中图分类号: TK421 文献标识码: A

收稿日期: 2023-09-14

基金项目: 吉林省自然科学基金项目(20220101212JC); 吉林大学长沙汽车创新研究院自由探索项目(CAIRIZT20220202); 吉林大学2021年度学科交叉融合创新项目(XJRCYB07)

作者简介: 陈艳玲(1993-),女,博士生,主要研究方向为内燃机燃料与燃烧优化, E-mail: 1432835155@qq.com;

郭亮(联系人), E-mail: lingguo@jlu.edu.cn.

## 0 概述

在内燃机中，常常采用早喷、多段喷射、高压喷射、高增压、高背压、多燃料喷射及废气再循环等宏观控制技术来优化新型燃烧模式的燃烧过程。然而，由于燃烧被限制在有限空间内，且燃油喷射过程中缸内工质温度和密度较低，在内燃机新型燃烧模式中喷雾湿壁现象不可避免，尤其在发动机冷启动、低速和低负荷工况运行时更加明显。由于燃油喷雾湿壁问题是致 soot 和 HC 排放增加的主要原因之一，有必要对撞壁燃油蒸发过程进行主动控制，加快撞壁燃油的蒸发速度。设计燃烧室结构、优化喷油参数、改善燃料特性可在一定程度上降低喷雾湿壁危害，为了进一步解决喷雾湿壁问题，有必要对壁面润湿性进行改善。

液滴撞壁后出现不同的行为，如：铺展、回缩、反弹及飞溅等。撞壁液滴的行为发展受液体特性、表面特性及撞击速度影响。在较高的表面温度条件下，液滴与固体表面和周围环境进行强烈的热量交换。Liang 等人<sup>[1]</sup>对液滴撞击受热壁面的流体力学和传热机制的相关文献进行了全面回顾。表面微观结构、表面润湿性、表面温度、液滴的理化性质和韦伯数对液滴撞壁的蒸发和沸腾特性有较大的影响<sup>[2-4]</sup>。

为了深入研究复杂的液滴撞壁过程，数值计算方法被广泛应用。在润湿性研究领域，分子动力学 (Molecular dynamics, MD) 方法的应用引起广泛的关注。白麟等人<sup>[5]</sup>通过 MD 方法研究了正十六烷液滴在光滑铜壁面上的润湿过程，结果表明，液滴分子数及截断半径对接触角的影响不大，随着壁面作用势能的增加，接触角线性降低。Ambrosia 等人<sup>[6]</sup>模拟了水滴在柱状表面上的静态润湿行为，指出水滴在柱状表面上的润湿状态包括 Wenzel 润湿状态和 Cassie 润湿状态。此外，水滴在柱状表面上的润湿状态与柱高和柱间距有关<sup>[7]</sup>。与光滑表面相比，二级结构<sup>[8]</sup>可使表面的疏水性增强。Koishi 等人<sup>[9]</sup>研究了水滴在柱状粗糙表面上的接触角滞后现象，发现处于 Wenzel 状态下的液滴的接触角滞后大于处于 Cassie 状态下的液滴的接触角滞后。Hong 等人<sup>[10]</sup>采用 MD 方法模拟了在固体表面上的水滴的接触角滞后现象，发现随着表面作用势能的增加，水滴的接触角滞后增大。

随着温度的升高，水滴对固体表面的润湿能力增强，液滴的铺展速度增加<sup>[11]</sup>。Li 等人<sup>[12]</sup>发现与光滑表面相比，氩液滴在粗糙表面的蒸发过程中接触角和接触半径的变化更加复杂，总蒸发量更大。随着温度和固液势能参数的增加，接触角减小<sup>[13, 14]</sup>。因此，通过调节 MD 模拟中的温度和改变势阱参数可实现表面润湿性的改变<sup>[15-17]</sup>。Sun 等人<sup>[18]</sup>发现与表面粗糙度相比，润湿性对水滴蒸发过程的影响更大。对于光滑的表面，纳米液滴的蒸发行为与在宏观尺度情况下相似，在粗糙的亲水性表面上也存在这种相似性。Zhang 等人<sup>[19]</sup>研究了水滴在加热表面上的蒸发过程，发现表面亲水性越强，液滴蒸发越快。类似地，Xie 等人<sup>[20]</sup>发现与疏水性表面相比，水滴在亲水性表面上形成的液膜更薄，接触面积更大，有利于液滴的蒸发。Fan 等人<sup>[21]</sup>推导了多体势的原子间力和热流表达式，如广泛用于共价键的物质的 Tersoff、Brenner 和 Stillinger-Weber 势。此外，MD 模拟作为探究纳米尺度的沸腾动力学的有效工具，被广泛应用于研究纳米尺度的沸腾过程。近年来，一些研究表明具有微/纳米结构的表面在提高沸腾传热效率方面是有效的，许多学者针对表面润湿性及纳米结构对液滴沸腾动力学的影响展开了研究<sup>[22, 23]</sup>。Rodrigues 等人<sup>[24]</sup>采用 MD 方法发现表面润湿性对纳米尺度水滴的 Leidenfrost 效应有影响。

许多学者针对液滴撞击不同表面的过程进行了大量研究。然而，很少有学者对由有机物构成的液滴在不同表面的蒸发过程进行研究。在内燃机的实际工作过程中，燃烧室的壁面温度较高。为了探究高温工况下液滴在粗糙壁面上的蒸发过程及热量传递过程，本文采用分子动力学方法模拟了在不同固液作用系数条件下，正十六烷液滴在具有不同温度及微结构的壁面上的形态发展及相变过程，分析高温工况下，润湿性及微结构对纳米液滴蒸发过程的综合影响，模拟结果可对燃烧室壁面结构设计提供理论参考。

## 1 模拟方法

### 1.1 模拟体系的建立

采用 LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) 软件进行分子动力学模

拟。为了研究液滴在不同壁面上的蒸发过程，建立尺寸为  $480 \text{ \AA} \times 480 \text{ \AA} \times 200 \text{ \AA}$  的模拟盒子。根据正十六烷的密度为  $0.773 \text{ g/cm}^3$ ，经计算确定在体心立方晶格排布下正十六烷分子的晶格常数。为了消除液滴初始构型的影响，进行能量最小化和弛豫过程。壁面由按照面心立方排布的铝原子构成，铝的晶格常数为  $4.0495 \text{ \AA}$ 。液滴底部与壁面顶端之间初始距离为  $20 \text{ \AA}$ 。选取光滑壁面 (SS)、凸台状壁面 (BS)、凹坑状壁面 (PS)、网格状壁面 (GS) 及二级凸台状壁面 (DS) 进行研究，不同粗糙壁面的示意图如图 1 所示。为了便于描述粗糙壁面的形貌，铝晶胞的长度用  $L$  代表。对于凸台 (凹坑) 状壁面，每个凸台 (凹坑) 的长、宽、高均为  $2L$ ，相邻两个凸台 (凹坑) 的间距为  $2L$ 。对于网格状壁面，每个凹坑的长、宽、高均为  $2L$ 。对于二级凸台状壁面，底层凸台的长、宽、高均为  $2L$ ，相邻两个底层凸台的间距为  $2L$ 。上层凸台的长、宽、高均为  $L$ 。

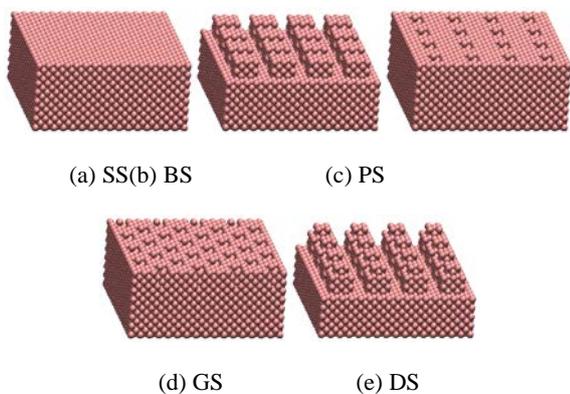


图 1 不同粗糙壁面的示意图

以液滴润湿光滑表面过程为例，模拟体系的初始构型如图 2 所示。



图 2 模拟体系的初始构型

## 1.2 势能模型的选取

为了简化计算，正十六烷分子采用联合原子模型，如图 3 所示。将甲基和亚甲基各视为一个原子，其相对原子质量分别为  $15.0345$  和  $14.0266$ 。

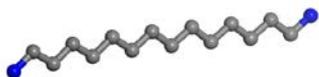


图 3 正十六烷分子的联合原子模型

正十六烷分子体系的势能包含键结势能和键结势能。键结势能包括键长伸缩势能、键角弯曲势

能和二面角扭转势能。非键结势能采用 12-6 L-J 势函数来描述。正十六烷分子间的势能函数用式(1)表示

$$U^{\text{tot}} = U^{\text{NB}} + U^{\text{B}} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \sum_{\text{bonds}} \frac{1}{2} k_r (r - r_0)^2 + \sum_{\text{angles}} \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{\text{dihedrals}} \frac{1}{2} [k_1 (1 + \cos \alpha) + k_2 (1 - \cos 2\alpha) + k_3 (1 + \cos 3\alpha) + k_4 (1 - \cos 4\alpha)] \#(1)$$

式中， $U^{\text{tot}}$  为总势能， $U^{\text{NB}}$  为非键结势能， $U^{\text{B}}$  为键结势能， $N$  为正十六烷分子数， $\epsilon_{ij}$ 、 $\sigma_{ij}$ 、 $r_{ij}$  分别为  $i$  分子和  $j$  分子中的两个虚拟原子间的 L-J 势能的能量参数、尺度参数和距离， $k_r$  为键长伸缩弹力系数， $r$ 、 $r_0$  分别为直接键结的两个原子间的实际键长和平衡键长， $k_\theta$  为键角弯曲弹力系数， $\theta$ 、 $\theta_0$  分别为连续键结的三个原子间的实际键角和平衡键角， $k_1$ 、 $k_2$ 、 $k_3$ 、 $k_4$  为二面角扭转势能弹力系数， $\alpha$  为二面角。键长、键角和二面角作用参数如表 1、2、3 所示<sup>[5]</sup>。

表 1 键长作用参数

键长	$k_r / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{\AA}^{-2})$	$r_0 / \text{\AA}$
CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub>	1090.98	1.6100
CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub>	813.43	1.6100

表 2 键角作用参数

键角	$\theta_0 / ^\circ$	$k_\theta / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{rad}^{-2})$
CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub>	104.8	113.6
CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub>	102.2	93.6

表 3 二面角作用参数

二面角	$k_1 / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$	$k_2 / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$	$k_3 / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$	$k_4 / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$
CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub>	-3.4	1.25	0.3	0
CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub>	-3.4	1.25	0.3	0

构成正十六烷分子的虚拟原子间 L-J 势能的能量参数和尺度参数如表 4 所示<sup>[5]</sup>。

表 4 L-J 势能的能量参数和尺度参数

原子团	$\epsilon_i / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$	$\sigma_i / \text{\AA}$
CH <sub>3</sub>	0.7315	3.9050
CH <sub>2</sub>	0.4932	3.9050

采用 EAM 势函数来描述壁面原子间势能，虚拟原子与壁面原子之间的 L-J 势能的能量参数和尺度参数可通过混合规则计算得到，如式(2)和式(3)所示。

$$\epsilon_{sl} = \sqrt{\epsilon_{ss} \epsilon_{ll}} \#(2)$$

式中， $\epsilon_{sl}$ 、 $\epsilon_{ss}$ 、 $\epsilon_{ll}$  分别为液滴原子与壁面原子之间、壁面原子之间、液滴原子之间的 L-J 势能的能量参数， $\sigma_{sl}$ 、 $\sigma_{ss}$ 、 $\sigma_{ll}$  分别为液滴原子与壁面原子

之间、壁面原子之间、液滴原子之间的 L-J 势能函数的尺度参数。不同虚拟原子之间的 L-J 势能的能量参数和尺度参数也通过混合规则计算得到。通过调节  $\epsilon_{sl}$  大小来实现壁面与液滴之间相互作用强度的调节，进而改变壁面润湿性，将调节后的  $\epsilon_{sl}$  称为固液作用系数。选取四个固液作用系数进行模拟计算，依次用  $\epsilon_1$ 、 $\epsilon_2$ 、 $\epsilon_3$  及  $\epsilon_4$  来代表，四个固液作用系数的取值如表 5 所示。

表 5 固液作用系数

	$\epsilon_1/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$\epsilon_2/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$\epsilon_3/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$\epsilon_4/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$
$\epsilon_{\text{CH}_3\text{-Al}}$	0.5908	0.4178	0.2954	0.2089
$\epsilon_{\text{CH}_2\text{-Al}}$	0.4851	0.3431	0.2426	0.1716

### 1.3 模拟细节

在模拟过程中， $x$  方向、 $y$  方向采用周期边界条件， $z$  方向采用镜像边界条件。原子间力的截断半径为  $10 \text{ \AA}$ 。在能量最小化和弛豫过程中，对构成液滴的所有原子采用 NVT 系综，采用 Nosé-Hoover 速度控温法使得体系温度恒定在  $300.15 \text{ K}$ 。在后续模拟过程中，将壁面原子分成上、下两层，对壁面下层的

原子进行固定，使其在初始位置保持不动，从而限制其热运动。将壁面的上层原子视为热传导层，采用 Berendsen 热浴对热传导层的温度进行控制，使其温度分别稳定在五个不同的温度点： $473.15 \text{ K}$ 、 $523.15 \text{ K}$ 、 $573.15 \text{ K}$ 、 $623.15 \text{ K}$  和  $673.15 \text{ K}$ 。同时，对处于热传导层的壁面原子施加弹簧约束。对壁面原子施加弹簧约束可使得壁面原子产生热运动，且当壁面原子远离初始位置时，该原子会受到较大的弹簧约束力的作用而返回到初始位置。随后，对构成正十六烷液滴的分子和壁面原子采用 NVE 系综，设置时间步长为  $2 \text{ fs}$ ，持续时间为  $4 \text{ ns}$ 。

## 2 结果和讨论

### 2.1 壁面温度对液滴蒸发过程的影响分析

为了研究壁面温度对液滴蒸发过程的影响，在不同的固液作用系数条件下，对正十六烷液滴在不同温度的壁面 BS 上的蒸发过程进行模拟。在固液作用系数为  $\epsilon_1$  的条件下，正十六烷液滴在温度为  $473.15 \text{ K}$ 、 $523.15 \text{ K}$ 、 $573.15 \text{ K}$ 、 $623.15 \text{ K}$ 、 $673.15 \text{ K}$  的壁面 BS 上的蒸发过程的形态快照如图 4 所示。

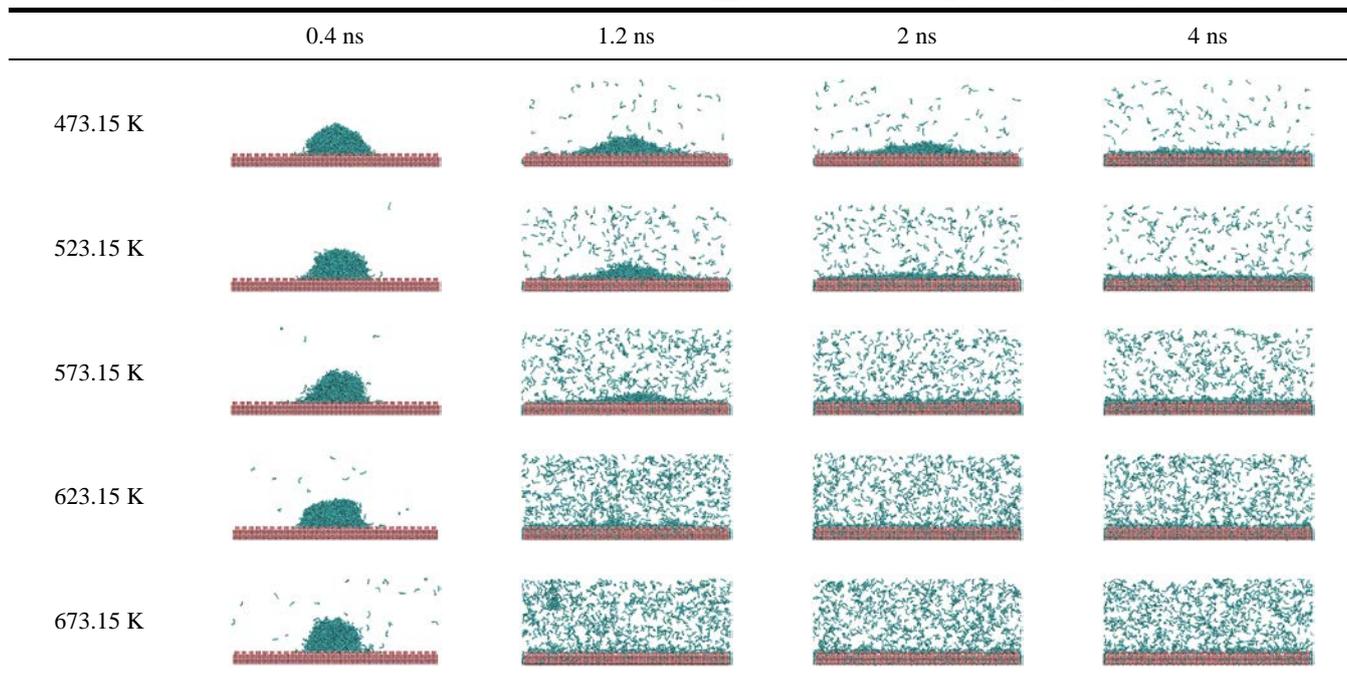


图 4  $\epsilon_1$  条件下液滴在不同温度的壁面 BS 上的形态快照

由图 4 可以看出，随着时间的推移，加热壁面与液滴之间的传递的热量增加，由液相转变为气相的液滴分子的数量增加，直至液滴完全蒸发。同时，液滴的形态随着时间的变化较复杂。此外，在液滴蒸发的后期，在壁面上可以清晰地观察到一层吸附层。这表明，在固液界面处，液滴分子以团簇形式

存在。在固液作用系数为  $\epsilon_1$  的条件下，当壁面温度为  $473.15 \text{ K}$  和  $523.15 \text{ K}$  时，液滴撞击壁面后在壁面较强的作用力下迅速向四周铺展。此外，由于液滴温度的升高，液滴的动能增加，尤其在固-液-气三相接触线处，液滴克服壁面的钉扎作用使得三相接触线扩张，在液滴边缘处形成了一种由液滴平滑过渡到

壁面的脚形铺展形态。与壁面温度为 473.15 K 时相比, 当壁面温度升高至 523.15 K 与 573.15 K 时, 在相同时刻, 液滴的高度更低。当液滴接触 623.15 K 的壁面时, 高温的壁面与液滴的温度差异较大, 高温壁面的热量迅速地传向温度较低的液滴, 在三相接触线发生明显扩张前, 液滴边缘处的液滴分子迅速蒸发。当液滴接触 673.15 K 的壁面时, 液滴的动能迅速增加, 分子间的距离急剧增加, 形成气相, 使得高温壁面与液滴之间的传热速率降低。由于气泡的托升作用, 液滴悬浮在壁面上。随后, 悬浮在壁面附近的液滴逐渐破碎, 形成雾化的小液滴并最

终汽化。对比壁面温度为 623.15 K 与 673.15 K 的两种工况, 发现在 1.2 ns 时, 在温度较高的 673.15 K 壁面上, 液滴仍有少量残余, 而在温度较低的 623.15 K 壁面上, 液滴已全部汽化。这表明当壁面温度高于一定值时, 气相的存在能够抑制热量的传递, 导致液滴的汽化速率降低。

在固液作用系数为  $\epsilon_2$  的条件下, 正十六烷液滴在温度为 473.15 K、523.15 K、573.15 K、623.15 K、673.15 K 的壁面 BS 上的蒸发过程的形态快照如图 5 所示。

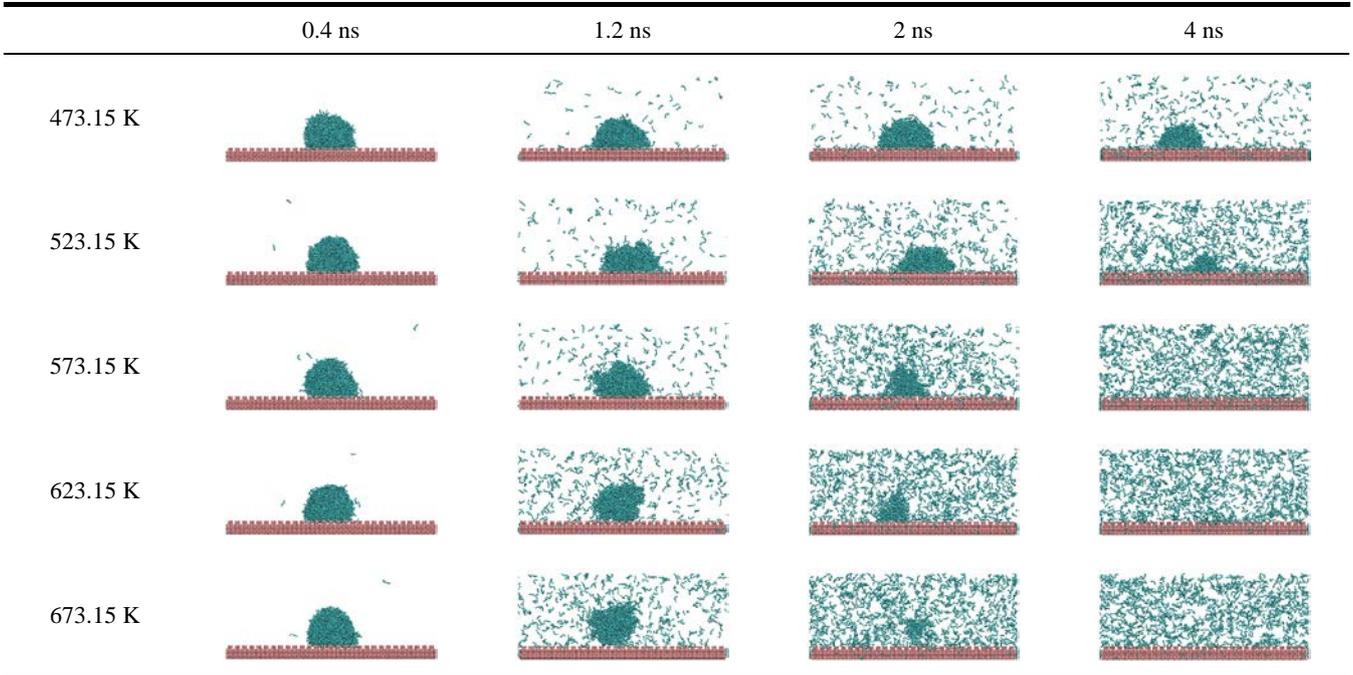
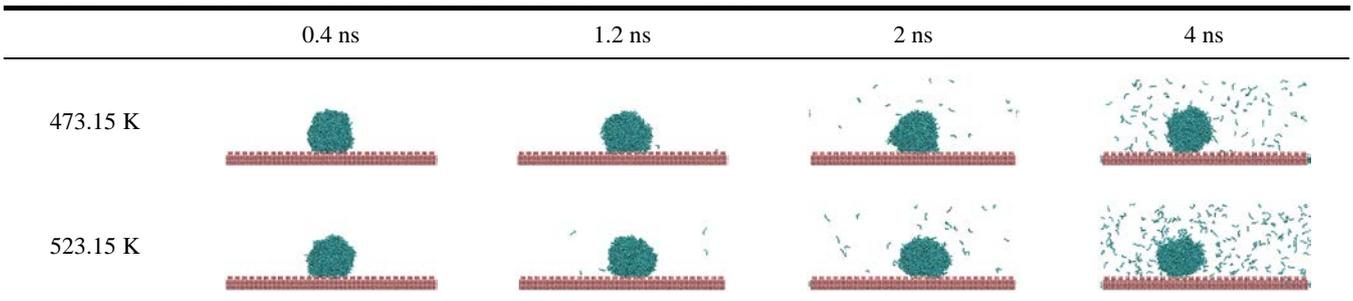


图 5  $\epsilon_2$  条件下液滴在不同温度的壁面 BS 上的形态快照

与固液作用系数  $\epsilon_1$  时相比, 当固液作用系数降低为  $\epsilon_2$  时, 液滴接触 473.15 K 的壁面后铺展程度降低。由图 5 可以看出, 当壁面温度由 473.15 K 升至 523.15 K 时, 液滴分子的动能显著增加, 汽化更加剧烈。当壁面温度升至 573.15 K 时, 随着时间的增加, 液滴不能维持球冠形状, 轮廓呈不规则形状。当壁面温度升至 623.15 K 与 673.15 K 时, 与较低壁面温度时相比, 液滴轮廓在更早的时刻变得不规则, 这

表明当液滴接触高温壁面时, 液滴内部迅速产生大量气泡。当壁面温度为 673.15 K 时, 在 1.2 ns 时, 壁面与液滴底部之间形成的蒸汽使得液滴与壁面不直接接触, 处于类似于宏观尺度的膜态沸腾状态。

在固液作用系数为  $\epsilon_3$  的条件下, 正十六烷液滴在温度为 473.15 K、523.15 K、573.15 K、623.15 K、673.15 K 的壁面 BS 上的蒸发过程的形态快照如图 6 所示。



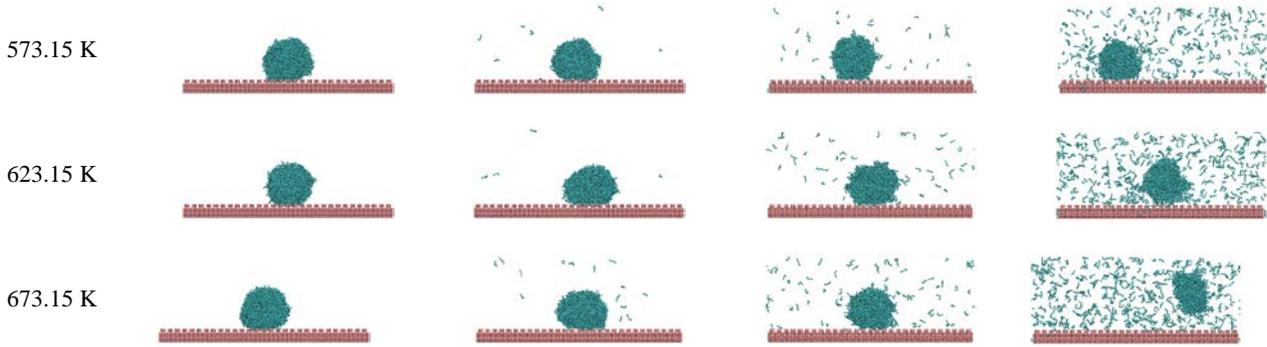


图 6 $\epsilon_3$ 条件下液滴在不同温度的壁面 BS 上的形态快照

与固液作用系数为 $\epsilon_1$ 、 $\epsilon_2$ 时相比,当固液作用系数降低为 $\epsilon_3$ 时,由于壁面原子与液滴分子间的相互作用力减弱,液滴接触高温壁面后的铺展宽度明显减小,即液滴与壁面的实际接触面积减小,且在多数情况下处于 Cassie 润湿状态。由于壁面与液滴之间的热阻较大,由液相转变为气相的液滴分子的数量明显减少。此外,在不同的壁面温度条件下,液滴发生侧向移动。这是因为液滴受热后分子热运动更加剧烈,对液滴的扰动作用增强,在壁面较弱的钉扎作用下,液滴出现侧向移动的现象。

在固液作用系数为 $\epsilon_4$ 的条件下,在 4 ns 时,正十六烷液滴在温度为 473.15 K、523.15 K、573.15 K、623.15 K、673.15 K 的壁面 BS 上的形态快照如图 7 所示。

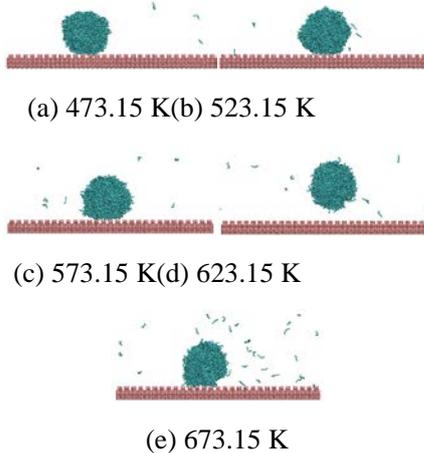
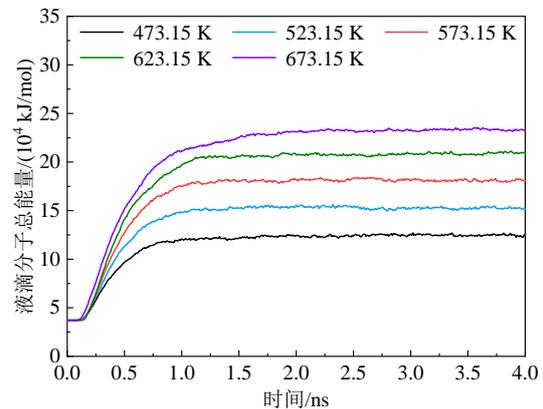


图 7 $\epsilon_4$ 条件下液滴在不同温度的壁面 BS 上的形态快照

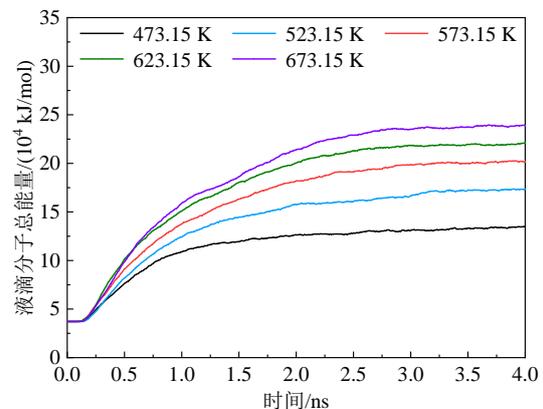
由图 7 可以看出,当固液作用系数降低为 $\epsilon_4$ 时,在 4 ns 时,不同壁面上的液滴均维持球状,几乎不发生铺展。壁面与液滴之间的热阻明显升高,由液相转变为气相的液滴分子极少。当壁面温度为 623.15 K 时,液滴发生反弹。与固液作用系数为 $\epsilon_3$ 时相比,当固液作用系数降低为 $\epsilon_4$ 时,液滴发生侧向移动的倾向性更强。

## 2.2 壁面温度对热量传递过程的影响分析

为了量化不同温度壁面与液滴间的传热过程,在不同的固液作用系数条件下,对在不同温度的壁面 BS 上的液滴分子的总能量、与壁面原子间能量进行计算。在模拟过程中,正十六烷液滴仅与壁面产生能量交换,故正十六烷液滴分子总能量的增加量为壁面原子传递给正十六烷液滴分子的热量。在不同的固液作用系数条件下,壁面温度对液滴分子总能量的影响如图 8 所示。



(a) 固液作用系数为 $\epsilon_1$



(b) 固液作用系数为 $\epsilon_2$

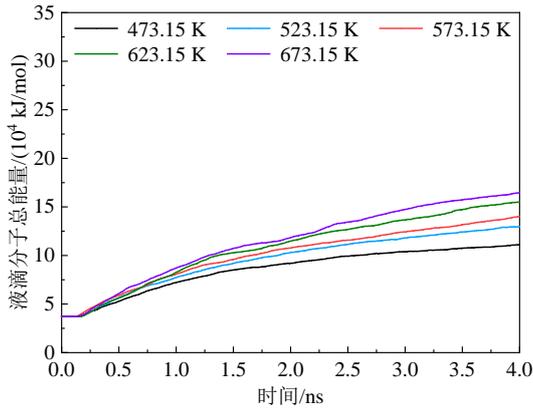
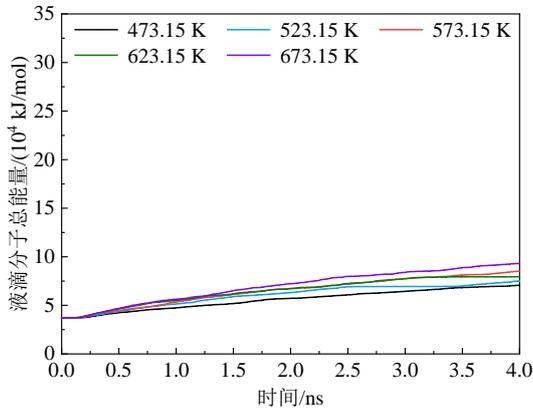
(c) 固液作用系数为 $\epsilon_3$ (d) 固液作用系数为 $\epsilon_4$ 

图 8 壁面温度对液滴分子总能量的影响

由图 8 可以看出, 当固液作用系数为 $\epsilon_1$ 和 $\epsilon_2$ 时, 在不同温度壁面上的液滴分子的总能量均先增加后趋于稳定。与固液作用系数为 $\epsilon_1$ 时相比, 当固液作用系数降低至 $\epsilon_2$ 时, 在相同温度的壁面上, 液滴分子总能量趋于稳定的时间延后。与固液作用系数为 $\epsilon_2$ 时相比, 当固液作用系数为 $\epsilon_3$ 时, 随着壁面温度的升高, 液滴分子总能量增加的幅度变小, 即壁面温度对液滴分子总能量的影响减弱。当固液作用系数为 $\epsilon_1$ 、 $\epsilon_2$ 及 $\epsilon_3$ 时, 随着壁面温度的升高, 液滴分子总能量增加。这是由于当壁面温度较高时, 加热的壁面与液滴之间会存在较大的温差。同时, 温差越大, 从温度较高的壁面向温度较低的液滴传递的热量越多, 液滴分子总能量越高。此外, 随着固液作用系数由 $\epsilon_2$ 降低至 $\epsilon_3$ 和 $\epsilon_4$ 时, 在相同温度的壁面上, 液滴分子总能量减少。这是由于随着固液作用系数的降低, 液滴在加热壁面上铺展半径减小, 加热壁面与液滴之间传热面积减小, 导致壁面原子向液滴分子传热速率减慢。这表明固液作用系数的降低使得固液界面的热阻增加。

在不同的固液作用系数条件下, 壁面温度对液滴分子与壁面原子间能量的影响如图 9 所示

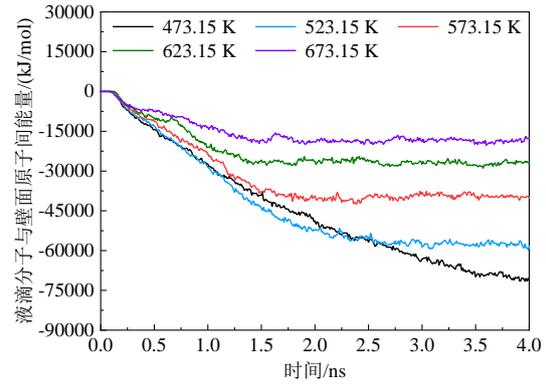
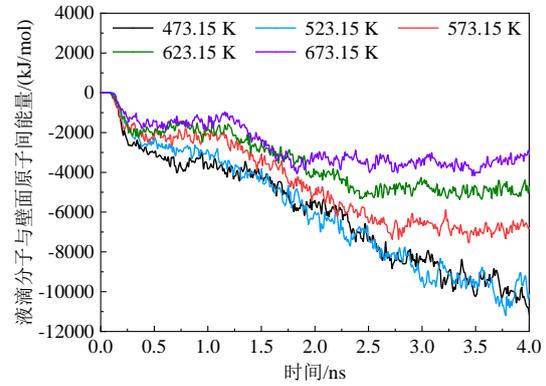
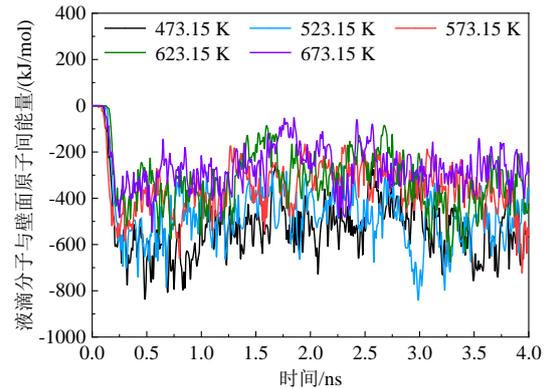
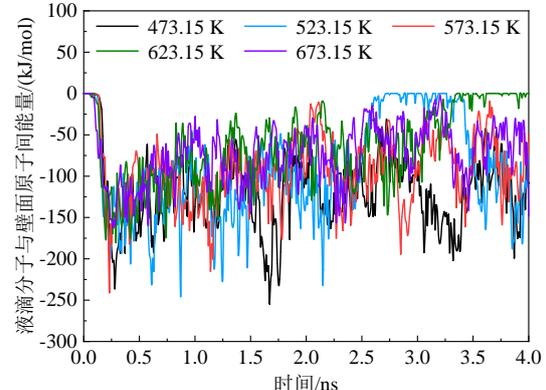
(a) 固液作用系数为 $\epsilon_1$ (b) 固液作用系数为 $\epsilon_2$ (c) 固液作用系数为 $\epsilon_3$ (d) 固液作用系数为 $\epsilon_4$ 

图 9 壁面温度对液滴分子与壁面原子间能量的影响

由图 9 可以得出, 当固液作用系数为 $\epsilon_1$ 和 $\epsilon_2$ 时, 液滴与不同温度壁面间的相互作用均先增强后趋于稳定。同时, 在相同的固液作用系数条件下, 随着壁面温度的升高, 液滴与不同壁面间的相互作用减弱。与固液作用系数为 $\epsilon_1$ 时相比, 当固液作用系数降低至 $\epsilon_2$ 时, 在相同温度的壁面上, 液滴分子与壁面原子间能量趋于稳定的时间延后。当固液作用系数由 $\epsilon_1$ 降低为 $\epsilon_2$ 、 $\epsilon_3$ 及 $\epsilon_4$ 时, 随着壁面温度的升高, 液滴分子与壁面原子间能量的变化幅度明显变小。由此可以总结出, 随着固液作用系数的降低, 壁面温度对

液滴分子与壁面原子间能量的影响减弱。

### 2.3 壁面微结构对液滴蒸发过程的影响分析

为了研究壁面粗糙结构对液滴蒸发过程的影响, 在不同的固液作用系数条件下, 对正十六烷液滴在具有不同微结构的较高温度的壁面上的蒸发过程进行模拟。在固液作用系数为 $\epsilon_1$ 的条件下, 当壁面温度为 573.15 K 时, 正十六烷液滴在光滑壁面及具有凸台状结构、凹坑状结构、网格状结构、二级凸台状结构的壁面上的蒸发过程的形态快照如图 10 所示。

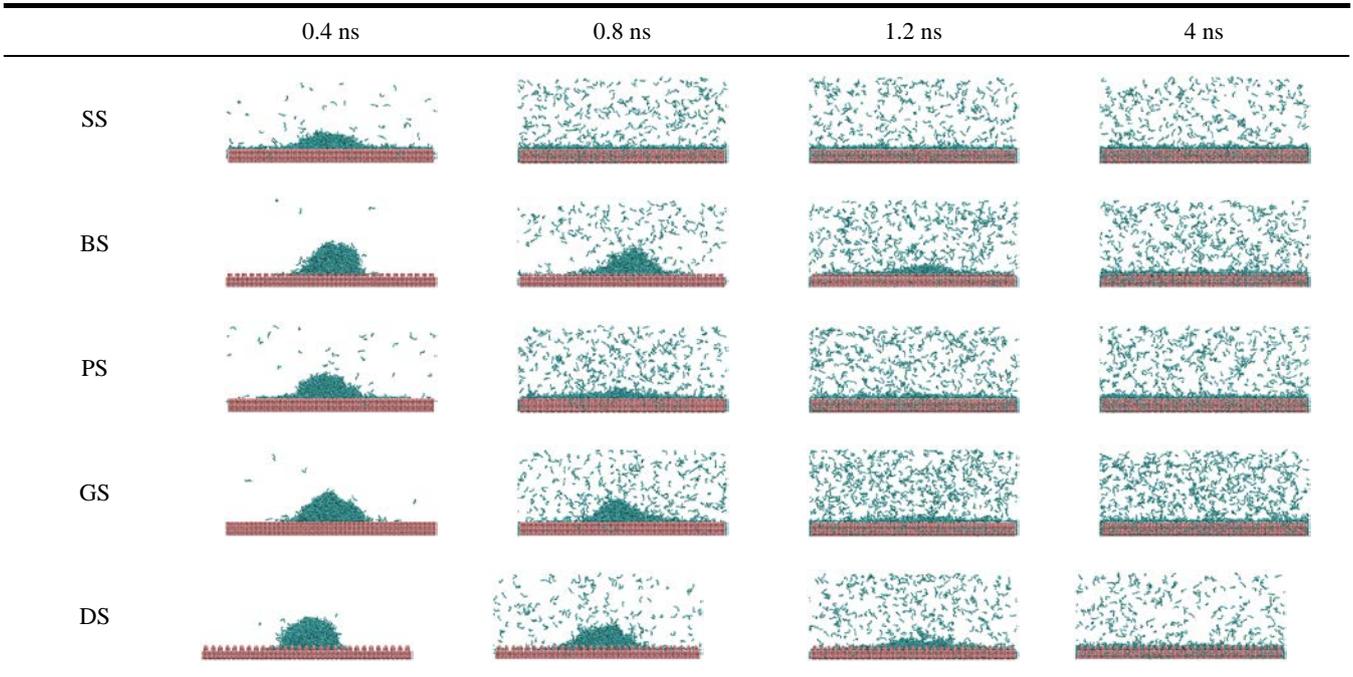
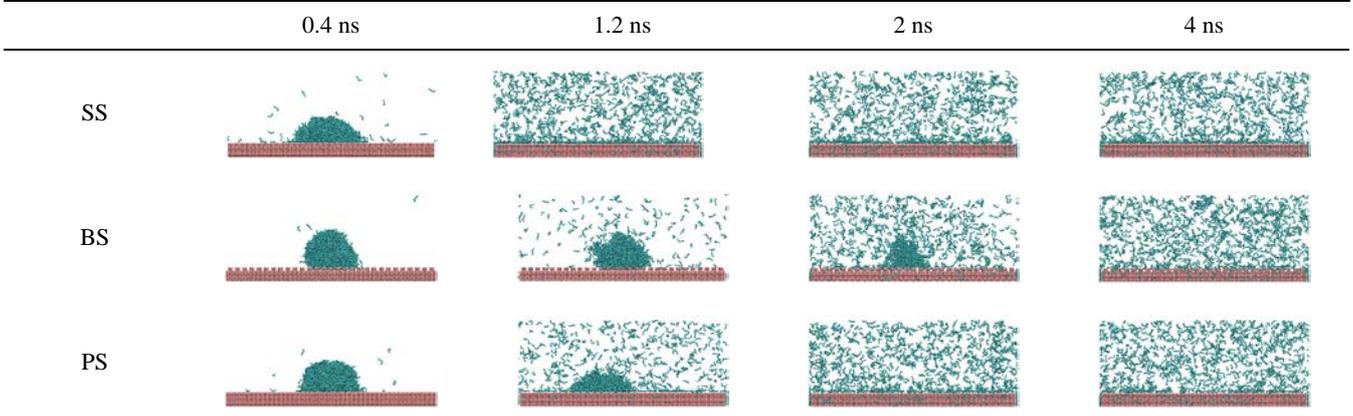


图 10 $\epsilon_1$ 条件下液滴在具有不同微结构的壁面上的形态快照

由图 10 可以看出, 在固液作用系数为 $\epsilon_1$ 的条件下, 在 0.4 ns 时, 不同壁面上的液滴的形态差异较大, 壁面 SS 和 PS 上的液滴的高度较低, 液滴的气相分子数较多, 壁面 BS、GS 和 DS 上的液滴的高度较高, 液滴的气相分子数较少。造成上述现象的原因是: 当固液作用系数为 $\epsilon_1$ 时, 与壁面 SS 和 PS 相比, 壁面 BS、GS 和 DS 的亲油性更弱, 壁面与液滴之间的

相互作用更弱, 液滴的铺展面积更小, 传热速率更慢。壁面 SS 上的液滴的蒸发速率最快, 这与液滴与光滑壁面的较大的接触面积有关。

在固液作用系数为 $\epsilon_2$ 的条件下, 当壁面温度为 573.15 K 时, 正十六烷液滴在光滑壁面及具有凸台状结构、凹坑状结构、网格状结构、二级凸台状结构的壁面上的蒸发过程的形态快照如图 11 所示。



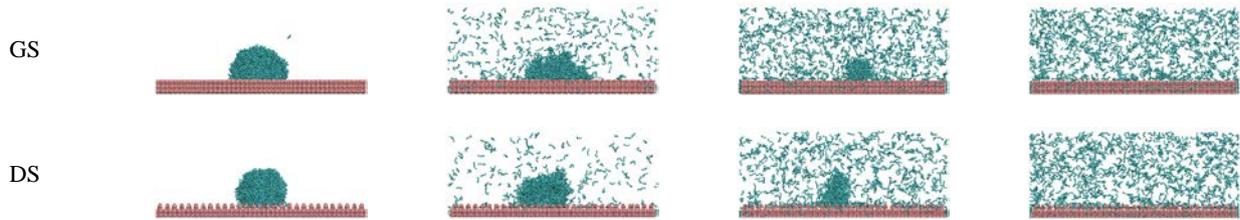


图 11  $\epsilon_2$  条件下液滴在具有不同微结构的壁面上的形态快照

与固液作用系数为  $\epsilon_1$  时相比, 当固液作用系数降低至  $\epsilon_2$  时, 在液滴撞击壁面前期的相同时刻, 相同壁面上的液滴的高度升高。同时, 相同壁面上的液滴的蒸发结束时间延后。在 2 ns 时, 壁面 SS 和 PS 上的液滴的轮廓变得不清晰, 而在壁面 BS、GS 和 DS 上的液滴的轮廓仍能观察到, 即壁面 SS 和 PS 上的液滴的蒸发速率比壁面 BS、GS 和 DS 上的液滴的蒸

发速率更快。由此可以得出, 壁面的亲油性越弱, 液滴与壁面间的接触面积较小, 导致蒸发速率越慢。

在固液作用系数为  $\epsilon_3$  的条件下, 当壁面温度为 573.15 K 时, 正十六烷液滴在光滑壁面及具有凸台状结构、凹坑状结构、网格状结构、二级凸台状结构的壁面上的蒸发过程的形态快照如图 12 所示。

0.4 ns                      1.2 ns                      2 ns                      4 ns

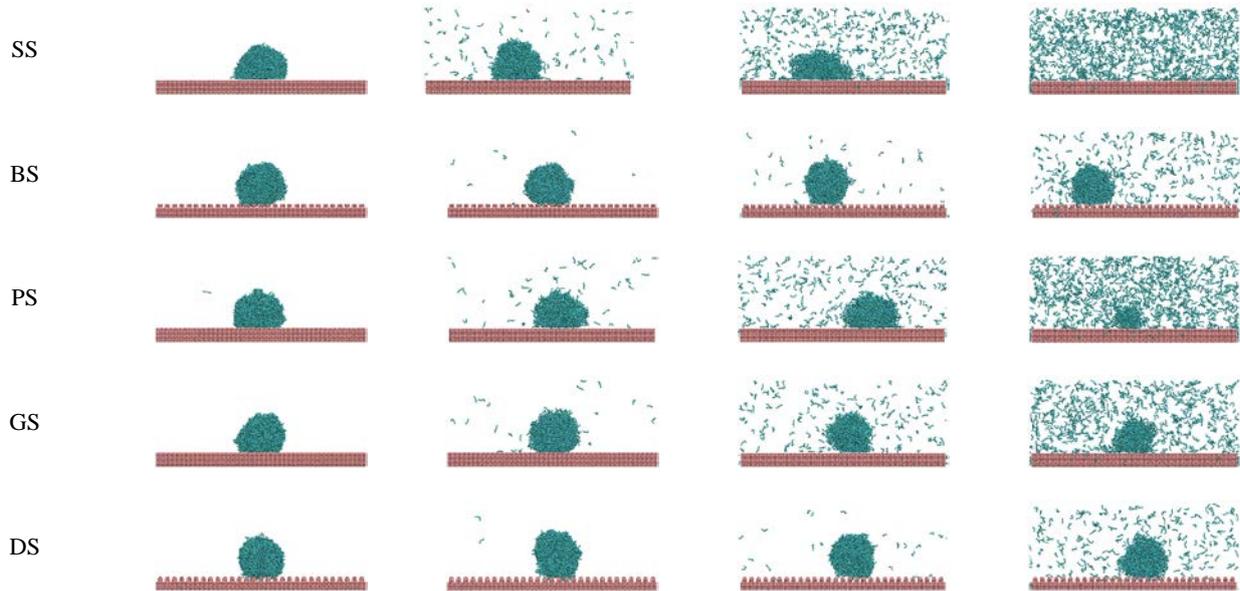
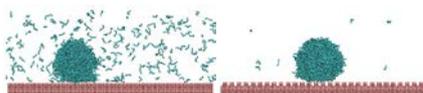


图 12  $\epsilon_3$  条件下液滴在具有不同微结构的壁面上的形态快照

当固液作用系数由  $\epsilon_2$  降低至  $\epsilon_3$  时, 在相同时刻, 相同壁面上的液滴的高度明显升高, 即液滴的蒸发速率显著降低。对于光滑壁面 SS 上的液滴, 在 4 ns 时, 液滴的轮廓变得不清晰。然而, 对于具有不同微结构的其他四种壁面 BS、PS、GS 和 DS, 在 4 ns 时, 仍能观察到液滴的轮廓。因此, 壁面的粗糙结构可使液滴的蒸发速率降低, 这与粗糙结构导致壁面亲油性降低、疏油性增强有关。

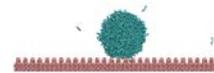
在固液作用系数为  $\epsilon_4$  的条件下, 当壁面温度为 573.15 K 时, 在 4 ns 时, 正十六烷液滴在壁面 SS、BS、PS、GS 和 DS 上的形态快照如图 13 所示。



(a) SS                      (b) BS



(c) PS                      (d) GS



(e) DS

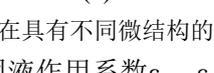


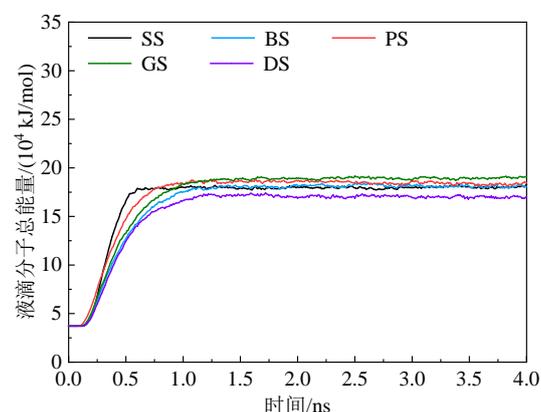
图 13  $\epsilon_4$  条件下液滴在具有不同微结构的壁面上的形态快照

与较高的固液作用系数  $\epsilon_1$ 、 $\epsilon_2$  及  $\epsilon_3$  相比, 当固液作用系数降低至  $\epsilon_4$  时, 相同壁面上的液滴的蒸发速率明显降低。由此可以得出, 随着固液作用系数的降

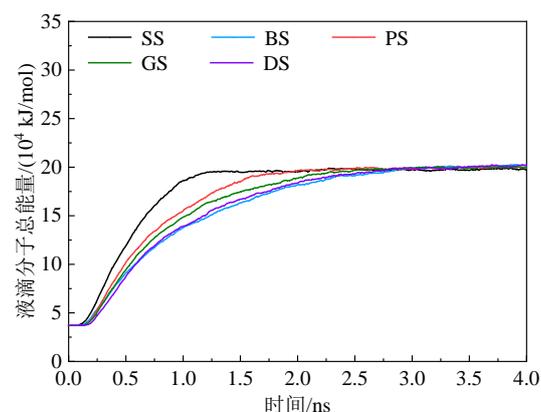
低, 传热速率减慢。对于上述五种壁面, 在 4 ns 时, 均能清晰地观察到液滴的轮廓。对于壁面 BS 和 DS, 仅有少量的液滴分子由液相转变为气相, 这表明凸台状及二级凸台状结构可使液滴的蒸发速率明显降低。

## 2.4 壁面微结构对热量传递过程的影响分析

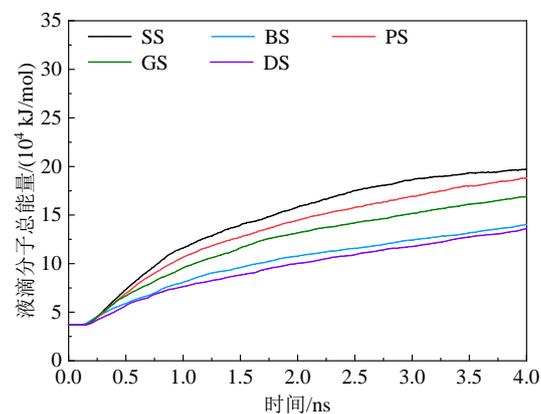
为了量化具有不同微结构的较高温度的壁面与液滴间的传热过程, 在不同的固液作用系数条件下, 对在具有不同微结构的高温壁面上的液滴分子的总能量进行计算。在不同的固液作用系数条件下, 当壁面温度为 573.15 K 时, 壁面微结构对液滴分子总能量的影响如图 14 所示。



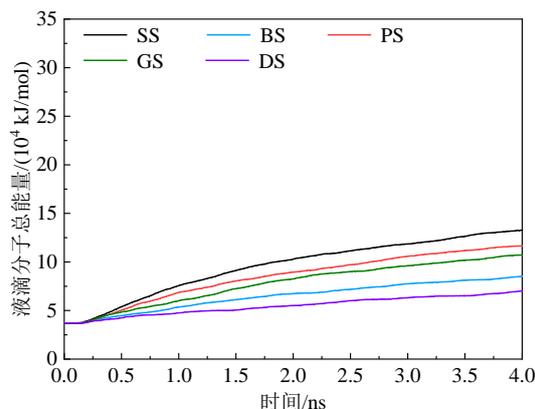
(a) 固液作用系数为 $\epsilon_1$



(b) 固液作用系数为 $\epsilon_2$



(c) 固液作用系数为 $\epsilon_3$



(d) 固液作用系数为 $\epsilon_4$

图 14 壁面微结构对液滴分子总能量的影响

由图 14 可以看出, 当固液作用系数为 $\epsilon_1$ 和 $\epsilon_2$ 时, 在具有不同微结构的壁面上的液滴分子的总能量均先增加后趋于稳定。与固液作用系数为 $\epsilon_1$ 时相比, 当固液作用系数降低至 $\epsilon_2$ 时, 在撞击具有相同微结构的壁面的初期, 液滴分子总能量的增加速度变得更加缓慢, 且液滴分子总能量趋于稳定的时间延后。当固液作用系数为 $\epsilon_2$ 时, 在具有不同微结构的壁面上的液滴分子的总能量趋于稳定后几乎一致。当固液作用系数为 $\epsilon_3$ 和 $\epsilon_4$ 时, 在具有不同微结构的壁面上的液滴分子的总能量的排序均为:  $SS > PS > GS > BS > DS$ 。此外, 随着固液作用系数由 $\epsilon_3$ 降低至 $\epsilon_4$ 时, 在具有相同微结构的壁面上, 液滴分子总能量减少。

## 3 结论

(1) 当液滴撞击加热的壁面时, 随着时间的推移, 由液相转变为气相的液滴分子的数量增加, 直至液滴完全蒸发。在液滴蒸发的过程中, 液滴形态的变化较复杂。在液滴蒸发的后期, 在固液界面处, 液滴分子以团簇形式存在。随着固液作用系数的降低, 在相同温度的壁面上, 由液相转变为气相的液滴分子的数量明显减少。

(2) 当固液作用系数由 $\epsilon_2$ 降低至 $\epsilon_3$ 和 $\epsilon_4$ 时, 在相同温度的壁面上, 加热壁面与液滴之间传热面积减小, 固液界面的热阻增加, 壁面原子向液滴分子传热速率减慢, 导致液滴分子总能量减少。在较大的固液作用系数条件下, 液滴在加热壁面上的蒸发时, 随着壁面温度的升高, 加热的壁面与液滴之间的温差升高, 从温度较高的壁面向温度较低的液滴传递的热量增加, 液滴分子总能量增加。

(3) 当固液作用系数为 $\epsilon_1$ 和 $\epsilon_2$ 时, 液滴与不同温度壁面间的相互作用均先增强后趋于稳定。同时,

在相同的固液作用系数条件下,随着壁面温度的升高,液滴与不同壁面间的相互作用减弱。当固液作用系数由 $\varepsilon_1$ 降低至 $\varepsilon_2$ 时,在相同温度的壁面上,液滴分子与壁面原子间能量趋于稳定的时间延后。随着固液作用系数由 $\varepsilon_1$ 降低至 $\varepsilon_2$ 、 $\varepsilon_3$ 及 $\varepsilon_4$ 时,壁面温度对液滴分子与壁面原子间能量的影响减弱。

(4) 当固液作用系数为 $\varepsilon_1$ 和 $\varepsilon_2$ 时,在具有不同微结构的壁面上的液滴分子的总能量均呈先增加后趋于稳定的趋势。当固液作用系数由 $\varepsilon_1$ 降低至 $\varepsilon_2$ 时,在具有相同微结构的壁面上,液滴分子总能量趋于稳定的时间延后。当固液作用系数为 $\varepsilon_3$ 和 $\varepsilon_4$ 时,在具有不同微结构的壁面上的液滴分子的总能量的排序均为:光滑壁面>凹坑状壁面>网格状壁面>凸台状壁面>二级凸台状壁面。

#### 参考文献:

- [1] LIANG G T, MUDAWAR I. Review of drop impact on heated walls[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, 106:103-126.  
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.10.031>
- [2] CHEN Y L, GUO L, CAI N N, et al. Evaporation characteristics and morphological evolutions of fuel droplets after hitting different wettability surfaces[J]. *Journal of Bionic Engineering*, 2023, 20(2):734-747.  
<https://doi.org/10.1007/s42235-022-00293-y>
- [3] TRAN T, STAAT H J J, SUSARREY-ARCE A, et al. Droplet impact on superheated micro-structured surfaces[J]. *Soft Matter*, 2013, 9(12):3272-3282.  
<https://doi.org/10.1039/c3sm27643k>
- [4] GUO L, CHEN Y L, CAI N N, et al. Dynamic behaviors of fuel droplets impacting on the wall surfaces with different wettability and temperatures[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2022, 212.  
<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2022.118536>
- [5] 白麟, 王宝和, 于志家. 正十六烷纳米液滴在光滑壁面上润湿行为的分子动力学模拟[J]. *河南化工*, 2017, 34(11): 25-29.  
<https://doi.org/10.14173/j.cnki.hnhg.2017.11.005>  
BAI L, WANG B H, YU Z J. Molecular dynamics simulation of wetting behavior of n-hexadecane nanodroplets on smooth surfaces[J]. *Henan Chemical Industry*, 2017, 34(11): 25-29.
- [6] AMBROSIA M S, HA M Y, BALACHANDAR S. The effect of pillar surface fraction and pillar height on contact angles using molecular dynamics[J]. *Applied Surface Science*, 2013, 282:211-216.  
<https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2013.05.104>
- [7] NIU D, TANG G H. Static and dynamic behavior of water droplet on solid surfaces with pillar-type nanostructures from molecular dynamics simulation[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2014, 79:647-654.  
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2014.08.047>
- [8] KWON T W, LEE K H, SEO Y M, et al. Dynamic Wetting Behaviors of Water Droplets on Surfaces with Dual Structures at the Nanoscale[J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 2020, 129.  
<https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2020.103352>
- [9] KOISHI T, YASUOKA K, FUJIKAWA S, et al. Measurement of Contact-Angle Hysteresis for Droplets on Nanopillared Surface and in the Cassie and Wenzel States: A Molecular Dynamics Simulation Study[J]. *ACS Nano*, 2011, 5(9):6834-6842.  
<https://doi.org/10.1021/nn2005393>
- [10] HONG S D, HA M Y, BALACHANDAR S. Static and dynamic contact angles of water droplet on a solid surface using molecular dynamics simulation[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2009, 339(1):187-195.  
<https://doi.org/10.1016/j.jcis.2009.07.048>
- [11] CORDEIRO J, DESAI S. The Effect of Water Droplet Size, Temperature, and Impingement Velocity on Gold Wettability at the Nanoscale[J]. *Journal Of Micro And Nano-Manufacturing*, 2017, 5(3).  
<https://doi.org/10.1115/1.4036891>
- [12] LI Q, WANG B H, CHEN Y G, et al. Wetting and evaporation of argon nanodroplets on smooth and rough substrates: Molecular dynamics simulations[J]. *Chemical Physics Letters*, 2016, 662:73-79.  
<https://doi.org/10.1016/j.cplett.2016.04.090>
- [13] SHI B, DHIR V K. Molecular dynamics simulation of the contact angle of liquids on solid surfaces[J]. *Journal of Chemical Physics*, 2009, 130(3).  
<https://doi.org/10.1063/1.3055600>
- [14] YU J J, TANG R, LI Y R, et al. Molecular dynamics simulation of heat transport through solid-liquid interface during argon droplet evaporation on heated substrates[J]. *Langmuir*, 2019, 35(6):2164-2171.  
<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.8b04047>

- 
- [15] VO T Q, BARISIK M, KIM B. Near-surface viscosity effects on capillary rise of water in nanotubes[J]. *Physical Review E*, 2015, 92(5).  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.053009>
- [16] VO T Q, KIM B. Transport Phenomena of Water in Molecular Fluidic Channels[J]. *Scientific Reports*, 2016, 6.  
<https://doi.org/10.1038/srep33881>
- [17] RAMOS-ALVARADO B, KUMAR S, PETERSON G P. Wettability transparency and the quasiuniversal relationship between hydrodynamic slip and contact angle[J]. *Applied Physics Letters*, 2016, 108(7).  
<https://doi.org/10.1063/1.4942400>
- [18] SUN Y J, HUANG T, ZHAO J F, et al. Evaporation of a nanodroplet on a rough substrate[J]. *Frontiers Of Physics*, 2017, 12(5).  
<https://doi.org/10.1007/s11467-016-0631-0>
- [19] ZHANG J G, LEROY F, MULLER-PLATHE F. Evaporation of Nanodroplets on Heated Substrates: A Molecular Dynamics Simulation Study[J]. *Langmuir*, 2013, 29(31):9770-9782.  
<https://doi.org/10.1021/la401655h>
- [20] XIE C Y, LIU G Z, WANG M R. Evaporation Flux Distribution of Drops on a Hydrophilic or Hydrophobic Flat Surface by Molecular Simulations[J]. *Langmuir*, 2016, 32(32):8255-8264.  
<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.6b01986>
- [21] FAN Z Y, PEREIRA L F C, WANG H Q, et al. Force and heat current formulas for many-body potentials in molecular dynamics simulations with applications to thermal conductivity calculations[J]. *Physical Review B*, 2015, 92(9).  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.094301>
- [22] CHEN Y J, LI J F, YU B, et al. Nanoscale Study of Bubble Nucleation on a Cavity Substrate Using Molecular Dynamics Simulation[J]. *Langmuir*, 2018, 34(47):14234-14248.  
<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.8b03044>
- [23] LIU H Q, QIN X Y, AHMAD S, et al. Molecular dynamics study about the effects of random surface roughness on nanoscale boiling process[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 145.  
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.118799>
- [24] RODRIGUES J, DESAI S. The nanoscale Leidenfrost effect[J]. *Nanoscale*, 2019, 11(25):12139-12151.  
<https://doi.org/10.1039/c9nr01386e>