

表面润湿性及温度梯度对液滴蠕爬的影响

唐秀涛,戴庆文,王静秋,黄巍,王晓雷
(南京航空航天大学 机电学院,江苏 南京 210016)

摘要:采用分子动力学模拟的方法,探究温度梯度驱动下水滴在不同润湿性表面的蠕爬运动特性。研究表明:水滴在不同温度梯度驱动下,均从高温区域向低温区域运动,且水滴的蠕爬速度随温度梯度的增大而增大;水滴在固体表面运动时,底部会形成一层密度比较大的吸附层,并且润湿性较大的表面上水滴的吸附层密度较大。在润湿性较大且温度梯度较高的表面上,水滴具有较高的初始蠕爬速度,同时受到较大的摩擦力。

关键词:蠕爬;润湿性;温度梯度;分子动力学

中图分类号: O357.2 **文献标志码:** B **文章编号:** 1671-5276(2021)02-0055-03

Effect of Surface Wettability and Temperature Gradient on Migration of Droplet

TANG Xiutao, DAI Qingwen, WANG Jingqiu, HUANG Wei, WANG Xiaolei

(College of Mechatronical Engineering, Nanjing University of Aeronautics And Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: By molecular dynamics simulation method, the migration characteristics of water droplets on different wettability surfaces driven by temperature gradient were studied. The results show that the water droplets move from high temperature region to low temperature one driven by different temperature gradients, and the migration velocity of water droplets increases with the increase of temperature gradients. When the water droplets move on the solid surface, a layer with high density forms at the bottom, and the adsorption layer with high wettability on the surface has high density. On the surface with larger wettability and higher temperature gradient, the water droplet has a high initial migration velocity and is subjected to a high friction force.

Keywords: migration; wettability; temperature gradient; molecular dynamics simulation

0 引言

流体在接触表面不受外力作用而不断扩展的现象称为蠕爬^[1]。在摩擦系统中,每当两个表面相互滑动时,由于摩擦产生的热量就会在摩擦区域产生热梯度,可能导致液体润滑剂从高温区域运动到低温区域。随着维纳电子技术的迅速发展,微纳电子器件朝着高效、微型、高集成的方向发展^[2],但也由此带来了发热量大、局部温度高的问题。因此如何通过流体运输的方式进行散热成为维纳电子技术进步的关键。上述均是由温度梯度导致润滑油发生蠕爬行为,可见对润滑油蠕爬运动机理的深入研究,对于控制摩擦副中润滑油的损失,降低磨损至关重要。表面性质和固-液界面的相互作用可以影响流体的运输^[3]。已有研究多数集中于表面润湿性对液滴接触角的影响或温度梯度对液滴蠕爬的影响,而关于润湿性和温度梯度两者耦合作用对液滴蠕爬影响的研究却很少。因此,本文将采用分子动力学模拟的方法,探究表面的润湿性和温度梯度对水滴蠕爬的影响。

1 模拟方法

1.1 模拟体系

模拟体系包括石墨烯表面和纳米水滴,如图1所示。石墨烯表面的尺寸为30 nm×10 nm,由11 644个碳原子组成。水滴由2 000个水分子组成,直径大小约5 nm。液滴放置在体系的左端,其质心距石墨烯左侧边缘6 nm,与石墨烯表面之间的垂直距离为3.3 nm。

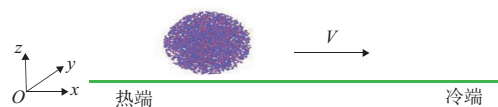


图1 初始模型

1.2 势能函数

水分子选取SPC/E^[4]刚体势能模型。总势能由短程

Lennard-Jones 势能和长程静电势能两部分组成,如式(1)^[5]所示。

$$U^s = U_e^s + U_{LJ}^s = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \frac{q_i^a q_j^b}{4\pi\epsilon_R r_{ij}^{ab}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N 4\epsilon_o \left[\left(\frac{\sigma_o}{r_{ij}^{oo}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_o}{r_{ij}^{oo}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

其中: σ_o 表示氧原子之间L-J势能的粘附直径; ϵ_o 表示氧原子之间L-J势能的势阱深度。对于水分子, σ_o 和 ϵ_o 取值分别为3.166 6Å和0.006 734 eV。

石墨烯中的碳原子之间的相互作用采用Airebo^[6]势函数。石墨烯中碳原子和水分子中氧原子之间的相互作用采取Lennard-Jones势函数,其形式如式(2)所示。

$$U_{LJ}^s = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N 4\epsilon_{co} \left[\left(\frac{\sigma_{co}}{r_{ij}^{co}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{co}}{r_{ij}^{co}} \right)^6 \right] \quad (2)$$

其中: σ_{co} 为碳原子与氧原子之间L-J势能的粘附直径,取值为3.19 Å; r_{ij}^{co} 为碳原子与氧原子之间的距离; ϵ_{co} 为L-J势能的势阱深度。 ϵ_{co} 作为水滴与石墨烯表面之间相互作用系数,决定着水滴与表面之间的吸引力,因此可以用通过改变 ϵ_{co} 的大小来模拟不同表面的润湿性。

1.3 模拟细节

本文采用LA mmPS^[7]软件进行模拟。模拟盒的尺寸为30 nm×10 nm×12 nm。在x、y方向采用周期性边界条件,在z方向采用固壁和镜像边界条件。在x方向,石墨烯两端10 Å的长度设置为固定端。与固定端相邻的长度为20 Å的区域,左端设置为热浴端,右端设置为冷浴端,用Nosé-Hoover方法对热浴端和冷浴端进行控温。剩下的中间区域用NVE系统保持能量守恒。模拟初始时刻,水滴质心固定在靠近热端的区域,在300 K的温度下运行1 ns使体系达到平衡。之后仅对热浴端和冷浴端进行控温,运行1.5 ns以使表面产生所需温度梯度。最后解除水滴质心的固定,运行1 ns,实现水滴在石墨烯表面的蠕爬过程的模拟。

本文通过对热浴端和冷浴端进行控温,获得 ΔK_1 (343 K~273 K)、 ΔK_2 (363 K~273 K)、 ΔK_3 (383 K~273 K)3组温度梯度。在每一温度梯度下,分别选取 ϵ_{co}^1 (0.002 7 eV)、 ϵ_{co}^2 (0.003 7 eV)、 ϵ_{co}^3 (0.004 7 eV)3组相互作用系数,来探究表面润湿性和温度梯度对水滴蠕爬的影响。

2 结果与讨论

2.1 水滴运动分析

在模拟中发现:液滴在不同温度梯度的表面上,均从高温区域向低温区域蠕爬,且液滴的蠕爬速度随温度梯度的增大而增大。

图2为水滴在不同温度梯度和润湿性表面的蠕爬速度随时间变化图。从图中可以看出,在不同温度梯度下,水滴具有不同的初始速度,方向与温度梯度方向相同,而且热端温度越高,水滴初始速度越大。其原因主要是由于水滴突然受到石墨烯表面温度梯度的作用,产生较大的动

量^[8],而且由于表面温度梯度导致水滴表面产生表面张力梯度。温度高的一侧表面张力低,温度低的一侧表面张力高,使得水滴由表面张力低的一侧向表面张力高的一侧运动。

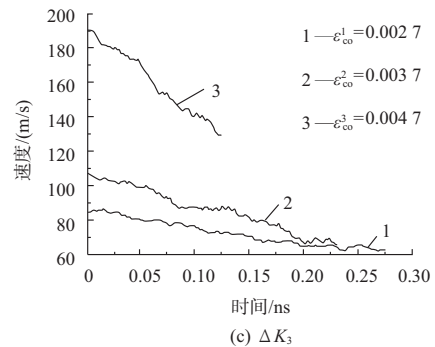
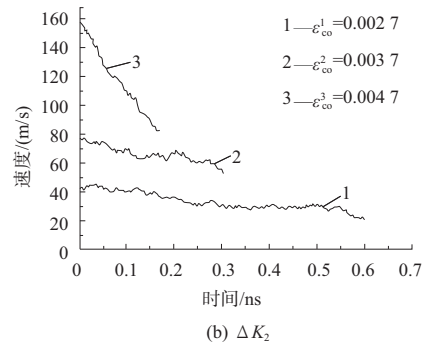
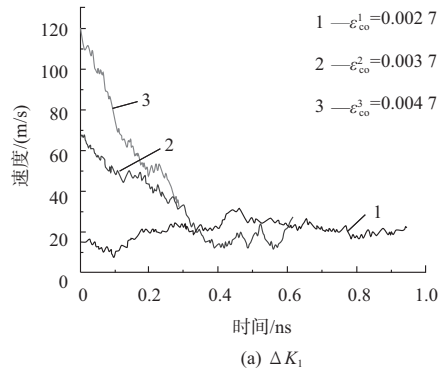


图2 蠕爬速度随时间变化曲线

从图2也可以看出,在同一温度梯度下,相互作用系数越大,水滴蠕爬的初始速度越大;同一相互作用系数下,温度梯度越大的表面,水滴蠕爬的初始速度越大。相同温度梯度下,在润湿性比较大的表面上,水滴与固体表面的接触角比较小,表面张力在温度梯度方向的分量较大,即驱动液滴沿温度梯度方向运动的力变大,因此在润湿性比较大的固体表面上水滴具有较大的初始速度。而在相同相互作用系数下,在温度梯度大的表面,水滴表面产生的表面张力梯度大,所以在温度梯度大的表面上,水滴蠕爬速度较快。

2.2 水滴密度分析

图3所示为水滴内部原子数密度变化曲线。选取温度梯度为 ΔK_2 ,液滴沿梯度方向运动至中点处时,对纳米

水滴在高度方向上的原子数密度进行计算。将纳米水滴在高度方向上每 1 Å 分成一层,计算每层的原子数密度,最后绘制出原子数密度在 z 方向上的变化图,如图 3 所示。

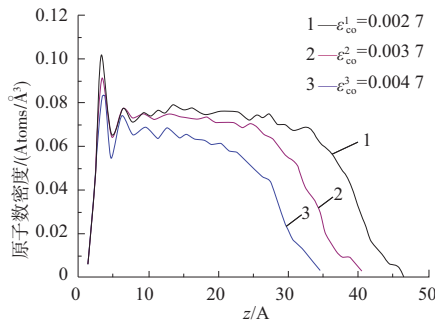


图 3 原子数密度变化曲线

可以发现,在 3 组相互作用系数 (ε_{co}^1 、 ε_{co}^2 、 ε_{co}^3) 下,水滴底部距表面 3.5 Å 处均有一层密度较大的区域,分别为 0.083 Atoms/Å³、0.091 Atoms/Å³、0.103 Atoms/Å³,而且相互作用系数越大,水滴底部密度也越大。这主要是由于水滴与表面两者之间的相互作用越强导致的。

2.3 水滴受力分析

从图 2 中也可以看出:相互作用系数越大,水滴蠕爬速度下降得越快。表 1 为水滴在运动过程中,沿温度梯度方向受到的平均合外力。

表 1 不同条件下水滴蠕爬过程中受到的平均作用力
单位: pN

相互作用系数	ΔK_1	ΔK_2	ΔK_3
ε_{co}^1	0.50	-1.98	-4.82
ε_{co}^2	-3.80	-4.80	-10.25
ε_{co}^3	-18.06	-25.72	-28.80

从表中可以看出,除了温度梯度为 ΔK_1 ,相互作用系数为 ε_{co}^1 的情况以外,水滴在运动过程中均受到与运动方向相反的力,并且相互作用系数越大的表面,水滴受到的阻力越大。这主要与水滴在运动过程中受到的摩擦力有关。水滴在蠕爬过程中受到的摩擦力可以由公式 (3) 表示^[9]。

$$F_f = \lambda Av \quad (3)$$

其中: λ 表示摩擦系数; v 表示水滴的运动速度; A 表示水滴与表面的接触面积。摩擦系数的大小与水滴的黏度有关,在润湿性比较大的表面上,会有更多的水分子聚集在水滴与表面的接触面附近,造成水滴的黏度较大,摩擦系数较大;在润湿性较小的表面上,水分子在水滴高度方向的分布较为均匀,分布在接触面附近的水分子相对较少,

从而水滴的黏度较小,摩擦系数较小^[9]。另外,润湿性较大的表面上,水滴与表面之间有较大的接触面积和较大的初始速度;在润湿性较小的表面上,水滴与表面有较小的接触面积和较小的初始速度。综上可以看出,从摩擦系数、接触面积和运动速度 3 个因素考虑,在润湿性较大的表面上,水滴具有较大的黏度、较大的接触面积、较大的蠕爬速度,水滴受到较大的摩擦力,在蠕爬过程中速度减小得较快;在润湿性较小的表面上,水滴具有较小的黏度、较小的接触面积、较小的蠕爬速度,水滴受到较小的摩擦力,在蠕爬过程中速度减小得较慢。

3 结语

本文利用分子动力学方法研究了表面润湿性和温度梯度对水滴蠕爬的影响。研究表明:水滴在不同温度梯度驱动下,均从高温区域向低温区域运动。水滴在不同润湿性的表面上,会在底部产生密度较大的吸附层,并且固体表面的润湿性越大,吸附层的密度越大。对于相同温度梯度,润湿性较大的表面,水滴蠕爬速度较快,但在蠕爬过程中,也受到较大的摩擦力,水滴蠕爬速度减小得较快;润湿性较小的表面,水滴蠕爬速度较慢,但在蠕爬过程中,受到的摩擦力也比较小,水滴的蠕爬速度减小得也比较慢。

参考文献:

- [1] 温铸涛,黄平. 摩擦学原理[M]. 4 版. 北京:清华大学出版社,2012:446-447.
- [2] 倪浩浩,李嘉懿,邵传东. 基于分子动力学的纳米轴承动压润滑研究[J]. 机械制造与自动化,2019,48(2):33-35.
- [3] 董鑫,张忠强,程广贵,等. 温度梯度驱动下水银在石墨烯表面的运动特性[J]. 微纳电子技术,2015,52(7):439-445.
- [4] BERENDSEN H J C, GRIGERA J R, STRAATSMA T P. The missing term in effective pair potentials [J]. The Journal of Physical Chemistry, 1987, 91(24):6269-6271.
- [5] 王宝和,王蕴博,李群,等. 水汽液界面特性的平衡分子动力学模拟[J]. 河南化工,2012,29(21):31-35.
- [6] BRENNER D W, SHENDEROVA O, HARRISON J A, et al. A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, 14(4):783-802.
- [7] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1):1-19.
- [8] RAJEGOWDA R, KANNAM S K, HARTKAMP R, et al. Thermophoretically driven water droplets on graphene and boron nitride surfaces [J]. Nanotechnology, 2018, 29(21):215401.
- [9] LIU Q C, XU B X. A unified mechanics model of wettability gradient-driven motion of water droplet on solid surfaces [J]. Extreme Mechanics Letters, 2016, 9:304-309.

收稿日期:2020-01-10