

Pb 液滴在 Ni 基底润湿铺展行为的分子动力学模拟*

邱丰 王猛[†] 周化光 郑璇 林鑫 黄卫东

(西北工业大学, 凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

(2012年12月26日收到; 2013年2月28日收到修改稿)

采用分子动力学方法研究了 Pb 液滴在 Ni(100) 晶面、(110) 晶面和 (111) 晶面的铺展润湿行为. 结果表明: Pb 液滴在 Ni(100) 及 (111) 基底上的润湿铺展现象呈各向同性, 而在 Ni(110) 基底上的润湿铺展现象呈明显的各向异性, 且这种各向异性源于 Ni(110) 晶面点阵结构上 Pb 原子沿不同晶向的扩散机制及速度的明显差异; Pb 液滴在 Ni(111) 晶面上铺展时, 未发生表面合金化, 液滴铺展动力学描述近似满足 $R^2 \propto t$, 而液滴在 (100) 晶面和 (110) 晶面上铺展时表面产生合金化现象, 铺展动力学关系近似满足 $R^4 \propto t$, 且液滴在 (100) 晶面上的铺展速度高于 (110) 晶面上的铺展速度.

关键词: 分子动力学, 润湿各向异性, 铺展膜, 扩散机制

PACS: 02.70.Ns, 68.08.Bc, 68.49.-h, 82.40.Ck

DOI: 10.7498/aps.62.120203

1 引言

润湿是自然界中的一个基本物理现象, 在工程应用中润湿现象也占据着十分重要的地位. 在经典的润湿理论范畴, 基于力学平衡及热力学分析, 人们对包括毛细吸附、润湿平衡形态在内的多种宏观现象给出了解释^[1-3], 有研究者在此基础上对微观异质相变等现象进行了分析^[4], 但是对润湿现象所涉及微观机制的认识仍十分粗略. 20 世纪 80 年代末, Heslot 等^[5] 对聚二甲基硅氧烷 (PDMS) 纳米尺度液滴在 Si 晶片表面的润湿现象进行了实验研究, 发现在润湿过程中液滴前端会首先形成一个铺展膜 (precursor film), 其厚度与原子尺度相当, 液滴通过铺展膜向前推进, 直至其接触角达到平衡.

近年来, 分子动力学模拟为润湿铺展微观机制的深入研究提供了可行途径. Edmund 等^[6] 采用分子动力学方法对 Pb 液滴在 Cu(100) 基底上的铺展润湿过程进行了研究, 发现允许 Pb 在 Cu(100) 晶面上形成表面合金时, 基底表面不会形成原子尺度铺展膜, 而在冻结 Cu 基底以避免形成表面合金时, 基底表面则会形成原子尺度铺展膜, 由此认为

Pb 和 Cu(100) 晶面的表面合金化阻碍了 Pb 原子在基底表面形成铺展膜. 而 Timoshenko 等^[7] 同样针对 Pb/Cu 润湿体系进行了分子动力学模拟, 在仅冻结 Cu 基底底层原子, 同时允许基底界面原子运动的情况下, 发现原子尺度铺展膜在 Cu 三种晶面基底是存在的, 相比于 Cu(110) 和 Cu(111) 晶面, (100) 晶面上的原子尺度铺展膜中原子的排列无序度较高. 这些结果表明, 晶面结构差异、液相原子与基体表面的合金化程度均对铺展膜的形成产生影响.

分子动力学模拟结果还表明, 液滴原子与基底原子之间的作用强度也是影响铺展膜能否形成的可能原因. Swiler^[8] 以 Ag-Cu 嵌入势体系为基础, 考察了 Ag, Cu 互为基底时的润湿过程, 发现当 Ag 在 Cu 基底表面润湿时产生了铺展膜, 而设定 Cu 在 Ag 基底上润湿时却没有产生铺展膜, 他认为这是由于 Ag 的液相原子与 Cu 基底之间的作用较强, 因而更易于实现 Ag 的液相原子在 Cu 基底表面的铺展. 需要注意的是, 在 Swiler 的研究中, 采用了固定基底相晶格的方式来获得稳定的固相结构, 这导致模拟结果可能出现偏差. Kubo 等^[9] 通过改变 In/Cu(111) 体系中原子之间的作用力进行模拟, 发现当 In 和 Cu 原子之间的作用力减小到原作用力

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011CB610402) 和国家自然科学基金 (批准号: 51271213, 50901061) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: wangmeng@nwpu.edu.cn

的 50% 时便不再会产生铺展膜. 由于这些模拟都通过人为调整势参数来获得不同的界面作用, 导致模拟结果与真实过程存在偏差.

对于液滴在基底表面铺展动力学的描述, 目前还存在不同的观点. 已有的实验和模拟表明, 在润湿过程中, 若液滴在固相基底表面形成了铺展膜且液滴持续向铺展膜提供液相原子, 则铺展膜的铺展半径 R 和时间 t 之间近似满足 $R^2 \propto t$ [10-12]. 而当液相原子与基底之间存在表面合金化且形成脚状润湿膜时, 若润湿膜的推进受限于接触线上的反应速度, 则润湿膜的铺展半径 R 与和时间 t 近似满足 $R \propto t$ [13,14]; 若润湿膜的推进受反应物扩散速度控制, 则润湿膜的铺展半径 R 与和时间 t 近似满足 $R^4 \propto t$ [15,16]. 然而, 在典型的基底晶格结构条件下, 目前还缺乏铺展动力学机制与表面合金化之间对应关系的明晰认识.

为了进一步明确基底晶面结构对液相在基底表面润湿铺展行为的微观影响机制, 本文采用分子动力学模拟方法研究了 Pb 液滴在 FCC 金属 Ni 不同晶面的润湿铺展行为, 从基底表面晶格结构的角度分析了影响铺展膜产生的可能原因, 并就不同晶面上的液滴润湿铺展动力学特性进行了考察.

2 计算方法

2.1 势能函数

选用包含量子修正的 Sutton-Chen (quantum Sutton Chen, QSC) 势能函数 [17-19] 来描述原子间的相互作用. 相比前人研究 [6,7] 中所使用的 EAM 原子嵌入势, Sutton-Chen 势能函数形式更为简单, 在原子间长程作用计算精度方面更具优势, 更适合于界面性质的研究, 同时也能够准确反映表面的弛豫机制 [20]. Sutton-Chen 势能函数的表达式如下:

$$E = \varepsilon \left[\frac{1}{2} \sum_i \sum_j V(r_{ij}) - c \sum_i \sqrt{\rho_i} \right], \quad (1)$$

$$V(r_{ij}) = \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^n, \quad (2)$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^m, \quad (3)$$

其中 E 为体系总势能, $V(r_{ij})$ 是原子 i, j 之间的双体排斥势, r_{ij} 表示两原子 i 和 j 之间的距离, ρ_i 是与 i 原子相关的局域能量密度, ε 是具有能量单位

的参数, c 是正的无量纲参数, a 表示面心立方晶格常数, n 和 m 是正整数并且 $n > m$. 相关的势函数参数具体取值如表 1 所示, Pb 原子和 Ni 原子之间的相互作用势应用 Lorentz-Berthelot 混合法则 (mixing rule) 予以确定 [20], 以避免人为参数调整带来的偏差.

表 1 Pb 原子和 Ni 原子经过量子论修正 Sutton-Chen 势能函数参数

	$a/\text{\AA}$	$\varepsilon/10^{-2} \text{ eV}$	c	m	n
Pb	4.94950	0.55772	45.88200	7	10
Ni	3.51570	0.73767	84.74500	5	10

2.2 模型构建

模拟所采用的润湿模型构建方法如下: 从已经在 700 K 温度下平衡的体液相 Pb 原子中截取半径为 4 nm 的 Pb 液滴作为润湿模型中的液相; Ni(100) 晶面基底由 102400 个 Ni 原子构成, x, y 方向的边长均为 281.256 Å, 将 Ni(100) 基底在 NPT 系综, 700 K 条件下运算 50 ps, 通过能量和体积曲线判断其已达到平衡; 随后将 Pb 液滴和 Ni(100) 基底构建为一个润湿模型系统, 如图 1 所示. Ni(110), Ni(111) 基底的润湿模型构建方法同上, 其中 Ni(110) 基底由 106176 个原子构成, x, y 方向的边长分别为 277.740 和 278.429 Å, Ni(111) 基底由 129024 个原子构成, x, y 方向的边长分别为 278.429 和 275.573 Å. 模拟过程中温度恒定为 700 K, 在 NVT 系综条件下, 使用 Berendsen 热浴和压强浴进行温度和压强的控制, 用 leap-frog 算法进行牛顿运动方程积分, 时间步长为 1.0 fs. 在 x, y 方向上使用周期性边界条件, 在 z 方向使用开放的边界条件, 计算过程中没有固定基底原子, 使其可以与液相原子充分作用, 以提高计算结果的可靠性. 模拟过程使用 DL_POLY 软件包 [21] 进行计算.

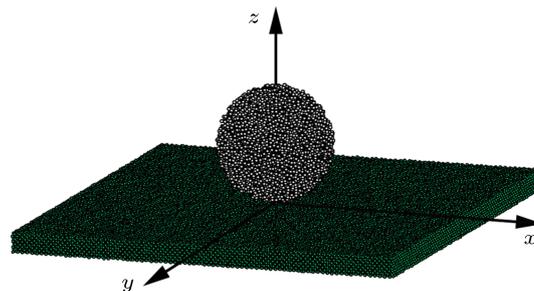


图 1 Pb 液滴在 Ni(100) 晶面上的润湿模型构型

2.3 界面分析方法

模拟中采用粒子密度表征固液界面的扩散现象;采用液滴铺展距离 R 和时间 t 的关系表征铺展膜动力学过程. 在进行界面分析时,沿垂直于基底表面方向将界面附近的 Pb 和 Ni 进行分层(每层高度略大于一个原子直径),之后对每一层的原子分布进行统计和分析,具体计算方法如下.

1) 粒子密度的表征

界面的粒子密度 $\rho_i(z)$ 定义如下 (i 为 Pb 或 Ni):

$$\rho_i(z) = \frac{\langle N_z^i \rangle}{A_{xy} \Delta z}, \quad (4)$$

其中 Δz 为分层的高度, A_{xy} 为每层的面积, N_z^i 为每层平均原子数.

2) 铺展膜动力学的表征

提取底层液滴分布范围的外廓形态,求得液滴在不同晶面的铺展距离,并根据以下关系式对其铺展动力学进行拟合描述:

$$R^n = D_0 t, \quad (5)$$

其中 R 铺展膜铺展距离(也称铺展半径), D_0 为铺展膜液相原子在固相基底表面上的扩散系数, t 为时间, n 为与铺展动力学相关联的正整数.

3 结果分析与讨论

图 2 为模拟 100 ps 时 Pb 液滴在 3 个晶面上润湿情况的剖面图. 从图中可以看出, Pb 液滴在三个晶面上都产生了润湿铺展膜. 在 Ni(100) 和 Ni(111) 晶面, Pb 液滴边缘形成了单原子厚度的铺展膜,并

且 Pb 液滴在 Ni(111) 晶面上的铺展速度明显快于在 Ni(100) 晶面的铺展速度;在 Ni(110) 基底上, Pb 液滴前端形成了一种由液滴边缘平滑过渡的脚状 (foot) 铺展形态 [22],但在液滴外围并未形成完整的原子厚度的铺展膜结构.

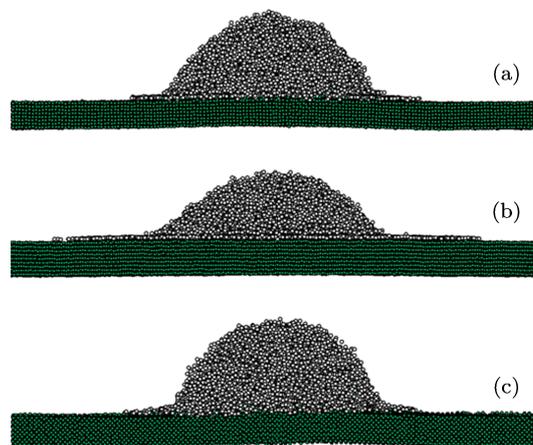


图 2 Pb 在 (a) Ni(100), (b) Ni(111), (c) Ni(110) 基底上计算 100 ps 时刻剖面图

继续计算直至 Pb 液滴在三个晶面上均达到接触角平衡,模拟结果显示 Ni(100) 和 Ni(111) 晶面上的液滴平衡形态接近于正圆形,没有呈现出明显的各向异性(图 3(a), (b));而 Ni(110) 晶面上的液滴平衡形态则呈现为椭圆状(图 3(c)). 从图 4 可以看出, Pb 液滴在 Ni(110) 晶面上沿基底 $[\bar{1}10]$ 晶向方向形成了单原子厚度铺展膜,而沿基底 $[100]$ 晶向方向则形成了典型的脚状 (foot) 形态. 模拟结果同时表明,单原子厚度铺展膜的铺展速度比脚状组织的铺展速度快, Pb 液滴在 Ni(110) 晶面上的润湿形态及润湿动力学均存在显著的各向异性.

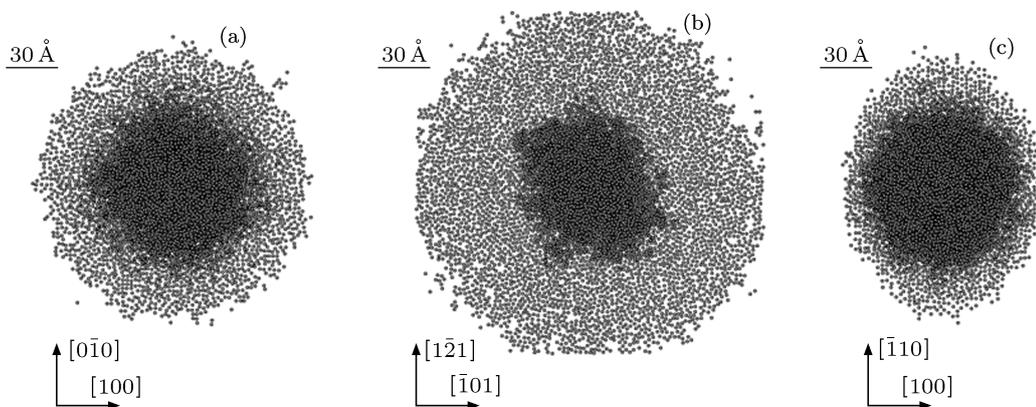
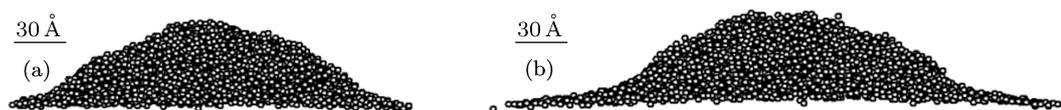


图 3 Pb 液滴在三个晶面达到接触角平衡时俯视图,坐标轴为基底沿 x, y 方向的晶向,为了直观反映 Pb 液滴形态而没有显示基底 (a) Ni(100) 基底上 Pb 液滴形态; (b) Ni(111) 基底上 Pb 液滴形态; (c) Ni(110) 基底上 Pb 液滴形态


 图4 Pb液滴在Ni(110)晶面达到接触角平衡时(a)沿[100]晶向剖面图,(b)沿 $[\bar{1}10]$ 晶向剖面图

分析认为,由于FCC金属Ni的(100)面由正方形晶格点阵排列组成,(111)面由密排六方晶格点阵组成,这两个晶面的点阵结构均具有较高的对称特性,所以Pb液滴在这两个晶面上产生的铺展膜原子分布趋向于各向同性;而(110)晶面由长方形点阵结构组成(如图5所示),且 $[\bar{1}10]$ 晶向为原子最密排晶向,Pb原子沿该晶向运动时,跨越晶格间隙势垒所需的能量较小,故Pb原子沿该晶向向前推进的速度较快.文献[23—26]研究了不同种类的液相原子在Ni,Pt等典型FCC金属(110)面上的运动规律,认为这种推进可以直接通过液相原子沿固相晶格的密排点阵表面的定向运动来完成;而Pb原子沿[100]晶向的扩散需要跨越晶格间隙形成的较高势垒,需要外部提供额外的能量才能够发生;而Basset和Webber^[27]的研究表明,FCC晶格的(110)晶面沿两个晶向的界面能相等,无法提供所需的额外能量,据此认为Pb液滴沿[100]晶向的运动需要通过Pb原子和Ni原子在能量涨落过程中随机发生的原子交换进行,因而推进速度较低,并形成脚状形态铺展.

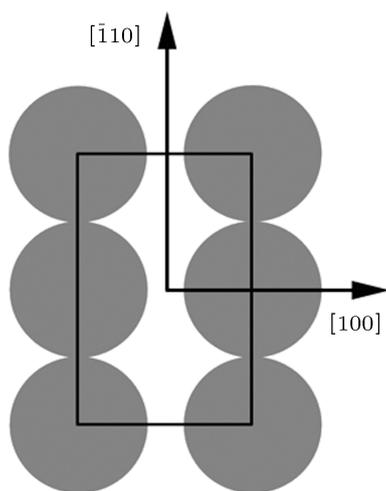


图5 FCC金属(110)晶面晶格点阵示意图

Pb液滴在Ni(110)晶面润湿现象的各向异性为解释原子尺度铺展膜形成原因提供了思路.Edmund等^[6]模拟Pb液滴在Cu(100)基底的润湿过

程中没有产生原子尺度铺展膜,他认为这是由于在基底表面通过原子交换形成的表面合金阻碍了底层Pb原子向前运动,进而阻碍了原子尺度厚度铺展膜的形成.由本文的模拟结果可以看出,润湿过程中因原子交换而导致的表面合金化确实会对铺展过程产生影响:当表面存在合金化现象时,Pb液滴的铺展速度明显减缓,Ni(100)和Ni(110)上的铺展速度明显低于Ni(111);液滴与基底不发生表面合金化时,Pb液滴的铺展速度较高,并在Ni(111)晶面上形成了明显的原子尺度铺展膜.但是Ni(110)上不同晶向的铺展现象也表明,尽管此时存在表面合金化现象,但受到不同晶向上原子扩散机制的控制,Pb原子在 $[\bar{1}10]$ 晶向上的直接推进可以形成原子尺度铺展膜,而在[100]晶向上,因Pb原子与Ni原子之间需通过原子交换向前推移,则仅形成了脚状形态的润湿膜.

本文进一步考察了不同晶面润湿过程中的表面合金化现象.图6给出了当Pb液滴在Ni(100),Ni(110)和Ni(111)晶面上达到接触角平衡时沿z方向的原子密度分布.从图中可以看出,在(111)基底表面没有发生Pb原子和Ni原子的交换,不存在表面合金化现象,而在其他两个晶面上Pb原子和Ni原子之间均发生了交换现象.一个可能的原因是Ni(111)晶面为最密排面,原子排列十分紧密,原子间隙较小,液相原子和固相原子之间扩散较为困难,而Ni(100)和Ni(110)晶面为非密排面,基底固相原子间隙较大,为液相原子和固相原子之间的扩散提供了空间,所以产生了表面合金化现象;并且随着时间推移,相互扩散的Pb原子和Ni原子形成较为稳定的表面合金,阻碍铺展膜向前运动.在(100)晶面上产生的原子尺度铺展膜快于在(110)晶面 $[\bar{1}10]$ 晶向上产生的原子尺度铺展膜,这是因为(100)晶面上Pb原子和Ni原子之间互扩散距离小于(110)晶面的互扩散程度(如图6),在Ni(100)基底的表面合金化程度低于Ni(110)基底.通过上述分析可知,表面合金化是影响铺展动力学的主要因素,合金化程度越高,形成表面合金的反应速率越快,铺展膜向前推进的阻力越大.

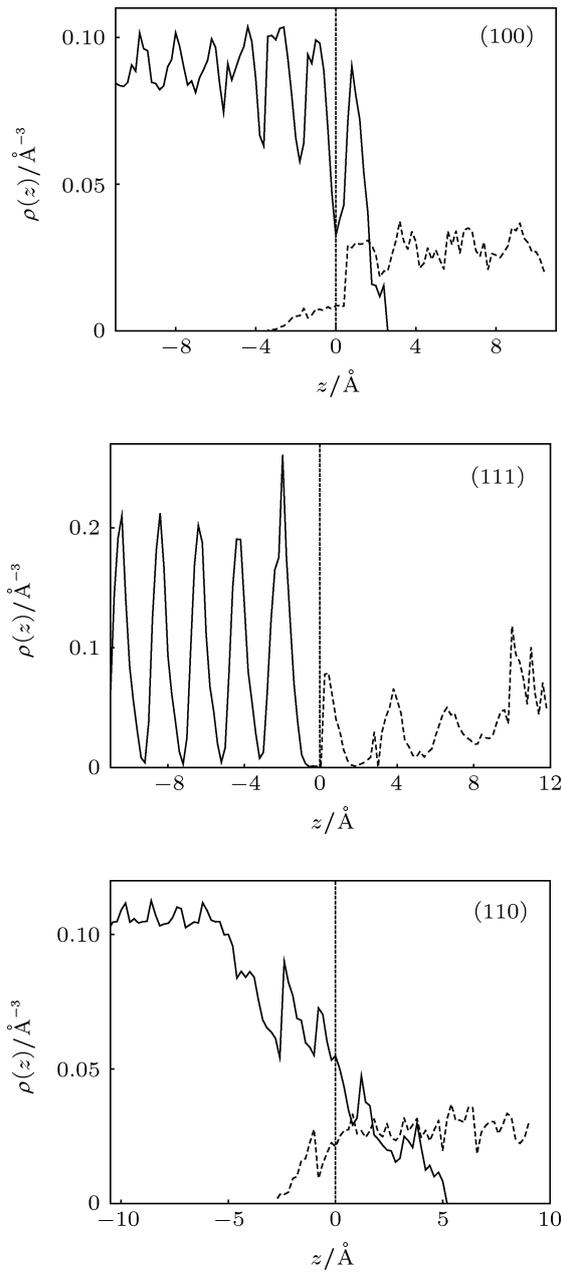


图6 Pb液滴在Ni(100), Ni(110)和Ni(111)晶面上达到接触角平衡时沿高度方向的原子密度分布 z 为距固液界面的距离, 实线代表Ni原子密度, 虚线代表Pb原子密度, 垂直于 x 轴的虚线代表界面

图7给出了Pb液滴在三个基底上产生铺展膜的铺展半径 R 和时间 t 的关系. 从图中可以看出, Pb液滴在Ni(111)晶面上的铺展速度明显快于其他两个晶面. Pb液滴在(111)晶面上的铺展动力学近似满足 $R^2 = D_1 t$ 的关系, 其中 $D_1 = (110.589 \pm 0.633) \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$, 该正比关系与文献 [6, 10, 11] 中的研究结果一致, 即在未发生表面合金化时, 若液滴可持续向铺展膜提供液相原子, 铺展动力学关系近似满足关系式 $R^2 \propto t$;

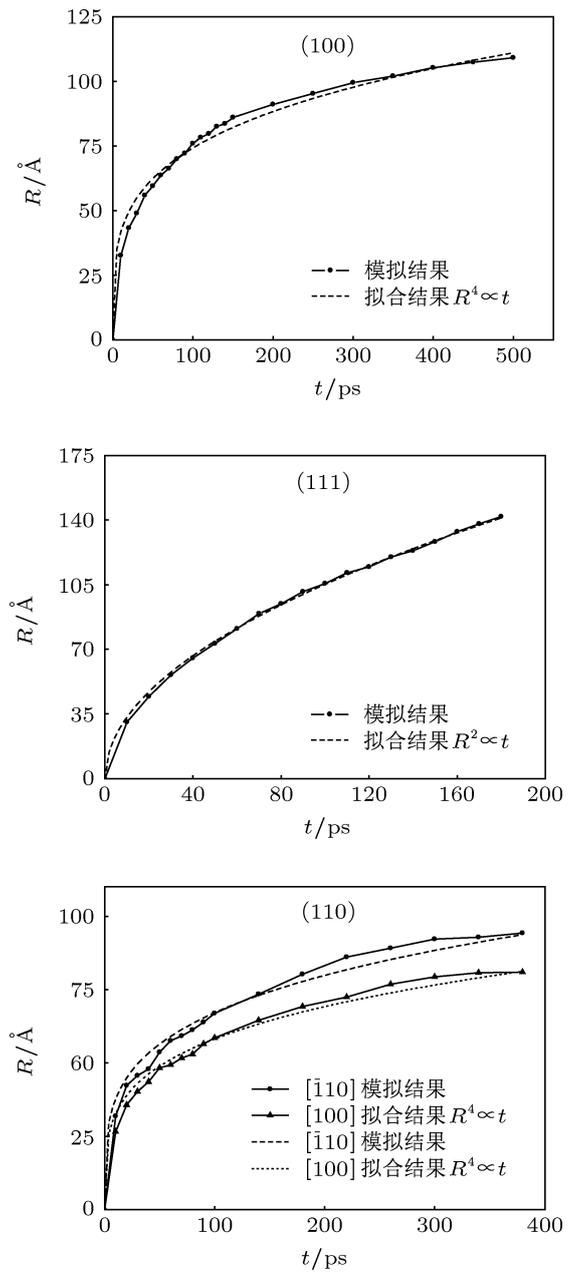


图7 Pb液滴在Ni(100), Ni(111), Ni(110)晶面(从上到下)上铺展层铺展半径 R 和时间 t 的关系 图中实线表示模拟结果, 虚线和点画线代表拟合结果

在(100)晶面和(110)晶面上, 铺展动力学关系近似满足 $R^4 \propto t$. 这是因为在这两种晶面上, 液相和基底之间形成了表面合金, 液滴所润湿的不再是Ni基底, 而是在新形成的化合物上润湿, 并且Pb原子的运动主要靠它和基底的扩散进行, 故其动力学过程受反应物扩散速度的控制, 这与文献 [15, 16] 中所得结论一致. 在Ni(100)晶面上其比例系数为 $(3.046 \pm 0.109) \times 10^{-19} \text{ cm}^4/\text{s}$, 沿Ni(110)晶面 $[\bar{1}10]$ 晶向上其比例系数为

$(2.033 \pm 0.089) \times 10^{-19} \text{ cm}^4/\text{s}$, 沿 Ni(110) 晶面 [100] 晶向其比例系数为 $(1.146 \pm 0.045) \times 10^{-19} \text{ cm}^4/\text{s}$. 由于 Pb 原子在 (110) 晶面上润湿时其扩散深度更大 (如图 6 所示), 减缓了原子横向铺展的速度, 因此其铺展动力学比例系数较 (100) 晶面低; 同时, 受 Pb 原子在 Ni(110) 晶面上沿不同晶向扩散机制差异的控制, 其在不同晶向上的铺展动力学比例系数也存在差异, 这构成液滴铺展形态各向异性的一个原因.

4 结论

采用分子动力学方法模拟了 Pb 液滴在 Ni(100), (110) 和 (111) 基底上的铺展润湿过程, 得到以下结论:

1) Pb 液滴在 Ni(100) 及 (111) 基底上的润湿铺展现象呈现为各向同性, 而在 Ni(110) 基底上的润湿铺展现象呈现出明显的各向异性;

2) 由于 Ni(110) 晶面点阵结构明显的各向异性, Pb 原子沿不同晶向的扩散机制及速度存在显著差异, 导致液滴在该晶面呈现为各向异性的润湿铺展;

3) Pb 液滴在 Ni(111) 晶面上铺展时, 未发生表面合金化, 液滴铺展动力学描述近似满足 $R^2 = D_1 t$ 的关系, 其中 $D_1 = (110.589 \pm 0.633) \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$;

4) Pb 液滴在 (100) 晶面和 (110) 晶面上铺展时表面存在合金化现象, 铺展动力学关系近似满足 $R^4 \propto t$, 且液滴在 (100) 晶面上的铺展速度高于 (110) 晶面上的铺展速度.

-
- [1] Evans R 1979 *Adv. Phys.* **28** 143
 [2] Fu X C, Shen W X, Yao T Y, Hou W H 2005 *Physical Chemistry* (5th Ed. Vol. 2) (Beijing: Higher Education Press) p311 (in Chinese) [傅献彩, 沈文霞, 姚天扬, 侯文华 2005 物理化学 (第五版下册)(北京: 高等教育出版社) 第 311 页]
 [3] Zang D Y, Zhang Y J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 026803 (in Chinese) [臧渡洋, 张永建 2012 物理学报 **61** 026803]
 [4] Zheng H Y, Wang M, Wang X X, Huang W D 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 066402 (in Chinese) [郑浩勇, 王猛, 王修星, 黄卫东 2011 物理学报 **60** 066402]
 [5] Heslot F, Fraysse N, Cazabat A M 1989 *Nature* **338** 640
 [6] Edmund W B, Gary G S, David R H 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 236102
 [7] Timoshenko V, Bochenkov V, Traskine V, Protsenko P 2012 *J. Mater. Eng. Perform.* **21** 575
 [8] Swiler T P 2000 *Acta Mater.* **48** 4775
 [9] Kubo A, Makino T, Sugiyama D, Tanaka S I 2005 *J. Mater. Eng. Perform.* **40** 2395
 [10] Cazabat A M, Fraysse N, Heslot F 1991 *Colloid Surface* **52** 1
 [11] Moon J, Wynblatt P, Garoff S, Suter R 2004 *Langmuir* **20** 402
 [12] Moon J, Wynblatt P, Garoff S, Suter R 2004 *Surf. Sci.* **559** 149
 [13] Landry K, Eustathopoulos N 1996 *Acta Mater.* **44** 3923
 [14] Yost F G, Sackinger P A, O'Toole E J 1998 *Acta Mater.* **46** 2329
 [15] Mortensen A, Drevet B, Eustathopoulos N 1997 *Scripta Mater.* **36** 645
 [16] Voitovitch R, Mortensen A, Hodaj F, Eustathopoulos N 1999 *Acta Mater.* **47** 1117
 [17] Sutton A P, Chen J 1990 *Phil. Mag. Lett.* **60** 139
 [18] Tabar H R, Sutton A P 1991 *Phil. Mag. Lett.* **63** 217
 [19] Kimura Y, Qi Y, Çağın T, Goddard III W 1998 *Caletch. Asci. Technical. Report* 003
 [20] Çağın T, Dereli G, Uludoğan M, Tomak M 1999 *Phys. Rev. B* **59** 3468
 [21] Smith W, Yong C W, Rodger P M 2002 *Mol. Simulat.* **28** 385
 [22] Popescu M N, Oshanin G, Dietrich S, Cazabat A M 2012 *J. Phys. Condens. Matter.* **24** 3
 [23] Prévot G, Cohen C, Moulin J, Schmaus D 1999 *Surf. Sci.* **421** 364
 [24] Kellogg G L 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 216
 [25] Kellogg G L 1995 *Appl. Surf. Sci.* **87** 353
 [26] Xie G F, Wang D W, Ying C T 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2254 (in Chinese) [谢国锋, 王德武, 应纯同 2003 物理学报 **52** 2254]
 [27] Basset D W, Webber P R 1978 *Surf. Sci.* **70** 520

Molecular dynamics simulation of the wetting behavior of Pb droplet on Ni substrate*

Qiu Feng Wang Meng[†] Zhou Hua-Guang Zheng Xuan Lin Xin
Huang Wei-Dong

(State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(Received 26 December 2012; revised manuscript received 28 February 2013)

Abstract

Molecular dynamics simulation is performed to investigate the wetting behaviors of Pb droplet on Ni(100), Ni(110) and Ni(111) substrates. It has been shown that the wetting behavior of precursor film is isotropic for Pb droplet on Ni(100) and Ni(111) substrates, but anisotropic for Pb droplet on Ni(110) substrate. The demonstrated anisotropy is attributed to the differences in diffusion mechanism and rate along different crystal orientations for Pb atoms with corresponding anisotropic structure of the crystal lattice on Ni(110) substrate. The spreading dynamics of precursor film on different lattice surfaces are also investigated, which shows that there is no surface alloy formed for Pb droplet on Ni(111) surface and the spreading dynamics can be described by $R^2 \propto t$, but surface alloy forms for Pb droplet on Ni(100) and Ni(110) surface and the spreading dynamics satisfies $R^4 \propto t$, at the same time the spreading rate of droplet on Ni(100) is higher than that of Ni(110) substrate.

Keywords: molecular dynamics simulation, anisotropic wetting behavior, precursor film, diffusion mechanism

PACS: 02.70.Ns, 68.08.Bc, 68.49.-h, 82.40.Ck

DOI: 10.7498/aps.62.120203

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB610402) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51271213, 50901061).

[†] Corresponding author. E-mail: wangmeng@nwpu.edu.cn