

有结构壁面上液滴运动特征的耗散粒子动力学模拟*

姚祎 周哲玮 胡国辉†

(上海大学上海市应用数学和力学研究所, 上海市力学在能源工程中的应用重点实验室, 上海 200072)

(2012年12月17日收到; 2013年1月14日收到修改稿)

本文采用耗散粒子动力学方法, 研究了恒定外力驱动下液滴在有结构壁面上的运动过程. 通过研究液滴在通过壁面结构时前缘接触点和前进角的变化, 分析了液滴的运动特征. 研究表明, 在不同润湿性或不同外力驱动下, 存在使液滴运动最快的“最优”壁面结构, 并对其机理进行了讨论. 本文还探讨了壁面润湿性、热涨落以及外力对液滴运动状态的影响.

关键词: 微流体, 有结构壁面, 润湿性, 耗散粒子动力学 (DPD)

PACS: 47.10.-g, 47.11.-j, 47.61.Jd

DOI: 10.7498/aps.62.134701

1 引言

微尺度下的液滴动力学对喷墨打印、高分子及蛋白质运输、微米/纳米粒子的合成以及药物运输等不同的工程领域有着非常重要的意义^[1,2]. 在微流体系统中, 由于尺度的缩小, 使得比表面积增大, 表面或者边界会对流体流动产生较大的影响, 从而使得流体的流动特性发生较大的变化. Chaudhury 和 Whitesides^[3] 进行了用润湿性梯度驱动液滴的实验, 发现水滴可以自发运动, 甚至克服重力爬坡. Das 等^[4] 采用光滑粒子动力学 (smoothed particle hydrodynamics, SPH) 方法模拟了倾斜平板上液滴的运动, 获得了液滴内部的二维流场结果. 石自媛等^[5] 采用格子玻尔兹曼 (lattice Boltzmann method, LBM) 方法模拟了二维液滴在润湿性梯度下的运动, 并获得了液滴内部的流场结构. 李振^[6] 采用耗散粒子动力学 (dissipative particle dynamics, DPD) 方法模拟了三维液滴在润湿性梯度下的运动, 得到了液滴内部流场, 并分析了液滴的运动形式.

如果疏水壁面并不光滑, 而是存在微尺度结构, 液滴的静态接触角可由 Cassie-Baxter(C-B) 公式^[7] 描述, 即 $\cos \theta_{CB} = f \cos \theta + f - 1$, 其中 f 为粗糙壁面上固体的面积分数, θ 为光滑壁面的静态接触角.

以往的研究表明, 有微结构的疏水表面流体流过时会具有减阻效果^[8-10]. Ou 等^[8] 发现, 其流动减阻效果可达 40%, 且减阻效果随凹槽间距和槽道深度的减少而增大. Johnson 和 Dettre^[11] 模拟了固体表面粗糙度对前进角和后退角的影响. Zu 等^[12] 研究了不同参数微结构表面的润湿性. Huang 等^[13,14] 用 LBM 方法研究了流体在带凹槽的粗糙表面微通道中的流动, 并分析了结构和润湿性对液滴运动的影响. 杨常卫等^[15] 通过实验研究了 Cassie 状态液滴的运动角与微结构表面参数之间的关系. Yao 等^[16] 用 LBM 方法研究了液滴在微结构和微/纳结构疏水表面的静力学和动力学特性, 他们发现液滴在疏水表面上表观接触角随着微结构中固体面积分数的减小而增大, 而且微纳双重结构的结果不仅会增加表面的疏水性而且很大程度增大了液滴 Cassie 状态的稳定性. 张明焜等^[17] 运用改进的 DPD 方法模拟了液滴在凹槽所构成的粗糙表面微通道内的运动行为, 结果表明壁面浸润性和外力场对液滴流动特性影响较大, 而液滴温度影响较小.

本文采用 DPD 方法, 对外力作用下有结构壁面上液滴运动的特性展开研究, 得到了液滴运动过程中接触角和前缘接触点位置的变化曲线, 描述了液滴的“能量积蓄-跳跃”的运动过程, 并讨论了热

* 国家自然科学基金 (批准号: 11272197)、教育部博士点基金 (批准号: 20103108110004) 和上海市高校创新团队资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: ghhu@staff.shu.edu.cn

涨落、外力等因素对在有结构壁面上液滴的运动的影响,分析了不同参数对“最优壁面”结构的影响,这些结果对于了解液滴在粗糙表面的运动规律有一定的指导意义.

2 计算方法与模型

2.1 DPD 方法介绍

DPD 方法最早在 1992 年由 Hoogerbrugge 和 Koelman^[18] 提出. 该方法是一种粗粒化介观方法,既保留了分子动力学 (molecular dynamics, MD)^[19] 的无网格优势,也利用了格子气自动机 (lattice gas automata, LGA)^[20] 可以使用较大时间步长的长处. 这使得 DPD 方法比 MD 方法在模拟微观流体运动时有更大的优势,节省了很多计算资源的消耗. DPD 算法采用拉格朗日坐标描述粒子,粒子运动满足牛顿运动方程,方程中粒子受力包括颗粒间的有势作用力,也考虑了类似于布朗动力学中的随机力和耗散力. 系统满足质量守恒和动量守恒.

作为研究介观尺度流体行为的一种重要的方法,DPD 不仅可以模拟简单的粒子,也可以模拟具有特殊结构的大分子、纳米材料以及细胞. Groot 等^[21] 用 DPD 模拟了三维双团联式共聚合体在微尺度下的相分离过程. Español^[22] 建立了高分子链的 DPD 模型,使得链状高分子在溶液中的动力学过程可以用 DPD 来模拟^[21,23]. 陈硕等^[24] 用 DPD 模拟了高分子液滴的碰撞. Liba 等^[25] 用 DPD 研究了功能碳纳米管复合材料的一些性质. Li 等^[26] 用 DPD 模拟了交流电润湿过程,得到了液滴内部的流场,并讨论了交流电频率对流场的影响. 对于 DPD 的研究进展,李红霞等^[27]、陈硕等^[28]、李振等^[29] 的工作中详细的介绍.

对流体而言,随着尺度的减小,热涨落将变得非常重要而且能显著影响液体的行为^[30,31]. Moseler 等^[32] 研究了热涨落对纳米射流现象的影响,发现随着射流尺度的减小,热涨落对射流的动态演化过程的影响将变得非常关键. Davidovich 等^[30] 研究了热涨落对液滴铺展过程的影响,发现热涨落的存在将有助于液滴在固体表面的铺展. 在 DPD 基本方程中,随机力考虑了由于分子热运动而引起的热涨落效应,并与耗散力的方程匹配满足涨落-耗散定理. 因此,在 DPD 模拟的过程中,自然包

含了热涨落的影响,可以很方便的来研究热涨落对流体的影响.

2.2 耗散粒子动力学算法

一个 DPD 颗粒以它所在的空间位置 r_i 、速度 v_i 和颗粒质量 m_i 来标识. 若将 DPD 颗粒的质量 m_i 选取为无量纲质量,即 $m_i \equiv m \equiv 1$, 粒子运动满足牛顿运动方程

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i, \quad \frac{dv_i}{dt} = F_i + F^e, \quad (1)$$

其中 t 为时间, F_i 为粒子 i 受到其他粒子作用的合力, F^e 为粒子 i 受到来自外部力场的作用. 若将 F_i 分为有势力、耗散力和随机力三种不同类型的的作用,则

$$F_i = \sum_{i \neq j} (F_{ij}^C + F_{ij}^D + F_{ij}^R), \quad (2)$$

其中 F_{ij}^C 为保守力,来源于粒子 j 对粒子 i 的作用势, F_{ij}^D 为耗散力, F_{ij}^R 为随机力. 所有力均成对出现,从而保证了系统的动量守恒,且在截断半径 r_c 之外这些力均为 0.

传统 DPD 方法中,保守力通常由方程 $F_{ij}^C = a_{ij}w^C(r_{ij})e_{ij}$ ^[33] 给出,其中 a_{ij} 为排斥力参数,它的值等于粒子 i 与粒子 j 之间最大的排斥力, r_{ij} 为粒子 i 与粒子 j 之间的距离, e_{ij} 为 r_{ij} 的单位矢量,即 $e_{ij} = r_{ij}/|r_{ij}|$, $r_{ij} = r_i - r_j$. w^C 是一个“软的”权函数,通常选取为 $w^C = 1 - r_{ij}/r_c$ 的形式. 值得注意的是,这种形式的保守力使粒子之间仅仅存在排斥力,对应系统的状态方程 (equation of state, EOS) 为 $p = \rho k_B T + \alpha \rho^2$. 其中第一项为理想气体状态方程的项,第二项为附加压力项. 由于没有密度的高次项,使得这种方法不能模拟气液共存的问题^[33,34].

目前有多种算法可以克服上述的困难,实现在 DPD 中气液共存问题的模拟. 首先, Liu 等^[35-37] 将 SPH 中不同强度和截距的光滑函数叠加,构造了含远程吸引力与近距离排斥力的作用势,并且可以通过控制吸引力与排斥力的强度系数和作用范围来调整作用势. 该方法可以模拟气液共存的问题,而且已经成功应用于微管道、复杂裂隙网络及多孔介质中的多相流动模拟^[17,38,39]. 其次,通过修改保守力函数的形式^[34,40-42],也可以使状态方程中出现密度高次项,即所谓多体耗散粒子动力学 (many-body DPD, MDPD) 方法,这也是本文采用的

方法. 在 Warren^[34] 和 Cupelli 等^[40] 的工作中, 他们采用了一种依赖于粒子密度的保守力函数形式

$$\mathbf{F}_{ij}^C = A_{ij}\omega_C(r_{ij})\mathbf{e}_{ij} + B_{ij}(\bar{\rho}_i + \bar{\rho}_j)\omega_d(r_{ij})\mathbf{e}_{ij}, \quad (3)$$

其中第一项代表粒子之间的吸引力, 第二项代表依赖于粒子密度的排斥力. $\omega_C(r_{ij})$ 和 $\omega_d(r_{ij})$ 分别为吸引力的权函数、排斥力的权函数, 对应的截断半径分别为 r_c 和 r_d . 吸引力系数 $A_{ij} < 0$ 而排斥力系数 $B_{ij} > 0$, 它们的取值与粒子的类别有关. A_{ll} 和 B_{ll} 表示液体粒子与液体粒子之间的作用力系数, A_{sl} 和 B_{sl} 表示固体粒子与液体粒子之间的作用力系数. 粒子 i 所处位置的密度 ρ_i 可以由瞬时加权平均 $\rho_i = \sum_{i \neq j} \omega_\rho(r_{ij})$ 求得^[34], 权函数 $\omega_\rho = 15/(2\pi r_d^3)(1 - r_{ij}/r_d)^2$.

随机力和耗散力分别为^[33]

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij}^D &= -\gamma\omega^D(r_{ij})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{e}_{ij}, \\ \mathbf{F}_{ij}^R &= \sigma\omega^R(r_{ij})\theta_{ij}\mathbf{e}_{ij}, \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$, \mathbf{e}_{ij} 为 r_{ij} 的单位矢量, γ 为耗散力幅值, σ 为随机力幅值, ω^D 和 ω^R 为与相对位置有关的权重函数, θ_{ij} 为高斯白噪声项, 满足 $\theta_{ij} = \theta_{ji}$, 且满足统计学特性

$$\begin{aligned} \langle \theta_{ij}(t) \rangle &= 0, \\ \langle \theta_{ij}(t)\theta_{kl}(t') \rangle &= (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})\delta(t - t'). \end{aligned} \quad (5)$$

Espanol 和 Warren^[43] 提出耗散力和随机力中的权函数必须满足耗散涨落定理, 从而奠定了 DPD 模拟方法的基础. 根据耗散涨落定理, 耗散力和随机力必须满足^[43]

$$\omega^D(r) = [\omega^R(r)]^2, \quad \sigma^2 = 2\gamma k_B T. \quad (6)$$

一般权函数选取为与有势力类似的表达式:

$$\omega^D(r) = (\omega^R(r))^2 = \begin{cases} (1 - r/r_c)^2, & (r \leq r_c), \\ 0 & (r > r_c). \end{cases} \quad (7)$$

对于液态水, Groot 和 Warren^[33] 推荐 $a_{ij} = 75k_B T/\rho$ (ρ 为 DPD 粒子数密度), $\sigma = 3$. 通常取 r_c 为无量纲长度, 即 $r_c \equiv 1$, 分别以 m_i , r_c 以及 $k_B T$ 为质量、长度和能量的无量纲特征量. 由上述无量纲参数, 可以推导特征速度为 $\sqrt{k_B T/m_i}$, 时间为 $r_c/\sqrt{k_B T/m_i}$, 力为 $k_B T/r_c$. 在本文的模拟中, 保守力采用 (3) 式的形式, 耗散力和随机力采用 (4) 式的形式, 主要计算参数见表 1^[34,40,44].

有结构壁面的模型如图 1 所示. 我们采用宽度 L , 间距 S 和高度 H 三个指标表征结构的几何尺寸, 其中 H 均设置为 1, 即结构均由三层 DPD 粒子构成. 记 f_s 为结构粗糙度, 表示液滴与固壁接触面积与总的投影面积的比值, 在本文中, $f_s = L/(L + S)$.

表 1 模拟中用到的主要计算参数

参数	符号	取值
粒子密度	ρ	6.00
吸引力截断半径	r_c	1.00
排斥力截断半径	r_d	0.75
时间步长	Δt	0.01
系统温度	$k_B T$	1.00
白噪声幅值	δ	6.00
吸引力参数	A_{ll}	-40.00
排斥力参数	$B_{ll} = B_{sl}$	25.00

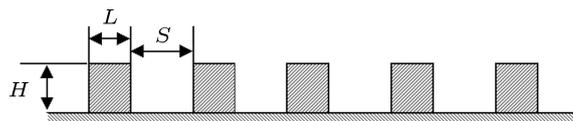


图 1 有结构壁面的模型

3 数值模拟结果与讨论

3.1 静态接触角

静态接触角的计算模型如图 2 所示. 在一个大小为 $100 \times 3 \times 60$ 的计算域内, 将一个半径 $R = 12$ 、包含 7060 个液体粒子的液滴放置在一个水平的平坦壁面上. 壁面由三层固结的 DPD 粒子构成, 包含 1818 个固体粒子. 当流体粒子进入固壁, 用反弹 (bounce back) 边界条件^[45] 将其返回计算域以获得无滑移边界条件. 在 x 和 y 方向采用周期性边界条件. 积分算法采用改进的 Velocity-Verlet 算法^[33,46]. 除非特别指出, 本文中的模拟算例在固壁上均采用无滑移边界条件, 在 x 和 y 方向采用周期性边界条件.

模拟中初始时刻液滴是标准圆形, 由于壁面粒子和液滴粒子的相互作用, 液滴将壁面上铺展, 通过改变 (3) 式中的固液作用系数 (A_{sl}) 可以调整固壁的润湿性. 待其弛豫一段时间达到稳定状态后, 求得其表观接触角. 本文计算了 $k_B T = 1$ 时, 液滴的

静态接触角 θ 随 A_{sl} 的变化关系. 模拟过程为 700 个单位时间, 即迭代计算 70000 个时间步.

我们采用“圆拟合”方法求液滴静态表现接触角 [47,48]. 首先根据粒子所处位置的密度来确定界面, 并根据界面上所有的粒子拟合球面 (对于二维问题为圆), 然后根据接触角的定义求得接触角. 图 3 显示了液滴在固壁上的静态接触角与固液作用参数 A_{sl} 的对应关系, 点表示模拟得到的数据, 实线为由二次多项式拟合的曲线.

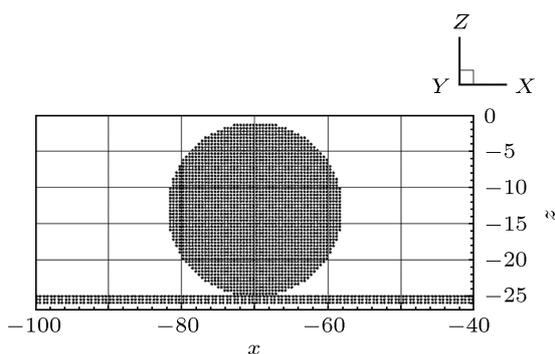


图 2 计算平坦固体表面上液滴平衡态接触角模型示意图

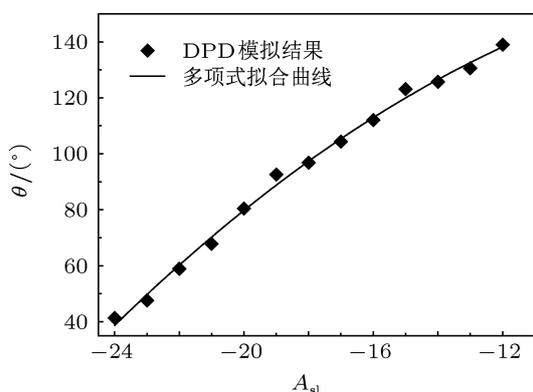


图 3 静态接触角随固体-液体粒子吸引力系数 A_{sl} 的变化 (计算参数见表 1)

对于有结构壁面, 通常液滴与壁面的接触方式可以由 Wenzel^[49] 模型和 Cassie-Baxter^[7] 模型来描述. 在与图 3 相同的计算参数下, 将壁面改为有结构壁面, 在保持固壁粗糙度不变的情况下 (以 $f_s = 0.444$ 为例), 通过调整固液作用参数 A_{sl} , 取不同的亲疏水性 (即改变平坦壁面上的静态接触角), 使液滴保持 Cassie-Baxter 状态, 采用 DPD 方法模拟得到了液滴在该结构上的静态接触角, 并与理论值进行对照. 计算结果 (如图 4 所示) 表明在疏水的情况, DPD 模拟结果与理论值符合得较好, 但 A_{sl} 较小时 (即平坦壁面上的接触角较小时), Cassie-Baxter 公式的预测与模拟结果有一定的偏差.

3.2 液滴在粗糙壁面的运动

模拟本问题时, 计算域的几何尺寸选取为 $200 \times 3 \times 50$, 液滴半径仍为 $R = 12$. 壁面润湿性分别设置为亲水 (接触角为 67.84° , 图 5(a)) 和疏水 (接触角为 130.59° , 图 5(b)). 初始时弛豫 $t = 300$ 个单位时间以使液滴达到平衡, 然后施加水平方向大小为 $F_x = 0.0008$ 的驱动力. 讨论液滴在 $t = 300 - 5300$ 时间段内质心 x 方向坐标 X_{com} 随时间的变化. 对于粗糙壁面所取参数分别为 $f_s = 0.308$ (图 5(a)) 和 $f_s = 0.444$ (图 5(b)).

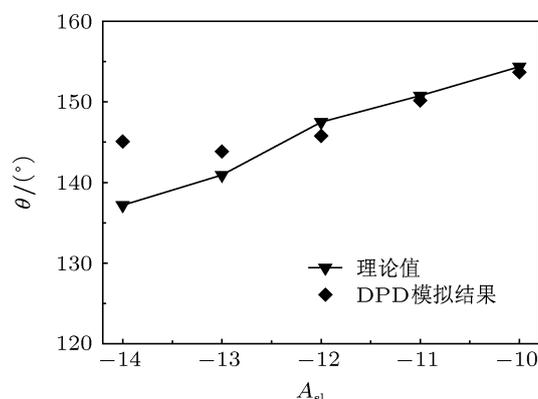


图 4 液滴在结构壁面上的静态接触角与理论值的比较

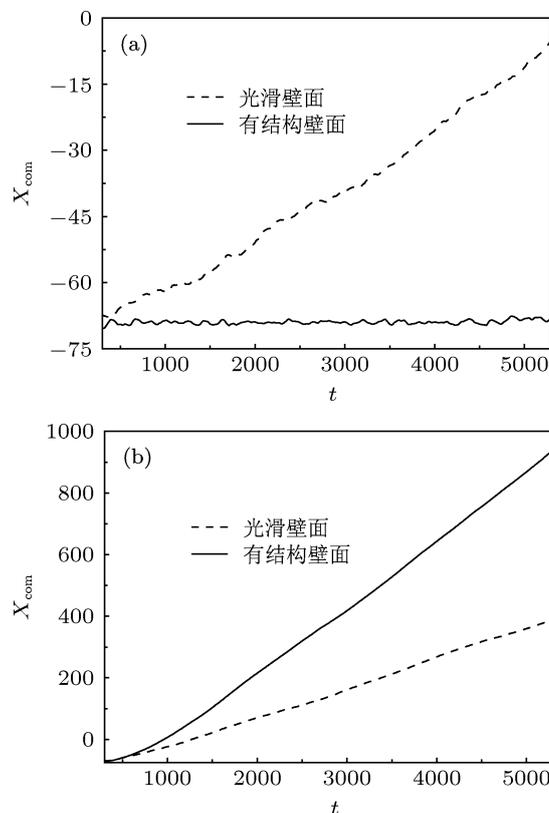


图 5 光滑壁面和粗糙壁面上液滴运动方向位移与时间的关系 (a) 亲水情况 (接触角 67.84°); (b) 疏水情况 (接触角 130.59°)

从图 5 中可以看出, 壁面粗糙度对液滴运动特性影响较大. 在疏水情况下, 液滴在粗糙壁面比在光滑壁面上运动得快, 这是因为液滴在两个结构之间形成液桥, 从而大大地降低了阻力. 在亲水情况下, 液滴在粗糙壁面比在光滑壁面上运动的慢, 几乎处于静止状态. 此时, 由于壁面的亲水性, 液滴陷入两个结构中, 无法搭成液桥, 粗糙壁面使得液滴受到的阻力更大. 以上结论表明, 结构使得亲水壁面更亲水, 疏水壁面更疏水.

为了深入研究液滴经过壁面结构的运动过程, 截取液滴在通过若干结构时前缘接触角 θ_{adv} (前进角) 和前缘接触点位置 X_{adv} 随时间的变化规律, 如图 6 所示, 其中水平方向的实线和虚线分别表示结构凸起的前缘和后缘.

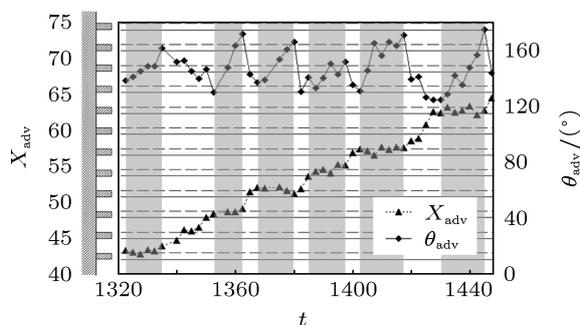


图 6 前进角、前缘点随时间的变化曲线 ($A_{sl} = -13$, $F_x = 0.0007$, $f_s = 0.308$)

由图 6 可以看出, 液滴前缘随时间的变化并不是均匀的. 当液滴经过结构凸起的时候, 前缘会在结构的末端黏附一段时间 (图中灰色的时间段), 即前缘接触点位置基本不变, 同时前进接触角不断增加, 此时为能量积蓄的过程. 当系统累积足够的能量后, 液滴前缘将跳跃至下一个结构凸起单元, 并伴随着前缘接触角的迅速减小. 此后将进入下一个能量累积过程. 需要指出的是, 该过程并没有呈现出与结构凸起相对应的周期性, 当单次积蓄的能量较多时, 液滴可能快速通过两个或更多结构.

3.3 最优壁面结构

对于液滴在有结构表面的运动问题, 一个问题就是液滴运动速度和结构粗糙度 f_s 之间的关系. 更进一步地, 是否存在某个最优值时的液滴运动速度达到最大. 本文在进行数值模拟时, 通过调整固液作用系数 A_{sl} 来研究壁面润湿性的影响. 我们分别

取 $A_{sl} = -13, -14, -15$, 在这三种润湿性条件下分别考虑液滴在不同结构上运动的情况. 首先运行 30000 时间步让液滴弛豫系统达到平衡, 随后施加大小为 $F_x = 0.0007$ 水平向右的驱动力使液滴运动, 持续 5000 个单位时间, 得到液滴质心的平均速度 V_{com} 如图 7 所示.

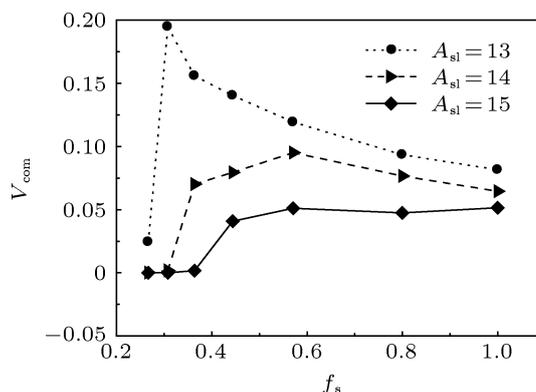


图 7 不同壁面浸润性时, 液滴的平均速度与 f_s 的关系 ($F_x = 0.0007$)

由图 7 可以看出, 对于同样的结构壁面, 疏水性越强则液滴运动越快. 分析壁面结构的影响, 我们发现在一定范围内减小 f_s (即增大两个结构的间隔), 会让液滴运动的更快, 表明此时的壁面更疏水. 当 f_s 减小到某一特定值后, 随着 f_s 的继续减小, 液滴将“陷入”结构凹槽, 速度急剧减小. 这表明, 在一定条件下 Cassie-Baxter 状态与 Wenzel 状态发生了转化, 与 Patankar^[50] 的研究结论相符. $A_{sl} = -13, -14, -15$ 时的液滴运动最快的最优壁面分别是 $f_s = 0.267, 0.571, 0.571$. 对于不同的壁面润湿性, 使液滴运动最快的 f_s 随着疏水性的增大而减小, 这说明较强的疏水性更利于维持 Cassie-Baxter 状态.

对于亚微米尺度的液滴, 热涨落对其运动有很大的影响. 为了研究这一点, 在壁面浸润性和水平驱动力不变 ($A_{sl} = -13$, $F_x = 0.0007$) 的条件下, 我们改变系统的温度, 计算结果如图 8(a) 所示. 结果表明, 液滴运动速度随系统温度的升高而增大, 这与李振^[6]、张明焜等^[17] 的结论是相符的, 其中的物理机理值得进一步的探讨, 我们猜测可能与热涨落有助于液滴铺展有关^[30]. 由图 8 可以看出, 不同温度条件下, 使液滴运动最快的结构粗糙度基本一致. 因此, 系统温度对运动液滴由 Cassie-Baxter 状态向 Wenzel 状态转化的影响较小.

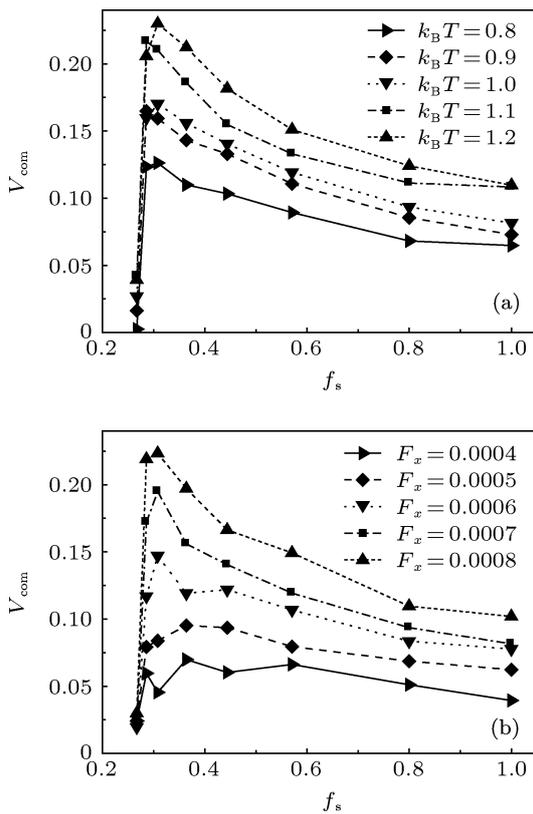


图 8 不同温度和驱动力时,液滴的平均速度与 f_s 的关系 ($A_{sl} = -13$)

为了分析外场力对最优壁面结构的影响,我们在壁面浸润性不变 ($A_{sl} = -13, k_B T = 1$) 的条件下,分别对液滴施加不同的驱动力,得到的液滴质心运

动速度如图 8(b) 所示. 显然,液滴运动速度随着驱动力的增大而增大. 与热涨落的影响类似,我们发现不同驱动力条件下,使液滴运动速度达到最大值的壁面粗糙度基本保持不变,即水平驱动力的大小对液滴由 Cassie-Baxter 状态向 Wenzel 状态转化的影响也不大.

4 结论

本文采用耗散粒子动力学方法,对二维微液滴在具有微结构粗糙表面上的运动过程进行了数值模拟. 计算结果表明,固体-液体粒子吸引力系数可以用来表征壁面的润湿性,在本文所选参数范围内,液滴静态接触角与该作用系数呈二次函数关系. 我们发现,运动中的液滴经过结构凸起表现为“能量积蓄-跳跃”的过程. 在能量积蓄阶段,液滴前缘接触点保持位置基本不变,前进角逐渐增大;随后液滴发生跳跃,前进角迅速减小. 在不同润湿性条件下,存在使液滴运动最快的“最佳”壁面结构,较强的疏水性更利于 Cassie-Baxter 状态的维持. 热涨落有助于液滴的运动. 外部驱动力和系统温度在一定范围内增加均使得液滴运动速度更大,但对“最优”壁面结构影响不大. 这些结果对了解液滴在粗糙表面的运动规律有一定的指导意义.

[1] Fan X, Phan-Thien N, Chen S, Wu X, Ng T Y 2006 *Phys. Fluids*. **18** 063102
 [2] de Gans B J, Schubert U S 2003 *Macromol. Rapid. Commun.* **24** 659
 [3] Chaudhury M K, Whitesides G M 1992 *Science* **256** 5063
 [4] Das A, Das P 2010 *Langmuir* **26** 9547
 [5] Shi Z Y, Hu G H, Zhou Z W 2010 *Acta. Phys. Sin.* **59** 2595 (in Chinese) [石自媛, 胡国辉, 周哲玮 2010 物理学报 **59** 2595]
 [6] Li Z 2011 *Ph.D. Dissertation* (Shanghai: Shanghai University) (in Chinese) [李振 2011 博士学位论文 (上海: 上海大学)]
 [7] Cassie A, Baxter S 1944 *Tran. Fara. Soci.* **40** 546
 [8] Ou J, Perot B, Rothstein J P 2004 *Phys. Fluids* **16** 4635
 [9] Davies J, Maynes D, Webb B, Woolford B 2006 *Phys. Fluids*. **18** 087110
 [10] Ou J, Rothstein J P 2005 *Phys. Fluids*. **17** 103606
 [11] Johnson Jr R, Dettre R 1964 *Adv. Chem. Ser.* **43** 112
 [12] Zu Y, Yan Y, Li J, Han Z 2010 *J. Bionic. Eng.* **7** 191
 [13] Huang J J, Shu C, Chew Y, Zheng H 2007 *Int. J. Modern Phys. C* **18** 492
 [14] Huang J J, Shu C, Chew Y T 2009 *Phys. Fluids* **21** 022103
 [15] Yang C W, He F, Hao P F 2010 *Science In China* **10** 1545 (in Chinese) [杨常卫, 何枫, 郝鹏飞 2010 中国科学 **10** 1545]
 [16] Yao Z H, Hao P F, Zhang X W, He F 2012 *Chinese. Sci. Bull.* **57** 1095
 [17] Zhang M K, Chen S, Shang Z 2012 *Acta. Phys. Sin.* **61** 34701 (in Chinese) [张明焜, 陈硕, 尚智 2012 物理学报 **61** 34701]
 [18] Hoogerbrugge P J, Koelman J 1992 *Europhys. Lett.* **19** 155
 [19] Rapaport D C 2004 *The art of molecular dynamics simulation* (England: Cambridge university press) p12
 [20] Hardy J, De Pazzis O, Pomeau Y 1976 *Phys. Rev. A* **13** 1949
 [21] Groot R D, Madden T J 1998 *J. Chem. Phys.* **108** 8713
 [22] Español P 1996 *Phys. Rev. E* **53** 1572
 [23] Jiang W, Huang J, Wang Y, Laradji M J. *Chem. Phys.* **126** 044901
 [24] Chen S, Shang Z, Zhao Y 2010 *J. Tongji. University* **38** 767 (in Chinese) [陈硕, 尚智, 赵岩, 王丹 2010 同济大学学报 **38** 767]
 [25] Liba O, Kauzlaric D, Abrams Z R, Hanein Y, Greiner A, Korvink J G 2008 *Mol. Simulat.* **34** 737
 [26] Li Z, Zhou Z W, Hu G H 2012 *J. Adhes. Sci. Technol.* **26** 1883
 [27] Li H X, Qiang H F 2009 *Adv. Mech.* **39** 165 (in Chinese) [李红霞, 强洪夫 2009 力学进展 **39** 165]
 [28] Chen S, Zhao Y, Fan X J 2006 *Bull. Sci. Tech.* **22** 596 (in Chinese) [陈硕, 赵钧, 范西俊 2006 科技通报 **22** 596]
 [29] Li Z, Hu G H, Zhou Z W 2009 *Mechanics and Engineering* (in Chinese) [李振, 胡国辉, 周哲玮 2009 力学与工程]
 [30] Davidovitch B, Moro E, Stone H A 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 244505
 [31] Rauscher M, Dietrich S 2008 *Annu. Rev. Mater. Res.* **38** 143

- [32] Moseler M, Landman U 2000 *Sci.* **289** 1165
 [33] Groot R D, Warren P B 1997 *J. Chem. Phys.* **107** 4423
 [34] Warren P B 2003 *Phys. Rev. E* **68** 066702
 [35] Liu M B, Meakin P, Huang H 2007 *J. Computational. Phys.* **222** 110
 [36] Liu M B, Meakin P, Huang H 2007 *Phys. Fluids* **19** 033302
 [37] Liu M B, Meakin P, Huang H 2006 *Phys. Fluids* **18** 017101
 [38] Chang J Z, Liu M B, Liu H T 2008 *Acta. Phys. Sin.* **57** 3954 (in Chinese) [常建忠, 刘谋斌, 刘汉涛 2008 物理学报 **57** 3954]
 [39] Wang X L, Chen S 2010 *Acta. Phys. Sin.* **10** 6778 (in Chinese) [王晓亮, 陈硕 2010 物理学报 **10** 6778]
 [40] Cupelli C, Henrich B, Glatzel T, Zengerle R, Moseler M, Santer M 2008 *New. J. Phys.* **10** 043009
 [41] Tiwari A, Abraham J 2008 *Microfluid. Nanofluid* **4** 227
 [42] Pagonabarraga I, Frenkel D 2001 *J. Chem. Phys.* **115** 5015
 [43] Espanol P, Warren P 1995 *Europhys. Lett.* **30** 191
 [44] Merabia S, Pagonabarraga I 2006 *Eur. Phys. J. E* **20** 209
 [45] Revenga M, Zuniga I, Espanol P 1998 *Int. J. Mod. Phys.* **9** 1319
 [46] Nikunen P, Karttunen M, Vattulainen I 2003 *Comput. Phys. Commun.* **153** 407
 [47] Marmor A 2006 *Soft. Matter.* **2** 12
 [48] Decker E, Frank B, Suo Y, Garoff S 1999 *Colloids. Sur. A* **156** 177
 [49] Wenzel R N 1994 *J. Phys. Chem.* **53** 1466
 [50] Patankar N A 2004 *Langmuir.* **20** 7097

Movement of a droplet on a structured substrate: A dissipative particle dynamics simulation study*

Yao Yi Zhou Zhe-Wei Hu Guo-Hui[†]

(Shanghai Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Shanghai University, Shanghai Key Laboratory of Mechanics in Energy Engineering, Shanghai 200072, China)

(Received 17 December 2012; revised manuscript received 14 January 2013)

Abstract

The last decade has witnessed the explosive development of microfluidic systems. Droplet manipulation is one of the crucial technologies in design and optimization of microfluidic devices. In the present study, dissipative particle dynamics is applied to investigate the movement of a liquid droplet actuated by a constant force on structured substrate with different wetting properties ranging from hydrophilic to hydrophobic. By monitoring the variation of the advancing contact angle and the front position of droplet, the characteristics of the droplet motion is analyzed in detail. Results indicate that there exists an optimal structure for which the droplet has a largest speed. Additionally, the influences of wettability gradient, thermal fluctuation and external force are discussed. We find thermal fluctuation is helpful for the movement of droplet.

Keywords: microfluids, structured substrate, wettability, dissipative particle dynamics

PACS: 47.10.-g, 47.11.-j, 47.61.Jd

DOI: 10.7498/aps.62.134701

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11272197), Doctoral Fund of Ministry of Education of China (Grant No. 20103108110004), and the Shanghai Program for Innovative Research Team in Universities.

[†] Corresponding author. E-mail: ghhu@staff.shu.edu.cn