

微粗糙结构表面液滴浸润特性的多体耗散粒子动力学研究

王宇翔 陈硕

Drops on microstructured surfaces: A numerical study using many-body dissipative particle dynamics

Wang Yu-Xiang Chen Shuo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 054701 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.054701

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.054701>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I5>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于蚯蚓背孔射流的仿生射流表面减阻性能研究

Characteristics on drag reduction of bionic jet surface based on earthworm's back orifice jet

物理学报.2015, 64(2): 024701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.024701>

一类新型激波捕捉格式的耗散性与稳定性分析

On the accuracy and robustness of a new flux splitting method

物理学报.2015, 64(2): 024702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.024702>

带自由面流体的多体耗散粒子动力学模拟

The study of fluid with free surface by many-body dissipative particle dynamics

物理学报.2014, 63(8): 084701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.084701>

有结构壁面上液滴运动特征的耗散粒子动力学模拟

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

物理学报.2013, 62(13): 134701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.134701>

均匀流中近壁面垂直流向振荡圆柱水动力特性研究

Hydrodynamic characters of a near-wall circular cylinder oscillating in cross flow direction in steady current

物理学报.2013, 62(6): 064701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.064701>

微粗糙结构表面液滴浸润特性的多体耗散粒子动力学研究^{*}

王宇翔 陈硕[†]

(同济大学航空航天与力学学院, 上海 200092)

(2014年7月22日收到; 2014年9月1日收到修改稿)

超疏水表面因其优异的自洁作用一直是表面科学领域关注的重点. 本文使用多体耗散粒子动力学 (many-body dissipative particle dynamics, MDPD) 方法模拟研究了不同粗糙结构下液滴的浸润特性, 并与 Cassie-Baxter 理论进行了对比. 研究使用了一种具有长吸短斥作用的流固作用函数来获得不同的液滴浸润性, 并利用一种简洁的数值方法来测量接触角. 模拟结果表明本研究方法能够稳定地捕捉到液滴在粗糙表面的静态和动态特性. 模拟了粗糙结构对三相接触线运动的黏滞作用, 与物理实验结果相符合, 表明 Cassie-Baxter 理论在实际应用中尚存在一定局限性. 研究分析了在动态铺展过程中的能量转化关系, 并指出在低值表面容易引起液滴反弹.

关键词: 液滴模型, 接触角, 表面粗糙度, 多体耗散粒子动力学

PACS: 47.10.-g, 47.11.-j, 47.55.db, 68.35.Ct

DOI: 10.7498/aps.64.054701

1 引言

由于在生活中的广泛应用, 表面润湿性一直以来都吸引着人们的注意, 尤其是超疏水性表面. 超疏水表面是指接触角大于 150° , 同时滚动角小于 10° 的表面^[1], 位于这种表面上的水滴在微小的倾斜下也易发生滚动, 因此具有非常优异的表面自洁性能. 但一般来说, 在化学性质均匀的光滑表面, 接触角不会大于 120° ^[2], 为了获得更大的接触角, 人们考虑了多种方案, 如光照、添加剂、电处理等, 但这些方案都需要额外给表面输入物质或者能量, 因此实际应用上存在一定的局限性^[3]. 另一方面, 人们不断地破解动植物界已经存在的超疏水现象机理, 如荷叶自洁现象^[4]、水黾在水中行走^[5]、蚊子的眼等^[6]所具有超疏水功能. 这些自然界的超疏水表面具有一个共同点, 即具有微纳米粗糙结构表面, 这也是形成超疏水作用的重要原因, 为人们设

计超疏水表面提供了有益的借鉴.

在很多物理实验中, 由于无法得到理想的实验环境, 如材料的表面化学性质不严格均匀、液滴温度变化或液滴混合溶液在实验过程中的易挥发性等容易导致不同的实验室做出来的实验结果难以有很好的对比性^[2]. 如 Boreyko 等^[7]在做不同比例的水/酒精混合液滴状态变化时, 不得不考虑酒精的易挥发性. 而数值模拟手段可以克服以上瓶颈, 在模拟环境中, 各种影响因素容易量化, 并能严格地根据要求变化, 可控性强^[8-12], 并且还可以做一些先验性的工作, 预测可能的物理实验结果, 因此成为研究液滴浸润特性的一种有效补充. 姚祎等^[8]使用耗散粒子动力学方法^[9]研究了外力驱动的液滴在粗糙表面的运动, 并给出了不同浸润性和外力配置下的最佳粗糙表面参数; Eklavya 等^[10]通过在粗糙表面铺设一层极薄的隔层来避免液滴侵入粗糙结构中以达到理想的 Cassie 状态, 他们的实验结果显示适当厚度的薄层能将滚动角减小 100° 左

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 51276130, 10872152) 和教育部高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20120072110037) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: schen_tju@tongji.edu.cn

右, 他们使用分子动力学方法进一步探索发现与 Wenzel 状态相比理想的 Cassie 状态能有效地减少接触线阻滞现象. 基于以上分析, 本文将采用数值方法对处于 Cassie 状态的液滴在微结构表面的静态和动态特性进行研究.

2 液滴状态理论

2.1 Wenzel 液滴状态模型

自然状态下, 固体表面一般不是理想的光滑平面, 而是带有一定粗糙结构的微结构表面. Wenzel^[13] 最先系统地研究了粗糙表面对液滴润湿特性的影响, 他认为与光滑平面比, 当液滴完全润湿液滴底部的表面粗糙结构, 即形成 Wenzel 状态时, 如图 1(b) 所示. Wenzel 给出了粗糙度 r 与 Young 接触角 θ_Y 的定量关系:

$$\cos \theta_W = r \cos \theta_Y, \quad (1)$$

θ_W 即实际液滴的接触角 (Wenzel 接触角). 通过方程 (1) 可以看出, 粗糙度因子 r 实际上起着放大固体表面润湿性倾向的作用, 如图 2(a), 当 r 大于 1 时, 使亲水表面更亲水, 疏水表面更疏水.

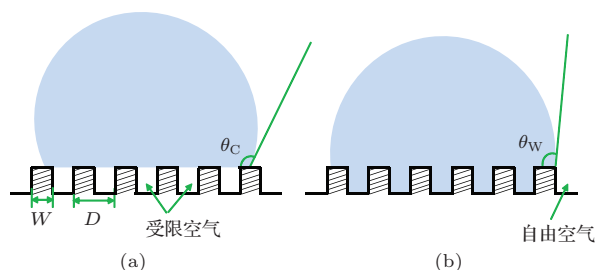


图 1 (网刊彩色) Cassie 液滴状态模型和 Wenzel 液滴状态模型

2.2 Cassie 液滴状态模型

还有一种情况是液滴没有完全润湿粗糙度结构, 而是仅与形成粗糙度的凸起部分的顶部接触, 凸起之间由受限空气填充, 液滴像桥梁一样架在表面的凸起上, 如图 1(a) 所示, 这就是由 Cassie 和 Baxter^[14] 提出的另一种液滴浸润状态——Cassie 状态. Cassie 状态可以理解为当液滴置于粗糙表面, 液滴底部一部分与固体表面接触, 形成液固接触表面, 另一部分与固体凸起之间的受限空气接触, 仍为液气接触表面. 其中液固接触部分占液滴底部的比例为 $\phi_s = W/L$, 液气接触部分为 $1 - \phi_s$.

Cassie 和 Baxter 给出了这种状态下接触角的计算公式:

$$\cos \theta_c = \phi_s (\cos \theta_Y + 1) - 1, \quad (2)$$

θ_c 即为实际接触角 (Cassie 接触角). 从该公式可以看出 Cassie 状态起着一种调和作用, 与光滑固体表面相比它总是增大液滴的接触角, 使之位于 Young 接触角 θ_Y 和 180° 之间. 从图 2(b) 中可以看出对相同的 θ_Y , ϕ_s 越小所得的 θ_c 越大, 即越靠近液滴完全置于空气中的接触角 180° .

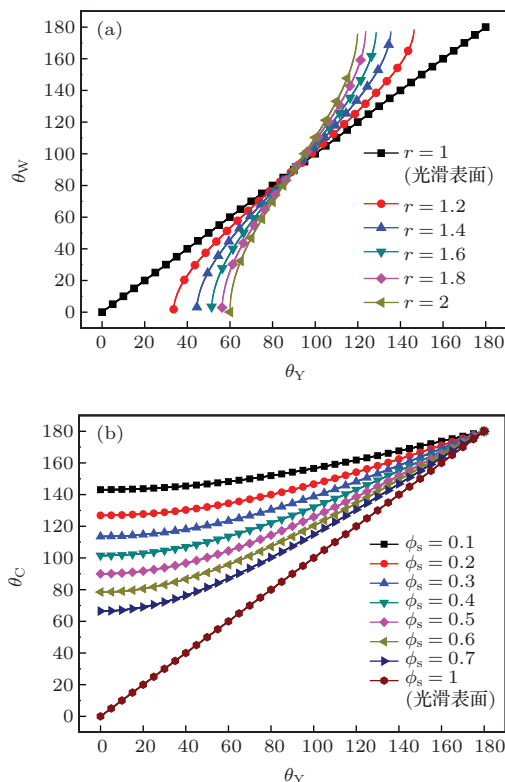


图 2 (网刊彩色) 液滴理论曲线 (a) Wenzel 理论曲线; (b) Cassie-Baxter 理论曲线

在工业领域, 超疏水性不仅需要大的接触角 ($> 150^\circ$), 同时还需要小的滚动角 ($< 10^\circ$), 只有处于这种条件的液滴才能形成自洁效应. 由于液滴黏滞现象的本质是固体表面对液滴的吸附作用, 而根据以上理论分析可以知道, Wenzel 状态增加了固液接触面积, Cassie 状态则较少了固液接触面积, 故处于 Wenzel 状态的液滴在获得较大接触角的同时也增大了滚动角, 不易形成小的滚动角, 相反 Cassie 状态减小了滚动角, 容易形成超疏水表面. 故实际应用中更希望得到 Cassie 状态液滴, 这就需要对此种状态的液滴特性有一个深刻的了解. 本文接下来部分将讨论如何使用 MDPD 方法^[15,16] 模拟 Cassie 状态, 期望为更深入的液滴动力学研究提

供一种可行的思路.

3 模拟方法及实验结果分析

3.1 模拟方法介绍

传统DPD^[17,18]的保守力主要是一种纯排斥作用, 这种力的作用效果是使粒子均匀充满整个计算空间, 适合模拟气体或者满管流体流动问题, 但对于液滴这样的带有自由表面的问题处理起来则无能为力. Liu等^[19]借鉴光滑粒子动力学(SPH)方法^[20], 将传统的DPD保守力改为一种具有长程吸引, 短程排斥作用的势能函数:

$$U(r) = a[AW_1(r, r_{c1}) - BW_2(r, r_{c2})], \quad (3)$$

其中 r_{c1} 和 r_{c2} 分别为排斥作用和吸引作用的截断半径, A 和 B 分别为两种作用的强度系数. 这种方法能形成液气自由表面, 后亦有学者利用这种方法进行液滴动力学研究^[21].

MDPD方法是也是传统DPD方法的一个改进, 它们的主要区别也在于保守力的定义不同. MDPD方法的保守力依赖于相互作用两个粒子各自所处位置的瞬时粒子密度, 即两个粒子间的作用力不仅仅与两个粒子间距离有关, 还与它们各自周围的粒子所加权出来的局部瞬时密度有关, 局部瞬时密度过大时, 处于这个区域的单个粒子所表现出来的排斥力也变大, 这样使得粒子互相远离, 最终使液体区域内的粒子均匀分布. Warren^[15]所推导出的多体保守力的形式为

$$\mathbf{F}_{ij}^C = A\omega_c(r_{ij})\mathbf{e}_{ij} + B(\bar{\rho}_i + \bar{\rho}_j)\omega_d(r_{ij})\mathbf{e}_{ij}, \quad (4)$$

公式右边第一项代表粒子间的吸引力, 第二项代表依赖于局部瞬时粒子密度的排斥力. 两项共同作用保持着流体粒子密度恒定, 进而也保持了液体内部压力恒定和一定大小的表面张力, 具体见3.2节.

局部密度函数 ρ_i 为

$$\rho_i(r_{ij}) = \sum_{i \neq j} \omega_\rho(r_{ij}); \quad (5)$$

根据粒子系统的各态历经性, 二维环境下的密度权函数 ω_ρ 采用同三维环境一样的公式, 即

$$\omega_\rho(r_{ij}) = 15/(2\pi r_d^3)(1 - r_{ij}/r_d)^2; \quad (6)$$

吸引力权函数 ω_c 的公式为

$$\omega_c(r_{ij}) = 1 - r_{ij}/r_c; \quad (7)$$

排斥力权函数 ω_d 的公式为

$$\omega_d(r_{ij}) = 1 - r_{ij}/r_d. \quad (8)$$

当粒子间距 $r_{ij} > r_c$ 时, 吸引力权函数 ω_c 值为零; 当 $r_{ij} > r_d$ 时, 排斥力权函数 ω_d 和密度权函数 ω_ρ 值为零. 本研究取 $r_d = 0.75$, $r_c = 1$.

本研究在二维环境下进行, 在 X 方向设置周期性边界条件, 在 Y 方向设置固体壁面边界条件. 由于DPD粒子之间的作用比较“软”(相对于分子动力学中常用的L-J势), 并且积分算法中使用的是离散时间步长, 粒子有可能会穿过固体壁面, 故采用修改过的Revenga等^[22]提出的回弹反射边界条件将发生穿透的流体粒子送回计算区域. 另外本研究为避免液滴进入Wenzel状态, 在与粗糙结构顶端齐平的空气表面部分也采用回弹反射, 以形成一种强制的Cassie状态.

本研究通过调节流固间保守力 F_{sl}^C 来获得液滴在固体表面的不同浸润性. 同Karniadakis^[23]类似, 我们构建了一个简单但非常灵活的流固保守力作用函数形式, 即

$$F_{sl}^C = \begin{cases} F_b(1 - r_{ij}/r_b), & r_{ij} \leq r_b, \\ F_a/(r_b - r_a)(r_b - r_{ij}), & r_b < r_{ij} \leq r_a, \\ F_a/(r_{sl} - r_a)(r_{sl} - r_{ij}), & r_a < r_{ij} \leq r_{sl}, \end{cases} \quad (9)$$

F_{sl}^C 根据距离大小取值, 距离小的时候取正值, 表现为排斥力, 距离大的时候取负值, 表现为吸引力, 如图3(a)所示. F_a , F_b 分别是吸引力幅值、排斥力幅值, r_b 为排斥力截断半径, r_a 为吸引力幅值出现的位置, r_{sl} 为整个流固作用的截断半径. 当 $r_a = r_b = r_{sl}$ 且 $F_a = 0$ 时, 这个流固权函数就变回传统DPD中常用的纯排斥力流固作用函数. 通过这种形式的函数我们可以非常方便地设置出不同的流固作用模型. 经过多次测试, 我们取 $F_b = 200$, $r_b = 0.1$, $r_a = 0.15$, $r_{sl} = 0.3$, 这样问题就简化为仅通过调节 F_a 的大小来获得不同的浸润性. 如图3(b), 不同 F_a 对应的静态接触角 θ_Y .

接触角的测量同样是一个重要问题, 不同于有些学者采用的拟合圆方法^[21], 我们采用了一种简洁的数值测量接触角的方法, 通过统计当液滴与固体表面接触并达到稳定状态时, 进入紧贴固体表面上一层薄层内的粒子水平方向(X 向)上的最大值和最小值, 其差为接触线长度 L , 然后统计液滴

粒子竖直方向(Y 向)的最大值作为接触高度 H (如图4(a)所示),进而根据公式

$$\theta = 2 \tan^{-1}(2H/L) \quad (10a)$$

计算出液滴三相接触点(二维模拟环境中三相接触线退化成两个接触点)处的切线与固体表面的夹角,即接触角.这种方法很容易扩展到计算前进/后退接触角上,当液滴由于外力作用在表面出现前后接触角不一致时,可以近似认为此时的液滴由两个半径不同的圆弧组成,并且两个圆弧顶点重合,如图4(b)所示.这时仅需要稍微改变(10a)式就能分别计算两个接触角,如以下公式:

$$\theta_A = 2 \tan^{-1}(H/L_A) \quad (10b)$$

和

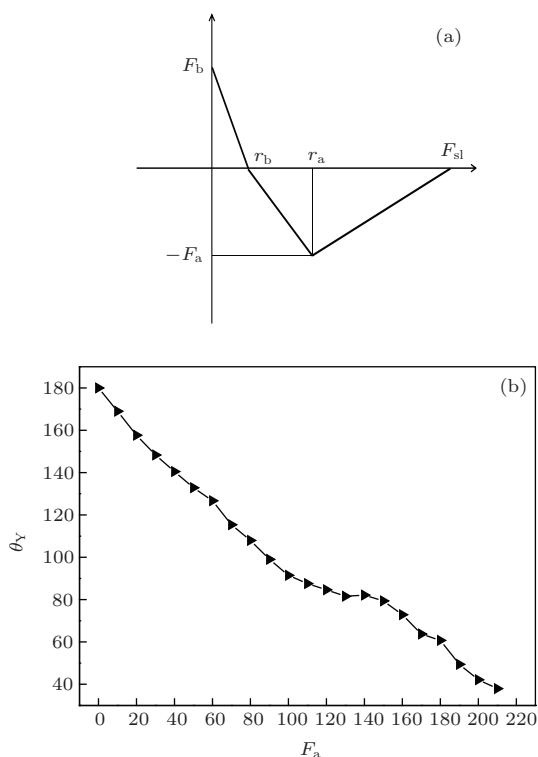


图3 (a) 流固作用函数示意图; (b) 不同 F_a 对应的静态接触角 θ_Y

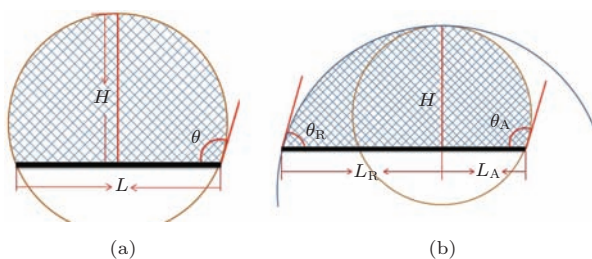


图4 (网刊彩色) 接触角计算示意图 (a) 静态接触角计算示意; (b) 前进/后退接触角计算示意

$$\theta_R = 2 \tan^{-1}(H/L_R). \quad (10c)$$

但这种方法不能用于由滴管拖拽引起的前进/后退接触角,这是因为使用这种方法滴管与液滴的作用使得在液滴上部引起了严重的形状扭曲,这时表面不能近似为两个圆弧,故不能使用我们提出的方法.

3.2 液气表面张力的计算

首先根据 Irving-Kirkwood 模型计算出液滴沿直径方向各样本区的应力张量为

$$\mathbf{S} = -\frac{1}{A} \left\langle \sum_i m \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i + 0.5 \sum_i \sum_{j \neq i} \mathbf{r}_{ij} \mathbf{f}_{ij} \right\rangle, \quad (11)$$

其中 A 是二维样本区面积, $\mathbf{u}_i = \mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}}$,是粒子的特定速度, $\bar{\mathbf{v}}$ 是流体粒子的平均流动速度, $\langle \cdots \rangle$ 表示系综平均.等式右边中第一项是DPD粒子的动量传递形成的应力,第二项表示粒子间相互作用力形成的应力.压力就由应力张量的迹得到

$$P = -\frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{S}. \quad (12)$$

我们仅使用液滴中心到半径的0.5倍处的压力求平均值作为液滴内部压力 P_{in} ,最后根据 Young-Laplace 方程计算出液气表面张力 σ_{lv} :

$$\Delta P = P_{in} - P_{out} = \frac{\sigma_{lv}}{R}. \quad (13)$$

如图5所示,(a)为通过改变保守力中的吸引力项系数得到的不同大小的表面张力和密度,它们都随吸引力项系数的增大而增大;(b)为使用本模拟配置,通过改变不同粒子数所形成不同大小的液滴的密度与表面张力,可以看出无论液滴大小怎么变化,液滴的密度与表面张力都基本保持不变;(c)为半径为11.3的液滴内部压力沿直径的分布(零位置为液滴中心),(d)为其内部密度沿直径的分布,通过这两图可以看出液滴内部的压力和密度保持恒定.

3.3 液滴在表面上的静态特性

为研究液滴在表面的静态特性,我们给初始液滴一个极小下降初速度 $V = 0.1$,这时液滴在固体表面的铺展取决于流固粒子间的相互作用力,这样得到的接触角可认为是静态接触角,如果表面是光滑表面,所得的结果也就是所谓的 Young 接触角 θ_Y .模拟选取 $F_a = 70$,即 $\theta_Y = 118^\circ$.图6为典型的静态接触角和接触线时间变化曲线.

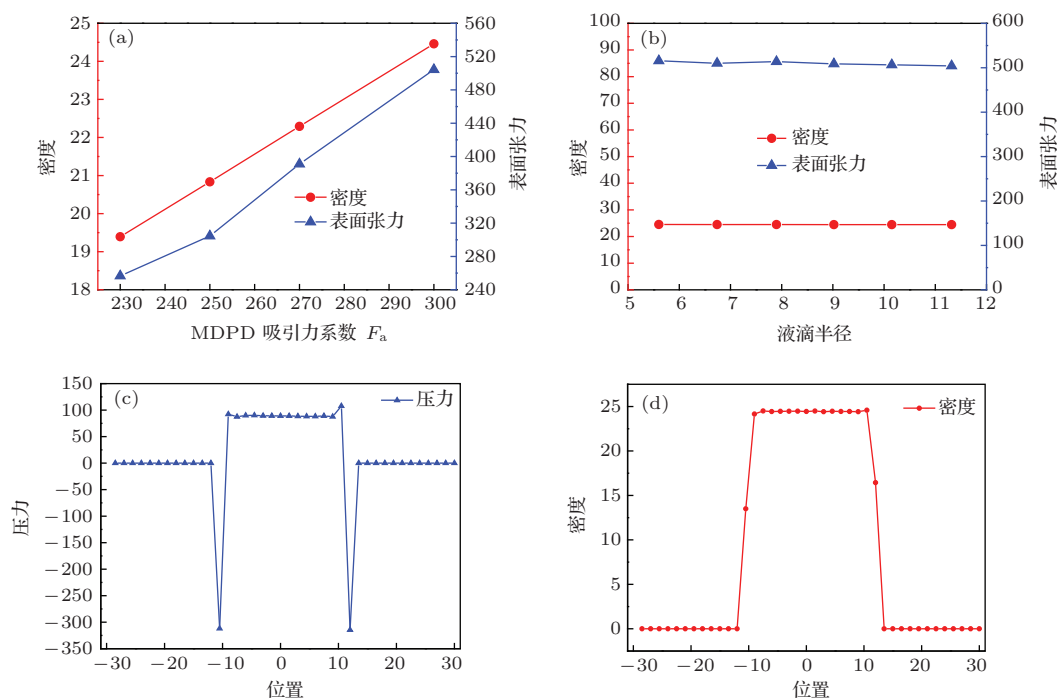


图5 液滴的流体力学性质 (a) 液滴表面张力和密度与保守力吸引力项系数的关系; (b) 不同液滴半径下的密度值和表面张力值; (c) 压力沿直径的分布; (d) 密度沿直径的分布

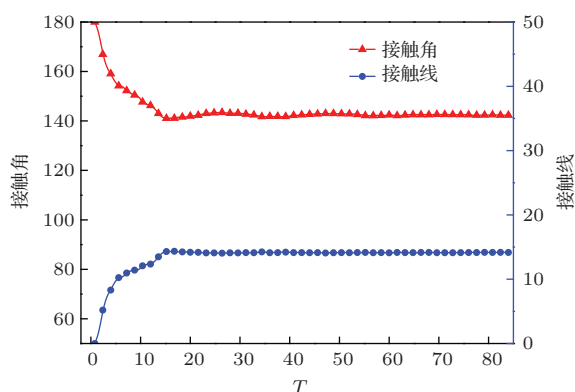


图6 $\phi_s = 0.4$ 的粗糙表面静态接触角、接触线时间变化曲线

为减小统计误差, 我们统计最后 1000 步的计算结果求平均值, 对于出现较大的规律性波动, 则统计最后 2000 步. 根据我们所取的参数, 液滴密度

在 25 左右浮动, 故我们布置初始的流体粒子密度为 25 以加快平衡速度. 经过 16000 步的迭代计算后, 对于不同的 F_a 取值, 各 Cassie 系数 ϕ_s 下都能达到理想的稳定状态. 图 7 为 $\phi_s = 0.2$ 时, 不同的 F_a 取值下的接触角情况, 可以看出我们的模拟方法形成了较理想稳定的圆形液滴.

我们通过与前述 Cassie-Baxter 理论值作对比, 来讨论本模拟方法的合理性. 图 8 是不同 ϕ_s 下 θ_c 的模拟值与理论曲线对比, 其中模拟值是 F_a 从 0 到 210, 间隔为 10 的取值.

通过图 8 可以看出, 当 $\phi_s = 0.2, 0.3$ 时, 模拟值与理论值符合得较好. 而 $\phi_s = 0.4, 0.6$ 时, 当 Young 接触角 $\theta_Y \geq 120^\circ$ 时符合得非常好, 但 $\theta_Y < 120^\circ$ 时, 模拟值的偏差较大. 我们分析以下两个原因造成了这种偏差.

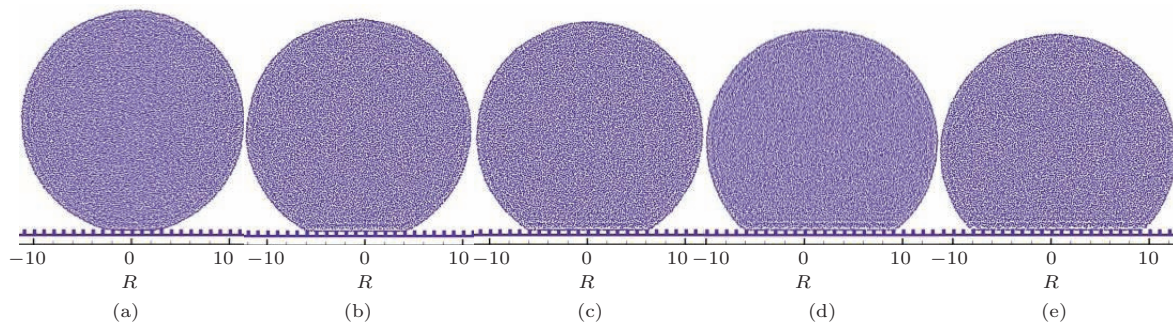
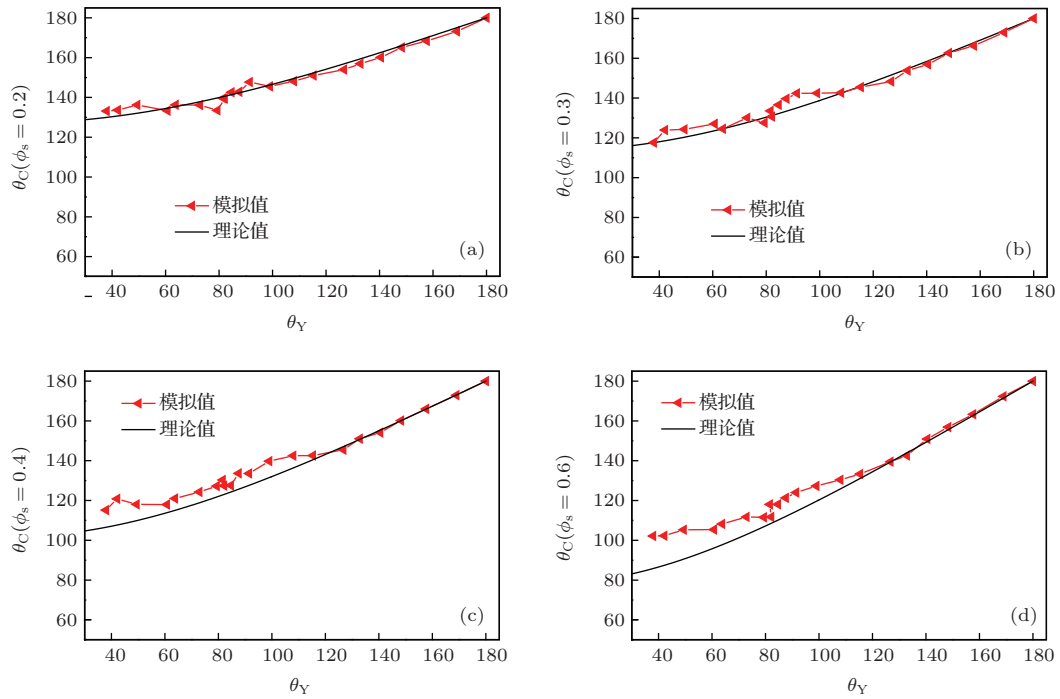


图7 $\phi_s = 0.2$ 时, 不同 F_a 的液滴最终状态 (a) $F_a = 20$, $\theta_c = 170.3^\circ$; (b) $F_a = 60$, $\theta_c = 154^\circ$; (c) $F_a = 100$, $\theta_c = 147.7^\circ$; (d) $F_a = 140$, $\theta_c = 139.4^\circ$; (e) $F_a = 180$, $\theta_c = 133.3^\circ$


 图8 模拟值与理论值的对比 (a) $\phi_s = 0.2$; (b) $\phi_s = 0.3$; (c) $\phi_s = 0.4$; (d) $\phi_s = 0.6$

首先, 基于粒子的模拟方法本身存在着一种多尺度的问题. 因为浸润性形成的根本原因是流固分子间相互作用, 而这一尺度在皮米级别, 粗糙结构一般在微米级别, 而表现出来的则是宏观上液滴接触角的不同, 这三者在尺度上相差很大, 属于一种跨尺度问题. 而我们设定的流固作用力截断半径、柱体宽度与液滴半径所处的尺度范围相差并不大, 没有形成多尺度模拟. 对偏差较大的 $\phi_s = 0.6$, 由于流固作用半径 $r_{sl} = 0.3$, 实际上本应属于空气的两个柱体之间也完全被包含在流固作用范围内, 如图9, 这就造成了模拟值和理论值之间的偏差. Patankar等^[24]在其实验中也提到Cassie-Baxter和Wenzel理论是基于粗糙结构尺寸相对于液滴尺寸足够小, 假如这个尺寸差别不够大, 则会造成实验值和理论值不符. 因此尺度问题是造成模拟有偏差的原因之一.

其次, 非均质表面的黏滞作用^[2,25]. 由于固体表面和空气的周期性间隔出现形成了一种非均质表面, 固体粒子对液滴粒子的吸引作用在一定程度上阻碍三相接触线的运动, 把接触点别在某个粗糙结构表面, 并且随着 F_a 和 ϕ_s 的增大, 参与对液滴吸附的固体表面面积及吸引力值都在增大, 导致这种黏滞能力增强, 这就造成了在 ϕ_s 和 F_a 较大时模拟值偏大. 而在Cassie-Baxter理论中并不考虑这种黏滞作用对接触线运动的影响. 因此粗糙度所造

成的非均质表面对接触线的黏滞作用也是造成模拟值和理论值不同的原因之一, 表明Cassie-Baxter理论在实际应用中存在一定的局限性^[25]. 另外模拟中所得的静态接触角实际上是一个接近前进接触角的值, 这是因为液滴的释放速度非常小, 接触到表面后, 接触角是一个由大到小的递减过程, 结合接触线的单调递增, 如图6, 可以确定得到的接触角的值接近前进接触角. 在Patankar等^[24]的实验中, 同样得到了轻微释放的液滴处于Cassie状态, 并且所得接触角为前进接触角的结论.

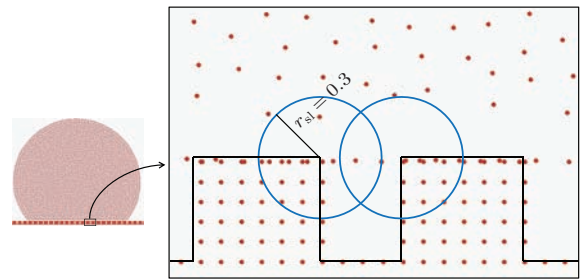


图9 (网刊彩色) 尺度问题示意

3.4 液滴在表面上的动态特性

为研究液滴在表面的动态特性, 我们设置了足够大但不引起液滴碎裂的初始撞击速度 $V = 10$ 撞击三组微结构表面, 其中微结构表面分别取 $\phi_s = 0.2, 0.6$ 和 1. 如图10所示, 第一行图为液滴

刚接触固体表面还未开始铺展的形状, 第二行图为液滴达到最大铺展直径的形状, 第三行图为液滴在最大铺展直径后的最小铺展直径的形状, 第四幅图为液滴最终平衡形状. 首先每组液滴动态形状与其静态形状相比都产生了很大形变. 对于不同的微结构表面, 其最大铺展形状都为一个类似于平底锅形状, 这种形状在很多物理实验与数值模拟中都有出现^[26,27]. 但在最小铺展行有很大不同, 对于 $\phi_s = 0.2$ 的表面, 最小铺展为零, 也就是说液滴弹离了表面, 对于 $\phi_s = 0.6$ 的表面, 最小铺展直径与最终平衡形态比很小, 液滴被拉的很长, 而对于光滑平面, 液滴的小铺展直径与最终平衡形态相差无几, 说明这种表面较早地进入了平衡形态. 我们可以从能量转换的角度进行分析, 液滴在第一行时具有最大的动能 E_{k0} (宏观动能, 不包括粒子的热运动)和最小的表面能 E_{s0} , 当液滴到达第二行时, 液

滴的动能减为零, 但表面能却由于形变达到最大值, 也就是说, 在这个过程中, 液滴的动能一部分通过液滴形变被储存到液滴的表面能中, 这时的液滴处于最不稳定状态, 所以液滴紧接下来会通过调整自身表面在固体和空气中的分布来释放部分表面能, 也就是重新转化为液滴的动能, 于是产生了液滴的回退过程. 但由于固体粒子和流体粒子的保守力及其耗散力起到了阻碍粒子运动, 也就是消耗动能的作用, 所以总能量 $E_{k0} + E_{s0}$ 被不断消耗, 最终动能被消耗完, 表面能达到局部最小值, 这时的液滴也就进入了平衡状态. 因此可以说液滴的动态铺展是一个能量消耗的过程. 值得注意的时, 在低 ϕ_s 的表面液滴发生了反弹, 这正是超疏水表面所希望的结果, 而高 ϕ_s 或者光滑平面液滴均留在了固体表面上. 因此可以得出结论, 对相同的液滴, 其反弹的发生与表面粗糙结构有关.

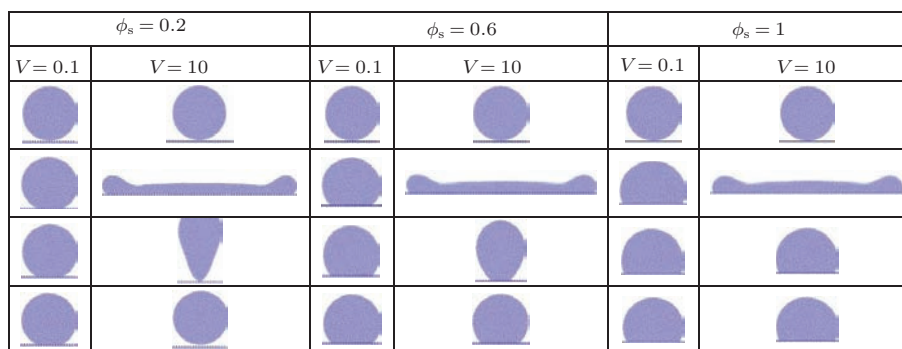


图 10 撞击过程中典型时刻的液滴形状

4 结 论

本文从理论上分析了具有微粗糙结构的表面对液滴浸润性的影响, 并通过MDPD方法对Cassie状态进行模拟. 本研究首先设计出一种合适的流固作用函数模型, 使用这种模型我们获得了不同光滑表面上的接触角, 然后使用相同的模拟配置, 在光滑表面增加粗糙结构, 研究粗糙结构对接触角的影响, 并进一步和理论值作对比. 研究得出以下结论:

1) 通过理论分析表明, Wenzel模型和Cassie模型均能得到大于 150° 的接触角, 但只有处于Cassie状态的液滴能获得较小的滚动角, 得到真正的超疏水表面.

2) 在液滴静态模拟中, 与Cassie-Baxter理论值的对比表明, 在 ϕ_s 较小时, 模拟值与理论值符合的较好, 但在 ϕ_s 较大时出现了较明显的黏滞现象,

尤其在吸引力系数 F_a 增大时, 表明Cassie-Baxter理论没有考虑非均质表面的黏滞作用, 使其在实际应用中存在着一定的局限.

3) 在液滴的动态模拟中, 通过分析液滴在铺展过程中的不同形态, 指出了液滴的能量转换与形态变化的关系, 并得到相同的撞击速度下, 低 ϕ_s 能引起液滴的反弹的结论.

4) 本研究使用的流固作用函数能方便地获得各种表面浸润性, 所得出的数据收敛性好, 接触角测量方法准确, 表明使用以MDPD方法为核心的数值模拟方法适合研究带自由表面的液滴动力学问题.

参考文献

- [1] Youngblood J P, McCarthy T J 1999 *Macromolecules* **32** 6800

- [2] Shirtcliffe N J, McHale G, Atherton S, Newton M I 2010 *Advances in colloid and interface science* **161** 124
- [3] Mishchenko L, Hatton B, Bahadur V, Taylor J A, Krupenkin T, Aizenberg J 2010 *ACS. Nano* **4** 7699
- [4] Gao X, Jiang L 2004 *Nature* **432** 36
- [5] Feng X Q, Gao X, Wu Z, Jiang L, Zheng Q S 2007 *Langmuir* **23** 4892
- [6] Gao X, Yan X, Yao X, Xu L, Zhang K, Zhang J, Jiang L 2007 *Advanced Materials* **19** 2213
- [7] Boreyko J B, Baker C H, Poley C R, Chen C H 2011 *Langmuir* **27** 7502
- [8] Yao Y, Zhou Z W, Hu G H 2013 *Acta. Phys. Sin.* **62** 134701 (in Chinese) [姚伟, 周哲玮, 胡国辉 2013 物理学报 **62** 134701]
- [9] Liu M B, Liu G R, Zhou L V, Chang J Z 2014 *Arch. Computat. Methods Eng.* DOI:10.1007/s11831-014-9124-x
- [10] Singh E, Thomas A V, Mukherjee R, Mi X, Houshmand F, Peles Y, Koratkar N 2013 *ACS Nano* **7** 3512
- [11] Weng B H, Liu H Y, Zhang C Y, Wang Q 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4353
- [12] Yin H H, Yang X F, Wang C F, Li H B 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2878
- [13] Wenzel R N 1936 *Industrial & Engineering Chemistry* **28** 988
- [14] Cassie A B D, Baxter S 1944 *Transactions of the Faraday Society* **40** 546
- [15] Warren P B 2003 *Phys. Rev. E* **68** 066702
- [16] Trofimov S Y, Nies E L F, Michels M A J 2005 *The Journal of Chemical Physics* **123** 144102
- [17] Hoogerbrugge P J, Koelman J M V A 1992 *Europhys. Lett.* **19** 155
- [18] Groot R D, Warren P B 1997 *The Journal of Chemical Physics* **107** 4423
- [19] Liu M B, Meakin P, Huang H 2006 *Phys. Fluids* **18** 017101
- [20] Ma L Q, Chang J Z, Liu H T, Liu M B 2012 *Acta. Phys. Sin.* **61** 054701 (in Chinese) [马理强, 常建忠, 刘汉涛, 刘谋斌 2012 物理学报 **61** 054701]
- [21] Zhang M K, Chen S, Shang Z 2012 *Acta. Phys. Sin.* **61** 034701 (in Chinese) [张明焜, 陈硕, 尚智 2012 物理学报 **61** 034701]
- [22] Revenga M, Zuniga I, Espanol P, Pagonabarraga I 1998 *International Journal of Modern Physics C* **9** 1319
- [23] Arienti M, Pan W X, Li X, Karniadakis G 2011 *The Journal of chemical physics* **134** 204114
- [24] He B, Patankar N A, Lee J 2003 *Langmuir* **19** 4999
- [25] Gao L, McCarthy T J 2007 *Langmuir* **23** 3762
- [26] Eggers J, Fontelos M A, Josserand C, Zaleski S 2010 *Physics of Fluids* **22** 062101
- [27] Deng X, Schellenberger F, Papadopoulos P, Vollmer D, Butt H J 2013 *Langmuir* **29** 7847

Drops on microstructured surfaces: A numerical study using many-body dissipative particle dynamics^{*}

Wang Yu-Xiang Chen Shuo[†]

(School of Aerospace Engineering and Applied Mechanics, Tongji University, Shanghai 200092, China)

(Received 22 July 2014; revised manuscript received 1 September 2014)

Abstract

Because of their ability of self-clean, superhydrophobic surfaces have received substantial attention for years especially in surface science field. In this paper, the drop's wettability on different rough surfaces is simulated by using many-body dissipative particle dynamics (MDPD) and a contrast with the Cassie-Baxter theory's predictions is made. A combination of short-range repulsive and long-range attractive forces is used as wall-fluid interaction to generate different wettability, and a simple but efficient numerical method is introduced to measure the contact angle. The simulation could capture the static and dynamic properties of drop on textured surfaces, it is also shown that the microstructured surfaces can pin the three-phase (solid-liquid-vapour) contact line and this phenomenon has also been observed by other researchers in their physical experiments, suggesting that people should be careful when using the Cassie-Baxter theory. An analysis was given about energy transformation between kinetic energy and surface energy. The simulated results also show that the low can cause the drop to rebound easily under the same impact velocity.

Keywords: drop model, contact angle, surface roughness, many-body dissipative particle dynamics

PACS: 47.10.-g, 47.11.-j, 47.55.db, 68.35.Ct

DOI: 10.7498/aps.64.054701

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51276130, 10872152), and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 2012007211037).

[†] Corresponding author. E-mail: schen_tju@tongji.edu.cn