

纳米颗粒状态转变影响沸腾传热的分子动力学研究*

白璞^{1)2)†} 杜孟华¹⁾²⁾ 王登甲^{1)2)‡} 周乐平³⁾ 刘艳峰¹⁾²⁾

1) (绿色建筑全国重点实验室, 西安 710055)

2) (西安建筑科技大学建筑设备科学与工程学院, 西安 710055)

3) (华北电力大学, 能源动力与机械工程学院暨电站能量传递转化与系统教育部重点实验室, 北京 102206)

(2025年12月31日收到; 2026年1月18日收到修改稿)

纳米颗粒在流体中以悬浮与沉积两种状态存在, 其状态会在沸腾过程中随颗粒高度变化而转变, 从而显著影响传热性能. 本文采用分子动力学模拟方法, 研究了颗粒状态随初始高度的转变规律, 并对比分析了沉积态与悬浮态纳米颗粒对沸腾传热的影响机制. 研究表明, 沉积态颗粒凭借与加热壁面间高效的固-固热传导, 显著地强化沸腾传热; 而悬浮态颗粒主要通过热辐射与近场热传导从壁面获取能量, 作为间接热源促进流体传热, 其效果不及沉积态颗粒. 两种状态的纳米颗粒对沸腾传热的强化效果均优于纯水体系, 具体表现为更高的升温速率、更大的临界热流密度以及更早的气泡成核时间. 此外, 结合颗粒运动轨迹及其对沸腾传热性能的影响分析, 本研究确定了颗粒状态转变的临界高度为 $h_c = 1.0$ nm: 当颗粒初始高度低于该临界值时, 悬浮的颗粒最终沉积于加热壁面; 而若初始高度高于此值, 颗粒则始终保持悬浮状态. 通过对纳米颗粒初始高度与临界热流密度及气泡成核时间进行无量纲拟合分析, 发现颗粒高度对二者的影响在临界高度以下较为显著, 而在临界高度以上影响明显减弱. 该研究从纳米尺度揭示了颗粒状态影响沸腾传热的内在机理, 为强化沸腾传热提供了理论依据.

关键词: 纳米颗粒, 纳米流体, 沸腾传热, 分子动力学

DOI: 10.7498/aps.75.20251797

CSTR: 32037.14.aps.75.20251797

1 引言

沸腾传热依靠极高的传热效率成为保持表面较低温度的有效手段之一, 在航天航空、机械制造及微电子冷却等诸多工业领域有重要发展意义^[1-3]. 随着系统功率密度的不断提升, 具有高散热需求的固体表面所引发的热管理问题亟待解决. 在此背景下, 纳米颗粒强化技术通过在分子尺度影响沸腾过程, 进而成为有效提升传热性能的新途径而受到许多关注.

“纳米颗粒强化技术”自1995年被提出之后^[4], 在沸腾传热领域展现出显著的应用潜力, 逐渐成为提升沸腾传热性能的重要研究方向. 近年来, 许多学者在宏观尺度上针对悬浮和沉积态纳米颗粒对沸腾传热的影响进行了研究. Modi等^[5]通过对纳米流体中沉积在固体壁面的颗粒进行研究, 表明沉积态纳米颗粒会影响壁面粗糙度和润湿性, 显著地减小气泡脱离直径, 增加脱离频率, 进而有效地提升池沸腾传热效率. Vafaei和Purkayastha^[6]发现悬浮纳米颗粒会在气-液界面处发生聚集并自组装, 降低表面张力约50%, 从而提高传热效率. 然而,

* 国家自然科学基金 (批准号: 52508139) 和中国博士后科学基金 (批准号: 2025M781554) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: bp1512905225@163.com

‡ 通信作者. E-mail: wangdengjia@xauat.edu.cn

宏观实验难以揭示纳米颗粒在界面处的动态行为与状态转变的临界条件, 因此亟需从纳米尺度进一步探究其微观机制.

在纳米尺度中, 也有学者通过分子动力学 (MD) 模拟方法研究了悬浮态和沉积态纳米颗粒对沸腾传热的影响. Yin 等^[7]通过 MD 模拟方法探究了沉积态纳米颗粒在沸腾过程中的作用, 发现沉积颗粒可以增加固体表面传热面积, 将能量有效传递至纳米流体, 进而促进沸腾传热. Wang 和 Tian^[8]研究了纳米流体的沸腾行为, 指出沉积纳米颗粒能够增强固液间的热量传递, 不仅加快气泡的成核与生长速度, 还缩短了快速沸腾的起始时间. Yin 等^[9]从微观尺度揭示了悬浮纳米颗粒对沸腾成核过程的影响机制. 结果表明悬浮纳米颗粒会在气-液界面处聚集, 从而有效地降低临界气泡半径与成核能垒, 加速沸腾发生. Yin 等^[10]运用分子动力学模拟方法, 研究了金属表面上悬浮纳米颗粒对沸腾换热特性的影响, 发现纳米颗粒可以通过引发局部扰动增强固液间的能量传递, 进而有效地强化沸腾换热.

综上所述, 现有基于分子动力学的纳米颗粒强化沸腾传热研究, 通常将纳米颗粒的状态预设为悬浮或沉积, 并分别探讨其对沸腾行为与传热性能的影响. 然而在实际沸腾过程中, 纳米颗粒的状态并非事先固定, 而是受到颗粒-壁面相互作用、流体热扰动及初始位置等多种因素的影响, 并可能在沸腾过程中发生状态转变. 忽略这一状态变化过程, 难以揭示纳米颗粒对沸腾传热影响的内在机理, 也限制了对其强化机制的深入理解.

基于此, 本文采用分子动力学模拟方法, 不再预设纳米颗粒的初始状态, 通过调节纳米颗粒相对于加热壁面的初始高度, 使其在沸腾过程中自发呈现悬浮、沉积或状态转变等不同行为, 从而探究纳米颗粒状态演变及其对沸腾传热特性的影响. 本研究旨在明确纳米颗粒由悬浮向沉积转变的临界高度, 定量地分析不同状态下临界热流密度与气泡成核行为的变化规律, 进而揭示纳米颗粒在沸腾过程中的作用机制.

2 模型建立

2.1 物理模型

本研究采用 LAMMPS 进行模拟^[11], 并利用 OVITO 进行可视化^[12]. 如图 1 所示, 创建尺寸为

$7.22 \text{ nm}(x) \times 3.61 \text{ nm}(y) \times 60 \text{ nm}(z)$ 的长方体盒子, 并在 x 和 y 方向采用周期性边界条件, z 方向采用反射边界条件. 底部为铜原子构成的固定层和热源层, 用来固定基底与加热纳米流体, 铜原子采用面心立方晶格 (FCC) 排列, 晶格常数为 3.61 \AA . 铜基底上方为 8 nm 厚度的流体, 采用 TIP4 P 刚性水模型, 键长键角分别固定为 104.52° 与 0.957 \AA . 该模型已被广泛用于纳米沸腾模拟, 能准确描述水分子的热运动行为^[13,14]. 在基底上方, 有圆柱形铜纳米颗粒, 其 x 方向直径 $R = 2.4 \text{ nm}$, y 方向长度为 3.61 nm , 初始高度 h 为纳米颗粒底部至加热壁面的距离. 选择圆柱形纳米颗粒的原因是因为其具有较好的对称性和沿着 y 方向更大的表面积与体积比, 从而可以更准确地模拟和观察传热过程, 这有助于深入理解悬浮态和沉积态纳米颗粒对沸腾特性的影响. 此外, 圆柱形纳米粒子在传热、生物及医学等领域有着广泛的应用^[15-17].

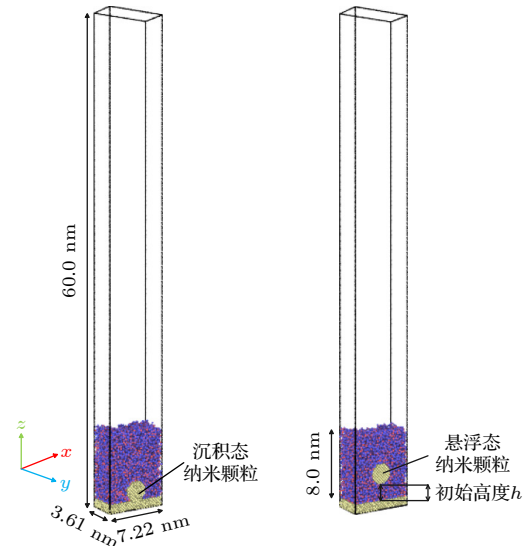


图 1 系统初始模型

Fig. 1. Initial model of the system.

2.2 分子间相互作用

在分子动力学模拟中, 引入势函数来准确描述粒子运动的真实轨迹和分子间相互作用力^[18]. 铜-铜原子间和铜-氧原子间的相互作用力采用 12-6 Lennard-Jones (LJ) 势来描述^[19]:

$$U_{ij} = 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{d_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{d_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

式中, d_{ij} 表示原子 i 和 j 之间的距离; σ_{ij} 和 ε_{ij} 则为原子的特征长度和能量参数.

同时,水分子间的相互作用力采用 L-J 势和长程库仑力来描述^[20]:

$$U_{ij} = \frac{C_{\text{coul}}q_{e,i}q_{e,j}}{d_{ij}} + 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{d_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{d_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2)$$

式中, C_{coul} 为库仑常数; q_e 表示原子所带电荷. 不同原子间的 σ_{ij} 和 ε_{ij} 根据混合 Lorentz-Berthelot 守则计算得出^[21]:

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}, \quad \varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}. \quad (3)$$

模拟过程中设置截断半径为 15 Å, 原子间作用势能参数如表 1 所列.

表 1 原子间作用势能参数
Table 1. Potential energy and related parameters between atoms.

粒子 i, j	q_e/e	$\sigma_{ij}/\text{Å}$	ε_{ij}/eV
H—H	+0.52	0.00	0.0000
O—O	-1.04	3.165	0.006998
Cu—Cu	—	2.33	0.4096
Cu—H	—	0.00	0.0000
Cu—O	—	2.75	0.034

2.3 模拟过程

模拟分为弛豫和相变两个阶段^[22]. 在弛豫阶段, 保持溶剂和加热壁为正则系综 (NVT), 时间步长为 1 fs, 利用 Nose-Hoover 热浴器保持加热壁面温度为 300 K 并运行 1000 ps, 以确保系统达到热力学平衡^[23]. 在相变阶段, 保持加热壁温度为 650 K, 改变纳米颗粒的初始高度进行模拟, 包括 0, 0.5, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0 和 5.0 nm, 并设置无纳米颗粒的纯水流体组进行对照. 将溶剂保持微正则系综 (NVE) 并运行 1000 ps, 以研究颗粒状态对沸腾过程的影响.

3 结果与讨论

3.1 纳米流体相变过程

纳米颗粒在流体中主要存在两种形态: 悬浮于流体内部和沉积在加热壁面^[24,25]. 纳米颗粒的位置与其对沸腾传热的影响密切相关. 若颗粒远离加热壁面, 通常保持悬浮状态, 其作用主要表现为增强颗粒底部溶剂的热导率, 从而提升整体的沸腾传热性能. 反之, 若颗粒接近加热壁面, 则易吸附并沉

积在表面, 形成具有纳米结构的沉积层, 促进气泡成核, 进一步强化传热过程. 由此可见, 纳米颗粒与壁面之间的距离不仅决定其最终形态, 还对应着悬浮与沉积两种不同的传热强化机制^[26,27]. 为此, 本文旨在研究纳米颗粒距壁面高度对其状态变化的影响规律, 并揭示不同状态下纳米颗粒对沸腾传热的作用机制.

图 2 展示了不同初始高度下纳米流体的相变快照图, 其中气泡成核时间是沸腾过程中的一个重要节点. 在本研究中, 通过计算水分子的密度来得到气泡体积进而识别气泡成核的发生. 水分子密度的计算是将模拟盒子沿着 x, y 和 z 方向分别分为 20, 10, 100 个部分, 每个计算域为 $0.36 \text{ nm}(x) \times 0.36 \text{ nm}(y) \times 0.6 \text{ nm}(z)$, 根据原子的位置可以得到每个部分中水分子的密度. 当在液膜内部第一次出现体积超过 10 nm^3 的气泡时, 将其视为气泡成核的开始. 如图 2(a) 所示, 无纳米颗粒的纯水流体在 582 ps 发生气泡成核^[28], 随后在 638 ps 形成蒸气层; 当颗粒沉积在固体表面时, 如图 2(b)—(d) 所示, 气泡成核时间发生在 344—445 ps; 当颗粒保持悬浮时, 如图 2(e)—(i) 所示, 气泡胚核形成时间在 460—568 ps. 由此可知, 当颗粒沉积时, 纳米流体最早在 344 ps 气泡成核, 相较于悬浮态颗粒和纯水流体 568 ps 和 582 ps 的气泡成核时间, 缩短最大约 39.4% 和 40.9%. 此外, 进一步分析发现, 颗粒在溶剂中的状态与其初始高度有关. 在高度为 0.5 和 1.0 nm 时, 颗粒先短暂悬浮, 随后分别于 215 和 399 ps 沉积在固体壁面. 而当高度为 1.5—5.0 nm 时, 颗粒则始终悬浮.

为了探究纳米颗粒对传热过程的影响, 图 3 展示了相变过程中颗粒和纳米流体的温度变化. 由图 3 可以看到, 在所有工况下, 颗粒的升温速率与最终温度均高于对应的纳米流体. 如图 3(a) 所示, 在初始高度为 0 nm 时, 颗粒的升温速率最快, 其温度在 30 ps 内迅速升高至约 600 K, 随后升温趋势逐渐趋于平缓, 最终与加热壁面温度 (650 K) 达到平衡. 这是由于颗粒与壁面紧密接触时, 固体间的高效热传导较为显著. 在高度为 0.5 和 1.0 nm 时, 颗粒在 200 ps 前的升温速率分别为 1.28 K/ps 和 1.14 K/ps. 随后, 颗粒分别在约 215 和 399 ps 处发生沉积, 之后温度迅速升高至 650 K 并保持稳定. 在高度为 1.5—5.0 nm 时, 颗粒始终悬浮, 其在 200 ps 前的升温速率分别为 0.98, 0.95, 0.74,

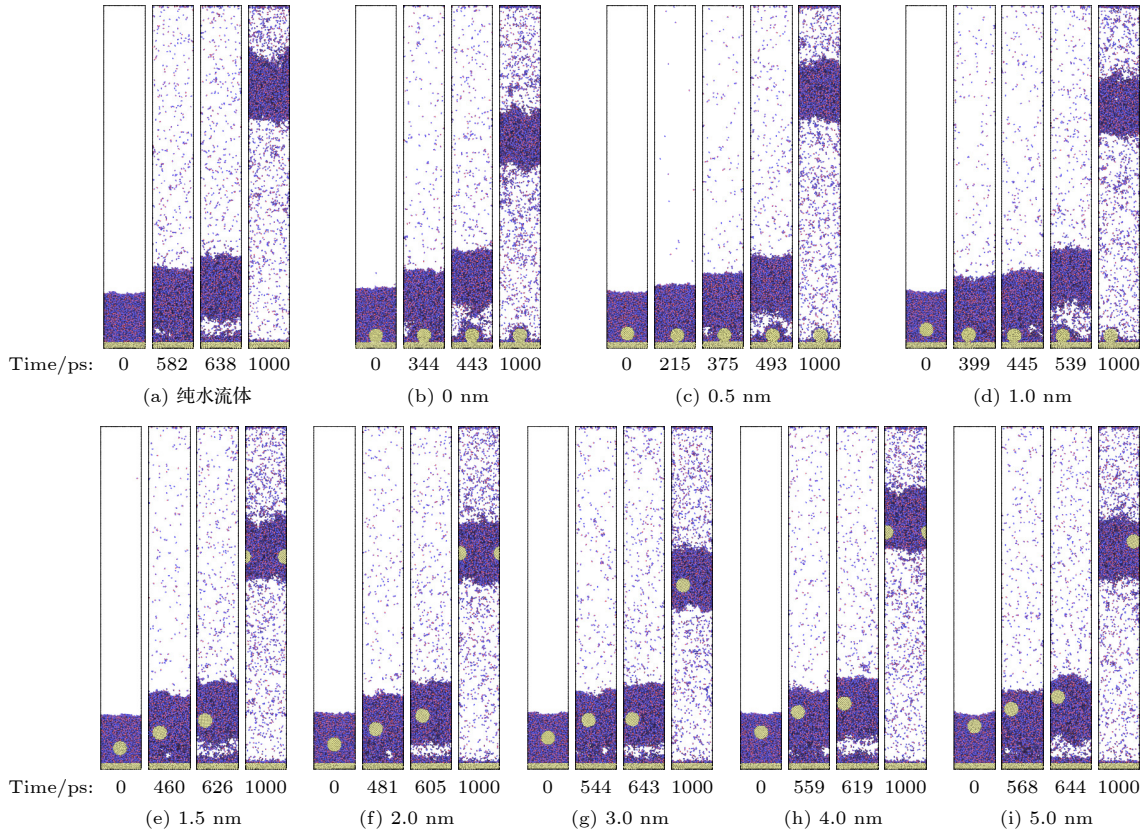


图 2 不同初始高度下纳米流体相变过程的活动快照

Fig. 2. Snapshots of the phase change process for nanofluids at different initial heights.

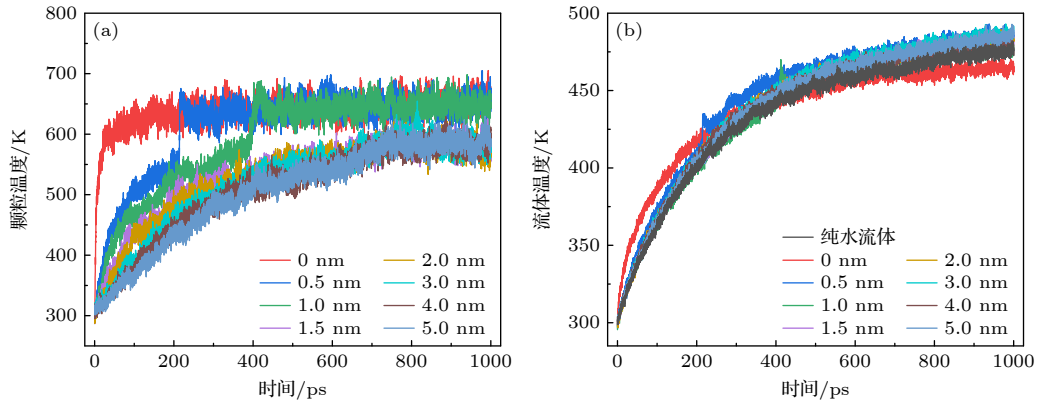


图 3 不同高度下纳米颗粒和纳米流体的温度变化

Fig. 3. Particle temperature and nanofluid temperature at different initial heights.

0.67 及 0.56 K/ps, 均小于沉积颗粒的情况. 此外, 悬浮颗粒的最终温度约为 580 K, 明显低于沉积颗粒. 图 3(b) 中, 当颗粒初始高度为 0 nm 时, 流体在前 200 ps 内升温最快, 之后升温速率显著下降, 最终温度稳定在约 450 K, 低于其他工况的最终温度. 这是由于约 443 ps 时流体内部形成了蒸气膜, 较大的气膜热阻阻碍了热量从固体壁面向流体内部的传递, 导致后续流体温度上升缓慢. 在 0.5 与

1.0 nm 高度下, 同样出现了由于颗粒沉积而导致的温度波动, 但波动幅度并不显著. 而在颗粒高度为 1.5—5.0 nm 时, 流体温度在蒸气膜形成前迅速增加, 之后增速减慢, 最终稳定在 480 K 左右. 纯水流体温度的变化趋势与悬浮颗粒纳米流体相近, 但最终温度低于高度为 0.5—5.0 nm 时的流体温度.

为了进一步研究纳米颗粒初始高度对沸腾传热的影响, 引入加热壁与纳米流体之间的热通量,

利用下式进行计算^[29]:

$$q = \frac{1}{A_s} \cdot \frac{dE_l}{dt}, \quad (4)$$

式中, 水平横截面积 $A_s = 7.22 \times 3.61 \text{ nm}^2$; E_l 代表纳米流体的总能量.

图 4 展示了纳米流体在不同颗粒初始高度下热流密度的变化特征. 由于水分子间氢键网络的动态断裂重组引发能量的不断涨落, 使得计算出的热流密度也随之震荡. 在模拟初始阶段, 加热壁面与流体间温度梯度最大, 热流密度也在初始阶段达到峰值, 随着温度梯度逐渐减小, 热流密度迅速降低. 随后蒸气层出现, 固-液界面转变为固-气界面, 界面热阻显著增大, 此时热流密度减小至低值并继续震荡. 在初始高度为 0 nm 时, 纳米颗粒始终沉积于加热壁面, 其作用相当于增大了固-液间的有效传热面积, 因此该工况下流体的热流密度达到所有工况中的最高值, 为 $3.74 \times 10^{-4} \text{ eV}/(\text{\AA}^2 \cdot \text{ps})$. 对于 0.5 与 1.0 nm 高度下, 热流密度在初始时刻达到最大值, 分别为 3.02×10^{-4} 和 $2.85 \times 10^{-4} \text{ eV}/(\text{\AA}^2 \cdot \text{ps})$, 随后由于颗粒的沉积引发热流密度发生明显震荡. 初始高度增加至 1.5—5.0 nm 时, 颗粒始终保持悬浮, 热流密度峰值约为 $2.79 \times 10^{-4} \text{ eV}/(\text{\AA}^2 \cdot \text{ps})$, 随壁面加热过程, 热通量逐渐降低. 纯水流体的最大热通量为 $2.62 \times 10^{-4} \text{ eV}/(\text{\AA}^2 \cdot \text{ps})$, 低于其他所有工况. 因此, 纳米流体的热流密度峰值相较于纯水流体提升最大约 42.7%; 相较于悬浮颗粒, 颗粒沉积时纳米流体的热流密度峰值提升最大约 32.1%.

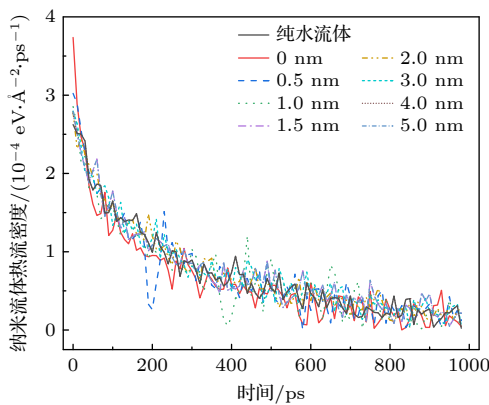


图 4 不同高度下纳米流体的热流密度

Fig. 4. The heat flux of nanofluids at different initial heights.

3.2 纳米颗粒状态对传热特性的影响

图 5 为纳米流体在不同颗粒状态下的传热机

制示意图. 如图 5(a) 所示, 当颗粒沉积在加热壁上时, 加热壁通过固体热传导将热量直接传递至纳米颗粒^[30,31]. 研究表明, 在纳米尺度下金属铜的导热系数约为 $30 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ^[32], 相比纳米级水膜约 $0.1 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 的导热系数高出两个数量级^[33]. 由于金属间声子传导效率极高, 热量得以迅速由壁面传至纳米颗粒, 使颗粒温度快速与壁面达到平衡. 其作用等效于显著扩展了高热导率的有效加热面积, 极大地降低了界面热阻, 从而显著地促进沸腾传热. 当两个固体表面间距减小至几纳米以下时, 热传递将主要发生在近场区域, 该条件下热辐射与热传导的耦合作用显著增强^[29], 如图 5(b) 中悬浮纳米颗粒与加热壁面相互作用所示. 此时, 溶剂水的热量来自两个热源: 一是直接热源 (加热壁面), 通过热传导向水传递能量; 二是间接热源 (悬浮纳米颗粒), 其通过近场热辐射与热传导从加热壁获取能量, 再传递至溶剂水. 加热壁与悬浮颗粒之间的热辐射与热传导具有较高的传热效率, 使纳米颗粒的升温速率高于溶剂水. 然而, 由于壁面-颗粒狭缝的传热性能仍低于固-固直接接触, 悬浮颗粒作为间接热源的强度也相应弱于沉积颗粒. 因此, 沉积纳米颗粒对沸腾传热的强化效果最为显著, 悬浮纳米颗粒次之, 二者均优于纯水体系.

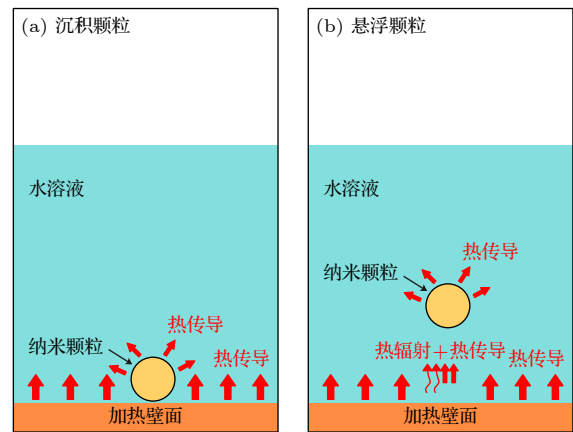


图 5 不同状态纳米颗粒的传热示意图

Fig. 5. Schematic diagrams of heat transfer of nanoparticles in different states.

通过对颗粒运动轨迹的观测 (图 2) 发现, 在本研究条件下仅观察到悬浮颗粒向沉积态的转变, 并未出现沉积颗粒在沸腾过程中再悬浮的现象. 此外, 纳米颗粒在沸腾过程中的状态会受到初始高度 h 的影响, 且存在临界高度 $h_c = 1.0 \text{ nm}$. 纳米颗粒是否沉积取决于颗粒-壁面相互作用力与流体

热扰动力的竞争关系. 当 $h > h_c$ 时, 颗粒初始位置超出吸引势阱作用边界, 相互作用势能可忽略, 颗粒运动主要由流体黏性阻尼与热涨落支配, 从而长期保持悬浮状态. 当颗粒初始高度 $h < h_c$ 时, 颗粒进入壁面强吸引作用范围; 尽管加热导致溶剂温度升高并增强热扰动, 仍不足以克服颗粒与壁面间的吸引势阱, 最终颗粒稳定沉积于壁面. 一旦沉积形成, 颗粒与壁面之间建立更为稳定的固-固接触, 其作用强度显著超过溶剂热扰动的影响, 从而使沉积态表现出较高稳定性. 因此在常规沸腾条件下, 已沉积的纳米颗粒不会发生再悬浮, 这与已有文献的结论一致 [34-38]. 需指出, 若在极端加热或外加强烈扰动条件下, 例如施加极高的热通量、极强热扰动或外部场作用时, 沉积颗粒可能获得足够能量以克服颗粒-壁面相互作用, 从而发生再悬浮, 此类情形涉及及显著的非平衡效应与多物理场耦合机制.

初始高度这一参数反映了实际环境中颗粒相对于加热壁面的初始空间分布. 在真实实验中, 纳米颗粒最初均匀分散于溶剂中并处于悬浮状态. 随着沸腾传热过程的进行, 颗粒在热运动与流体流动的共同作用下不断迁移. 部分悬浮颗粒逐渐接近加热壁面, 当与壁面的距离低于临界值时, 便进入强吸引作用区并发生沉积. 本文通过调控纳米颗粒的初始高度, 揭示了颗粒进入强吸引作用并最终沉积的临界条件, 为解释宏观实验中颗粒逐渐沉积并影响沸腾换热性能的现象提供了微观物理图像.

3.3 无量纲分析

临界热流密度 (CHF) 是表征沸腾传热性能的关键参数, 在纳米尺度下, CHF 代表沸腾过程中系统所能达到的最大热流密度. 本研究发现, 纳米颗粒的状态直接影响 CHF. 与此同时, 表征沸腾触发快慢的气泡成核时间是另一关键参数, 其值同样受到纳米颗粒初始高度的显著影响. 为提升数据可靠性, 所有工况均进行了三次独立并行模拟, 并对结果取平均值和标准差. 为深入揭示初始高度影响沸腾换热的内在规律, 本研究进一步引入了基于分子特征尺度的无量纲分析方法. 该方法以氧原子间 Lennard-Jones 势的特征尺寸参数 σ , 能量参数 ε , 原子质量 m_o 及由此导出的特征时间 $\tau = \sigma(m_o/\varepsilon)^{0.5}$ 为基准, 定义了如表 2 所列无量纲高度 h^* 、热流密度 q_{CHF}^* 与气泡成核时间 t^* [39], 同时得到了无量纲临界高度 $h_c^* = 3.2$. 通过对无量纲模拟数据的拟合

分析, 建立了 h^* 与 q_{CHF}^* , t^* 之间的定量关系, 如图 6 以及 (5) 式、(6) 式所示.

表 2 无量纲参数
Table 2. Non-dimensional parameters.

特征量	参数
高度	$h^* = h/\sigma$
热流密度	$q_{CHF}^* = q_{CHF} \cdot \tau \sigma^2 / \varepsilon$
气泡成核时间	$t^* = t/\tau$

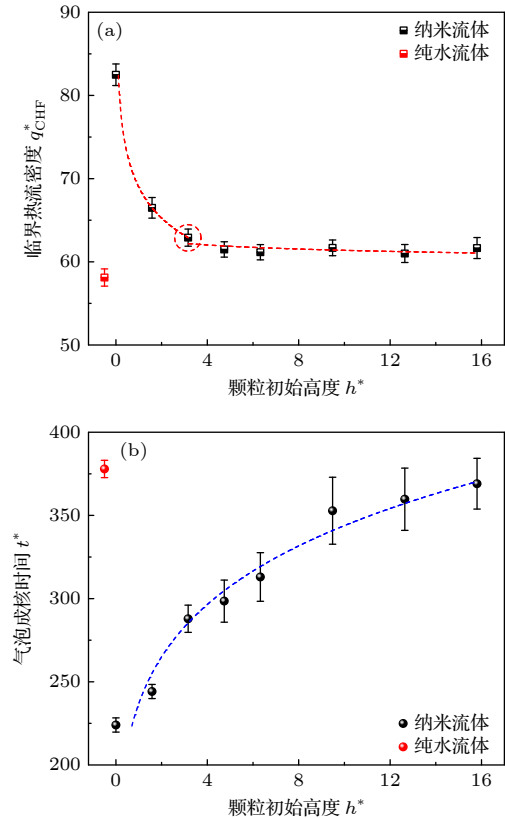


图 6 无量纲初始高度与 (a) 临界热流密度和 (b) 气泡成核时间的关系

Fig. 6. Relationship between the non-dimensional initial height and (a) the critical heat flux and (b) the bubble nucleation time.

当 $h^* < h_c^*$ 时, 即颗粒最终沉积的情况, q_{CHF}^* 与 h^* 呈负幂函数关系, 指数为 -0.08 . 尽管指数绝对值较小, 但在接近壁面的低高度区间内, h^* 的微小变化会引起 q^* 的明显改变. 例如, h^* 从 0.1 增至 3.0 时, q_{CHF}^* 相应地从 83 降至 63, 相对降幅达 24.1%, 表明该区域内初始高度对临界热流密度的影响显著. 反之, 当 $h^* > h_c^*$ 时, 即颗粒保持悬浮状态的情况, 关系曲线的指数锐减至 -0.01 . 在此区间, 由于指数极小而 h^* 值较大, 高度变化对 q_{CHF}^* 的影响趋于微弱. 如 h^* 从 4 增至 15 时, q^* 仅从 62.1 微降至

61.3, 相对变化不足 1.2%, 其影响可忽略不计. 可见, 若颗粒初始位置低于临界高度, 初始高度对临界热流密度的影响较为明显, 而颗粒初始位置高于临界高度, 悬浮颗粒作为间接热源的效果对距离不再敏感. 同时, 纳米流体的临界热流密度在所有情况下均高于纯水流体.

$$q_{\text{CHF}}^* = \begin{cases} 69.0 \cdot h^{*-0.08}, & 0 < h^* < 3.2, \\ 63.0 \cdot h^{*-0.01}, & h^* > 3.2. \end{cases} \quad (5)$$

与临界热流密度相反, t^* 和 h^* 之间呈现正幂函数关系, 该指数 0.18 表明 t^* 随 h^* 增加呈亚线性增长, 其影响敏感性随高度增加而逐渐减弱. 在低于临界高度区间, 高度变化对成核时间 t^* 的影响较为显著; 而当高于临界高度后, 继续增加高度对成核时间的作用逐渐减弱. 此外, 相较于纳米流体, 纯水流体的成核时间相对较晚.

$$t^* = 236.9 \cdot h^{*0.18}, \quad h^* > 0. \quad (6)$$

4 结 论

本文采用分子动力学模拟, 通过设置不同初始高度的纳米颗粒, 研究了颗粒状态在沸腾过程中的转变规律, 并分析了悬浮态和沉积态纳米颗粒对沸腾传热的影响. 主要结论如下.

1) 不同状态的纳米颗粒在传热机制上存在显著的差异. 沉积态颗粒凭借其于加热壁面间高效的固-固热传导, 表现出最为显著的强化作用; 而悬浮态颗粒主要通过热辐射与近场热传导从壁面获取能量, 作为间接热源促进流体传热, 但其效果不及沉积态颗粒, 两种状态的纳米颗粒对沸腾传热的强化效果均优于纯水体系. 当颗粒沉积时, 临界热流密度最大为 $3.74 \times 10^{-4} \text{ eV}/(\text{\AA}^2 \cdot \text{ps})$, 相比悬浮颗粒的 $2.79 \times 10^{-4} \text{ eV}/(\text{\AA}^2 \cdot \text{ps})$ 提升了约 32.1%. 同时, 沉积态颗粒的最早气泡成核时间为 344 ps, 较悬浮颗粒的 568 ps 缩短了约 39.4%.

2) 纳米颗粒是否沉积取决于颗粒-壁面相互作用力与流体热扰动力的竞争关系, 其状态会在沸腾过程中受到初始高度 h 的影响, 且存在一个临界高度 $h_c = 1.0 \text{ nm}$. 当颗粒初始高度低于该临界值时, 颗粒将从悬浮状态逐渐沉积于加热壁面; 而若初始高度超过该临界值, 颗粒则始终保持悬浮状态. 此外, 在本研究条件下, 仅观察到悬浮颗粒向沉积态的转变, 未发现沉积颗粒发生再悬浮的现象.

3) 基于分子特征尺度的无量纲分析方法, 建立了纳米颗粒初始高度与临界热流密度及气泡成核时间的定量关系: $q_{\text{CHF}}^* = 69.0 \cdot h^{*-0.08}$, $0 < h^* < 3.2$; $q_{\text{CHF}}^* = 63.0 \cdot h^{*-0.01}$, $h^* > 3.2$; $t^* = 36.9 \cdot h^{*0.18}$, $h^* > 0$. 临界热流密度随初始高度的增加呈衰减趋势, 而气泡成核时间则随高度增加而上升. 分析表明, 纳米颗粒高度对临界热流密度和气泡成核时间的影响在临界高度以下较为显著, 在临界高度以上则趋于平缓.

本文观察到的纳米颗粒在沸腾过程中的状态转变及其临界高度, 或可归因于纳米尺度“界面邻近效应”在相变传热体系中的具体表现. 临界高度的具体数值由颗粒表面化学性质、材料本征属性及流体物性等多参数耦合决定, 这反映了界面相互作用能与流体热扰动的动态竞争. 后续研究需通过系统的参数化研究与无量纲分析, 定量解耦各物理因素对临界条件的影响机制, 从而建立基于能量平衡的普适化预测模型. 此外, 这一基于临界距离的物理机制可拓展至液滴润湿铺展、撞击反弹及蒸发等动态界面过程的研究中, 以探索其中是否存在类似的界面临界效应. 该研究框架的建立不仅能够深化对沸腾传热中颗粒沉积微观机理的理解, 还可为纳米颗粒在能源催化、界面传质及微流控等领域的定向调控提供理论依据.

参考文献

- [1] Hetsroni G, Mosyak A, Pogrebnyak E, Segal Z 2005 *Int. J. Multiphase Flow* **31** 371
- [2] Malli A, Seyf H R, Layeghi M, Sharifian S, Behraves H 2011 *Energy Convers Manage.* **52** 2598
- [3] Su D D, Li X B, Zhang H N, Li F C 2024 *Int. J. Heat Mass Transfer* **220** 124962
- [4] Fang X D, Chen Y F, Zhang H L, Chen W W, Dong A Q, Wang R 2016 *Renewable Sustainable Energy Rev.* **62** 924
- [5] Modi M, Kangude P, Srivastava A 2020 *Int. J. Heat Mass Transfer* **146** 118833
- [6] Vafaei S, Purkayastha A, Jain A 2009 *Nanotechnology* **20** 185702
- [7] Yin X Y, Hu C Z, Bai M L, Lü J Z 2018 *Numer Heat Transfer, Part B* **73** 94
- [8] Wang Z, Tian Z F 2024 *Int. J. Heat Mass Transfer* **231** 125893
- [9] Yin X Y, Hu C Z, Bai M L, Lü J Z 2020 *Int. J. Heat Mass Transfer* **162** 120338
- [10] Yin X Y, Bai M L, Hu C Z, Lü J Z, Gao D D, Wang P 2018 *J. Eng. Thermophys* **39** 1112 (in Chinese) [尹训彦, 白敏丽, 胡成志, 吕继组, 高栋栋, 王鹏 2018 *工程热物理学报* **39** 1112]
- [11] Thompson A P, Aktulga H M, Berger R, Bolintineanu D S, Brown W M, Crozier P S, in 't Veld P J, Kohlmeyer A, Moore S G, Nguyen T D, Shan R, Stevens M J, Tranchida J,

- Trott C, Plimpton S J 2022 *Comput. Phys. Commun.* **271** 108171
- [12] Stukowski A 2009 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [13] Bai P, Wang D J, Liu Y F 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 090201 (in Chinese) [白璞, 王登甲, 刘艳峰 2024 物理学报 **73** 090201]
- [14] Lin T, Quan X J, Cheng P, Li J J, Chen G 2020 *Int. J. Heat Mass Transfer* **163** 120412
- [15] Dawar A, Bossly R, Alduais F S, Al-Bossly A, Younis J, Saeed A 2024 *Heliyon* **10** e39432
- [16] Khalid A, Khan I, Shafie S 2016 *J. Mol. Liq.* **221** 1175
- [17] Yahyaee A 2024 *Int. J. Thermofluids* **22** 100631
- [18] Chen L, Wang S Y, Xiang X, Tao W Q 2020 *Comput. Mater. Sci.* **171** 109223
- [19] Liu R K, Liu Z Y 2019 *Int. J. Heat Mass Transfer.* **143** 118534
- [20] Wang B B, Wang X D, Wang T H, Lu G, Yan W M 2017 *Int. J. Heat Mass Transfer* **109** 410
- [21] Seyf H R, Zhang Y W 2013 *Int. J. Heat Mass Transfer* **66** 613
- [22] Gong L Y, Wei X D, Han T, Guo Y L, Shen S Q 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 143101 (in Chinese) [龚路远, 魏鑫鼎, 韩韬, 郭亚丽, 沈胜强 2025 物理学报 **74** 143101]
- [23] Yu M, Li B H, Meng X W, Wu L F, Ma L X, Tang Y Z 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 204701 (in Chinese) [余绵, 李丙衡, 孟祥文, 吴连锋, 马连湘, 唐元政 2025 物理学报 **74** 204701]
- [24] Narayan G P, Anoop K B, Das S K 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 074317
- [25] Li K R, Wang J, Xia G D 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 194701 (in Chinese) [李康睿, 王军, 夏国栋 2025 物理学报 **74** 194701]
- [26] Soltani S, Etemad S Gh, Thibault J 2010 *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **37** 29
- [27] Du J Q, Wang Y, Yang W, Wang J, Cao Z, Sundén B 2024 *Int. J. Heat Mass Transfer* **221** 125080
- [28] Yang H C, Xu M D, Xing Y W, Gui X H, Cao Y J 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 024702 (in Chinese) [杨海昌, 徐梦迪, 邢耀文, 桂夏辉, 曹亦俊 2025 物理学报 **74** 024702]
- [29] Cai S Y, Li Q B, Li W J, Zhang L, Liu X Y 2020 *J. Mol. Liq.* **319** 114189
- [30] Guo Y Y, Adessi C, Cobian M, Merabia S 2022 *Phys. Rev. B* **106** 085403
- [31] Wang S, Xu J L, Zhang L Y 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 204704 (in Chinese) [王胜, 徐进良, 张龙艳 2017 物理学报 **66** 204704]
- [32] Jeong J, Wang Y G 2023 *Addit. Manuf. Lett.* **4** 100114
- [33] Hong S N, Yu C J, Ri K C, Han J M, Ri B H 2021 *Int. J. Therm. Sci.* **159** 106537
- [34] Chen H Z, Zhai Y L, Bai Y R, Chen H F, Li Z H 2025 *Int. J. Therm. Sci.* **218** 110151
- [35] Yin X Y, Hu C Z, Bai M L, Lv J Z 2019 *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **109** 104390
- [36] Chen Y Y, Fu R, Yan Y Y 2022 *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **137** 106298
- [37] Ma X, Song Y D, Wang Y, Zhang Y N, Xu J Y, Yao S G, Vafai K 2022 *Powder Technol.* **396** 92
- [38] Xu L, Xu J L 2012 *Int. J. Heat Mass Transfer* **55** 5673
- [39] Zhang L Y, Xu J L, Lei J P 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 234702 (in Chinese) [张龙艳, 徐进良, 雷俊鹏 2018 物理学报 **67** 234702]

How the state transition of nanoparticles affects boiling heat transfer: A molecular dynamics study*

BAI Pu^{1)2)†} DU Menghua¹⁾²⁾ WANG Dengjia^{1)2)‡}
 ZHOU Leping³⁾ LIU Yanfeng¹⁾²⁾

1) (State Key Laboratory of Green Building in China, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China)

2) (School of Building Services Science and Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China)

3) (Key Laboratory of Power Station Energy Transfer Conversion and System (North China Electric Power University),

Ministry of Education, Beijing 102206, China)

(Received 31 December 2025; revised manuscript received 18 January 2026)

Abstract

Nanoparticles exist in two states in fluids: suspended and deposited. Their state changes with particle height during boiling, significantly affecting heat transfer performance. This study adopts molecular dynamics simulations to investigate how particle state transforms with initial height, and compares the mechanisms by which deposited and suspended nanoparticles influence boiling heat transfer. Results show that deposited nanoparticles exhibit the most pronounced effect in enhancing boiling heat transfer, due to the efficient solid-

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52508139) and the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 2025M781554).

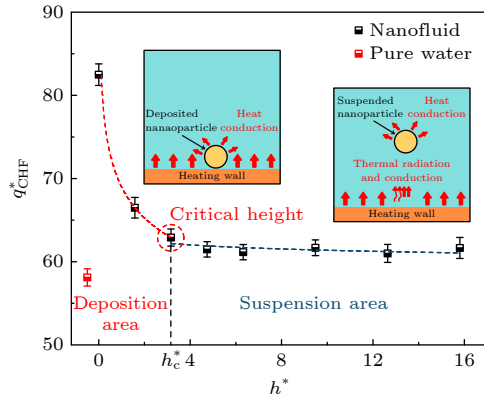
† Corresponding author. E-mail: bp1512905225@163.com

‡ Corresponding author. E-mail: wangdengjia@xauat.edu.cn

solid heat conduction with the heating wall. Suspended nanoparticles mainly acquire energy from the wall via thermal radiation and near-field conduction, acting as an indirect heat source to promote heat transfer to the fluid, though their effect remains weaker than that of deposited particles. Both nanoparticle states enhance boiling heat transfer more effectively than pure water, corresponding to a higher heating rate, a larger critical heat flux, and an earlier bubble nucleation time. When the particles are deposited, the maximum critical heat flux is $3.74 \times 10^{-4} \text{ eV}/(\text{\AA}^2 \cdot \text{ps})$, which is approximately 32.1% higher than that of the suspended particles with $2.79 \times 10^{-4} \text{ eV}/(\text{\AA}^2 \cdot \text{ps})$. Meanwhile, the earliest bubble nucleation time of the deposited particles is 344 ps, which is approximately 39.4% shorter than that of the suspended particles with 568 ps. Whether nanoparticles deposit depends on the competitive relationship between the particle-wall interaction force and the fluid thermal disturbance force. By varying the initial distance between the nanoparticle and the heating wall rather than prescribing the particle state a priori, and thereby analyzing particle trajectories and their impact on heat transfer performance, a critical state-transition height of $h_c = 1.0 \text{ nm}$ is identified: nanoparticles with an initial height below this value eventually deposit on the heating wall, whereas those initially above it remain suspended. Under the conditions of this study, only the transformation of suspended particles to the deposited state is observed, and no re-suspension of deposited particles is found. Furthermore, based on the non-dimensional analysis method at the molecular characteristic scale, a quantitative relationship is established between the initial height of nanoparticles and the critical heat flux as well as the bubble nucleation time: $q_{\text{CHF}}^* = 69.0 \cdot h^{*-0.08}$, $0 < h^* < 3.2$; $q_{\text{CHF}}^* = 63.0 \cdot h^{*-0.01}$, $h^* > 3.2$; $t^* = 236.9 \cdot h^{*0.18}$, $h^* > 0$. It reveals that the critical heat flux shows a decaying trend as the initial height increases, while the bubble nucleation time increases with height. Besides, the particle height influences both parameters markedly below the critical height, whereas its effect diminishes substantially above this threshold. This work elucidates the mechanism through which particle state and the transformation processes influence nanoscale boiling heat transfer, providing a theoretical foundation for enhancing boiling heat transfer.

Keywords: nanoparticles, nanofluids, boiling heat transfer, molecular dynamics

DOI: 10.7498/aps.75.20251797



CSTR: 32037.14.aps.75.20251797



纳米颗粒状态转变影响沸腾传热的分子动力学研究

白璞 杜孟华 王登甲 周乐平 刘艳峰

How the state transition of nanoparticles affects boiling heat transfer: A molecular dynamics study

BAI Pu DU Menghua WANG Dengjia ZHOU Leping LIU Yanfeng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 070303 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251797

CSTR: 32037.14.aps.75.20251797

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251797>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

润湿性影响薄液膜沸腾传热的分子动力学研究

Molecular dynamics study on effect of wettability on boiling heat transfer of thin liquid films

物理学报. 2024, 73(9): 090201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20232026>

表面材质对介电液体气泡成核及沸腾换热的微观影响机理

Microscopic influence mechanism of surface material on nucleation and boiling heat transfer of dielectric liquid bubbles

物理学报. 2025, 74(17): 174402 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250398>

不凝性气体对纳米通道内水分子流动传热影响的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of effect of non-condensable gases on heat transfer of water molecule flow in nanochannels

物理学报. 2024, 73(9): 094701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240192>

锥形Janus颗粒强化纳米流体导热特性的模拟

Simulation study on thermal conductivity of conical Janus particles reinforced nanofluids

物理学报. 2025, 74(19): 194701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250759>

基于羟基化Janus碳纳米管的纳米流体导热特性

Thermal conductivity of nanofluids based on hydroxylated Janus carbon nanotubes

物理学报. 2025, 74(6): 064701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241657>

不同润湿条件下带正弦凸起粗糙表面上气泡成核的分子动力学研究

Molecular dynamics study on bubble nucleation on rough surfaces with sinusoidal protrusions under different wetting conditions

物理学报. 2025, 74(20): 204701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250717>