

基于微观扩散系数传递的电脱湿跨尺度仿真及界面行为预测

黄鹏, 柯泽杰, 周斐强, 赵佳杨, 龙睿, 宋跃

(桂林理工大学机械与控制工程学院广西高校先进制造与自动化技术重点实验室, 桂林 541006)

摘要

电脱湿过程与离子表面活性剂的界面行为紧密关联, 分子动力学难以模拟宏观演化过程, 而电流体力学模型微观精度有限, 为此提出一种跨尺度联合仿真方法。首先, 结合第一性原理计算与深度学习方法, 构建大分子表面活性剂的机器学习势函数, 解决其缺乏经验力场的问题, 实现高精度分子动力学模拟。其次, 基于模拟数据提取的均方位移曲线, 通过斯托克斯-爱因斯坦方法计算微观扩散系数, 可更有效地反映电场作用下活性剂的运动特性。最后, 将该系数替代电流体力学模型中的传统经验参数, 获得更准确的液气界面轮廓变化, 并通过实验验证了该方法的有效性。与传统模型相比, 得到的液滴动态行为在三相接触线附近的误差更小, 与观察结果更加吻合, 电脱湿及再润湿阶段接触角的准确度分别提升约 4.59% 和 3.59%, 两阶段接触角角差的准确度提升约 26.67%。

关键词: 电脱湿, 电流体力学, 分子动力学, 第一性原理

基金: 广西重点研发计划 (批准号: 桂科 FN2600640602) 资助的课题。

1. 引言

电脱湿技术当前是液体透镜与微流控领域的研究热点, 其无需传统介电润湿技术^[1-4]所必需的介电层和疏水涂层, 仅通过控制离子表面活性剂在亲水导电基底上的吸附与脱附, 即可实现液滴的可逆脱湿与再润湿, 避免了驱动电压高、介电层易击穿以及生物污染等问题。Li 等人^[5]提出了基于上述原理的离子表面活性剂介导电脱湿新机制, 在仅需 $\pm 2.5\text{V}$ 的低驱动电压与极低活性剂浓度下, 成功实现液滴的可逆脱湿与再润湿。Zhou 等人^[6]进一步证实了该机制的可靠性, 在无任何附加涂层的亲水导电基底上, 利用 $\pm 3\text{V}$ 的直流电信号即可操纵液滴, 使液滴接触角的正反变化幅度分别达到约 15° 与 -20° 。从物理机制上看, 电脱湿过程是电场驱动微观层面活性剂分

子发生定向迁移并重新排布, 从而导致宏观层面液滴的固液气界面变化。针对这一复杂过程, 多使用微观分子动力学 (Molecular Dynamics, MD) 模拟与宏观电流体力学 (Electrohydrodynamics, EHD) 模型两种方法进行研究。

在微观尺度上, MD 模拟已成为探究多相界面相互作用与动态演化机制的核心工具。例如, Yang 等人^[7]利用 MD 模拟研究了纳米 SiO_2 协同离子表面活性剂 CTAB 对煤的润湿性以及 CH_4 吸附扩散特性的微观影响机制, 说明两者能够通过竞争吸附位点来改变界面相互作用, 以影响润湿性和瓦斯运输。Mina 等人^[8]采用粗粒化分子动力学方法模拟研究了三种烷基三甲基溴化铵 (TAB) 表面活性剂在纯溶液及二元混合体系中的自组装行为, 定量分析了分子内亲疏水基团比例对界面排布的影响, 揭

示了活性剂在诱导分子间协同效应中的关键作用。然而，由于缺乏针对复杂大分子表面活性剂的专用经验力场，现有研究多依赖传统通用力场进行近似模拟，难以准确刻画体系的微观物理化学细节。为突破传统力场的精度局限，机器学习势函数逐渐受到关注。Sajad^[9]等人通过评估多种力场在铁纳米结构力学模拟中的表现指出，基于人工神经网络的机器学习势函数是唯一能有效复现纳米线拉伸“颈缩”等复杂现象的模型，且兼具远超第一性原理的计算效率。针对这一趋势，Liu^[10]等人在复杂电解液体系的研究中提出并验证了一套基于深度势能（Deep Potential, DP）^[11]的闭环工作流程：利用 DeePMD-kit^[12]训练神经网络势函数拟合第一性原理数据，结合 LAMMPS^[13]探索相空间，并通过 CP2K 补充高精度计算标签。该策略构建的高精度 DP 模型，不仅为解析铝离子电池中 Al^{3+} 的微观传输机制提供了可靠工具，也充分证明了机器学习势函数在刻画复杂分子结构及缓慢扩散体系中的潜力。同时，结合第一性原理软件 ABACUS^[14]的 DP-GEN(Deep Potential Generator)循环工作流^[15]，已能够实现复杂体系构型空间的自动化探索，进一步拓宽了该方法的适用性。基于上述进展，针对复杂离子表面活性剂体系构建专属机器学习势函数具备充分可行性。依托该势函数可以对电场作用下液滴内部微观分子的迁移与运输进行高精度分子动力学仿真，从而获取真实的微观动力学参数。然而，结合机器学习势函数的 MD 方法虽具有原子级精度，但其计算成本会随空间与时间尺度的增加呈指数级上升，导致模拟局限于微观单一尺度。在现有算法与硬件条件限制下，难以实现针对液体透镜、微流控等领域涉及毫米和秒量级尺度如此大规模、长时间的宏观流体动态演化模拟。

在宏观尺度上，现有研究主要使用 EHD 对固液气界面的演化过程进行数值求

解。例如，Medina 等人^[16]在等几何分析框架下探讨了离子表面活性剂在薄液膜上的扩散，通过构建四阶耦合偏微分方程来描述液膜厚度与活性剂浓度的变化，对方程数值求解后揭示了基底粗糙度会引发马兰戈尼指状不稳定性的现象。Gao 等人^[17]基于 Onsager 原理和 Rayleigh 耗散函数，通过推导表面张力与活性剂浓度耦合的动力学控制方程，探讨了含有不溶性活性剂的液滴在纹理基底上的铺展过程。此外，Chu 等人^[18]使用 EHD 描述了含低浓度活性剂的液滴在外电场作用下的动态演化规律，即调控电场能驱动活性剂向特定区域富集或远离，从而实现液滴的脱湿与再润湿。然而，上述研究仅局限于宏观单一尺度。尽管 EHD 模型能胜任大规模、长时间的仿真需求，但其本质上采用了宏观近似处理，忽略了底层真实的分子运动机制。对于电脱湿过程中三相接触线及局部微观界面的动态行为，模型中的关键物理参数只能通过传统经验公式或实验数据进行拟合，仿真精度有限。

为突破单一尺度模拟的固有局限，充分发挥微观与宏观方法各自的优势，提出一种结合 MD 和 EHD 的跨尺度联合仿真方法。首先，结合第一性原理和深度学习方法构建体系的专属高精度 DP 模型，解决其缺乏经验力场的问题。其次，基于该 DP 模型进行高精度 MD 模拟，获得能够真实反映电场作用下活性剂运动特性的微观扩散系数。最后，将该系数替代 EHD 模型中的传统经验参数，获得更准确的液气界面轮廓变化，并通过实验验证该方法的有效性。

2. 电脱湿过程跨尺度联合仿真

2.1 电脱湿现象及跨尺度建模

电脱湿现象的发生高度依赖于离子表面活性剂。这类活性剂通常具有两亲特性，

由带电的亲水头基与电中性的疏水尾链组成。与传统介电润湿不同，电脱湿并非由电场直接驱动，而是通过电场调控活性剂分子的空间排布与界面吸附行为，诱发局部表面张力改变，间接实现液滴的宏观形变^[5]。由此，对电脱湿过程构建图 1 所示的跨尺度物理模型。

如图 1 (a) 所示的非对称宏观连续介质体系由顶部针状电极与底部亲水导电平面基底组成。施加电压后，液滴内部形成由针尖向基底呈放射状发散的非均匀梯度电场。模型以针尖正下方的基底表面为原点建立二维坐标系，并通过接触角 θ 表征液

滴宏观形态的动态演化。针对微观区域，由于 MD 模拟的空间尺度局限于纳米量级，选取液滴内部的微小局部区域作为微观计算单元，如图 1 (b) 所示。在该极小空间范围内，宏观的非均匀发散电场可被合理近似为局部均匀电场，从而模拟活性剂在电场作用下的微观迁移与扩散特性。此外，图 1 (c) 所示的介观区域放大了三相接触线附近的演化细节，明确了宏观偏微分方程需要耦合求解的两个核心瞬态变量：液膜厚度 h 与活性剂浓度 Γ 。基于上述物理空间划分，以实现液气界面动态形变的联合求解。

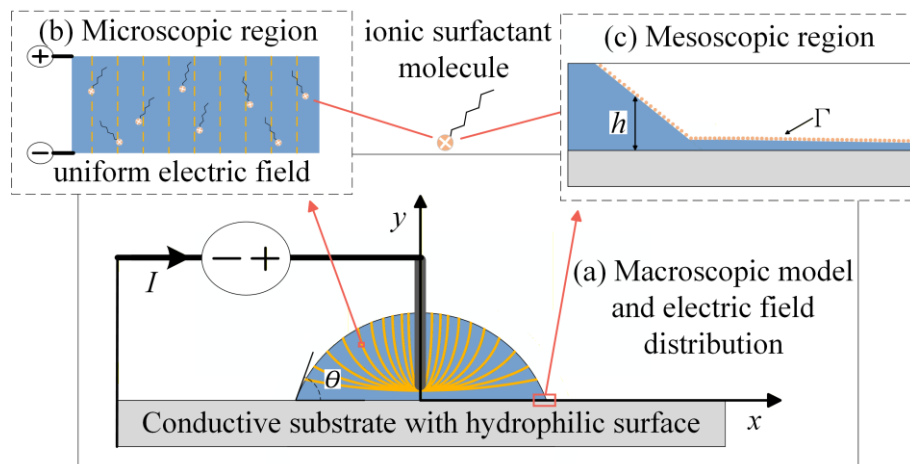


图 1 电脱湿过程建模 (a) 宏观模型和电场分布；(b) 微观区域；(c) 介观区域

Fig.1. Modeling of the electro-dewetting process: (a) Macroscopic model and electric field distribution; (b) Microscopic region; (c) MD Mesoscopic region.

2.2 跨尺度仿真流程

MD 微观模拟的时空尺度通常处于纳米与飞秒量级，EHD 宏观模型则对应毫米与秒量级。为解决 MD 模拟尺度受限以及 EHD 模型精度不足的问题，构建了一种将 MD 与 EHD 相结合的跨尺度联合仿真策略。MD 模拟能获取丰富的微观参数，如均方位移 (MSD)、径向分布函数 (RDF)、吸附能 (E_{ads})、界面张力 (γ) 与粘度 (η) 等，将这些微观物理量进行跨尺度映射可有效替代 EHD 模型中基于经验假设或宏观

拟合的参数。在电脱湿现象中，流体界面的动态形变高度依赖于活性剂浓度梯度所诱发的马兰戈尼效应。扩散系数作为主导该浓度场演化的核心物理量，包含了活性剂分子构型、界面溶剂化效应及静电相互作用，直接体现了微观分子在复杂流体界面的真实迁移能力，基于第一性原理从 MD 模拟中获取高精度微观扩散系数，将其带入到宏观 EHD 模型中，能够在一定程度上体现电脱湿现象的微观机制，并提升模型准确性。

跨尺度仿真流程如图2所示。在微观模拟阶段，首先建立初始构型，通过第一性原理计算获取精确数据集，并以此训练出可靠的机器学习势函数。然后，基于此势函数进行 MD 模拟，从而获得体系的原子运动轨迹，同时计算得到活性剂的微观扩散系数。在宏观模拟阶段，首先将微观扩散系数跨尺度传递至宏观物理模型中。接着，结合连续介质流体力学与电化学控制方程，推导出描述液膜厚度与活性剂浓度演化的 EHD 模型，最终求解出液滴的液气界面轮廓变化。

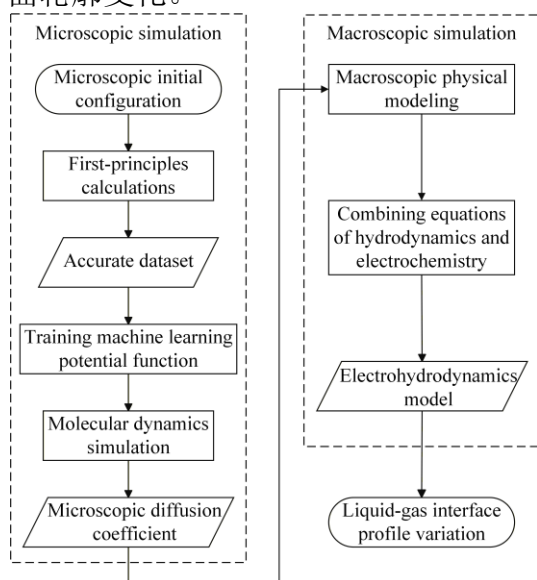


图 2 跨尺度仿真流程

Fig.2. Cross-scale simulation process.

MD 和 EHD 的跨尺度联合仿真方法，在保持原子级精度的同时，有效拓展了模拟的时空尺度，兼顾了大体系和高精度的优势。

3. 基于机器学习势的微观 MD 模拟

3.1 第一性原理计算与数据集构建

丁基三甲基氯化铵（butyltrimethylammonium chloride, BTMAC）是一种典型的短链阳离子表面活性剂，虽然碳链较短，

但仍具备完整的带电亲水头基和疏水烷基链结构。鉴于其两亲特性与 DTAB、CTAB 等常见长链阳离子表面活性剂高度相似，选用 BTMAC 水溶液体系作为基础模型。由于 BTMAC 在水相中会完全解离，实际模拟的溶液体系由 $C_7H_{18}N^+$ 阳离子、 Cl^- 阴离子及 H_2O 分子共同构成。在初始构型的搭建阶段，使用 Materials Studio 软件构建晶格常数为 $13\text{\AA}$ 的胞元。如图 3 所示，包含 1 对 BTMAC 离子（1 个 $C_7H_{18}N^+$ 和 1 个 Cl^- ）和 64 个水分子的微观体系被专用于机器学习势函数训练，同时扩展构建了大体系模型用于后续 MD 研究。

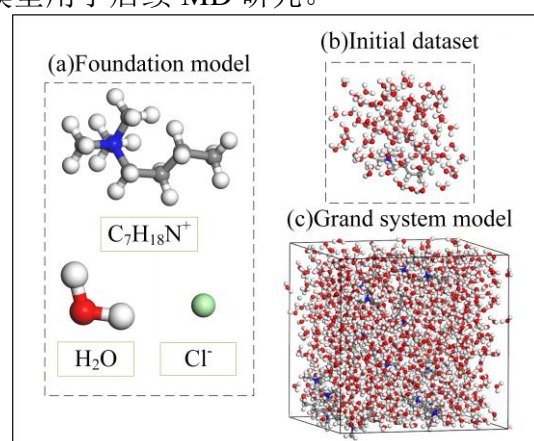


图 3 BTMAC 溶液体系分子结构模型 (a) 阴阳离子与分子结构模型；(b) 初始训练集模型；(c) 后续性质计算采用的 MD 模型

Fig.3. Molecular structure model of BTMAC solution system: (a) Cations, anions, and molecular structure models; (b) Initial training set model; (c) MD model for subsequent property calculations.

初始原子构型仅具备位置和晶胞参数等几何信息，缺乏真实的电子分布，因此使用 ABACUS 执行自洽场（Self-Consistent Field, SCF）计算，通过不断迭代哈密顿量、波函数与电荷密度，直至能量与密度收敛，确立体系的基态电子结构。之后进行基于密度泛函理论（Density Functional Theory, DFT）的第一性原理分子动力学（Ab Initio Molecular Dynamics, AIMD）模拟。计算中使用 PBE 泛函描述电子交换关联能，并引入带有 BJ 阻尼的 DFT-D3 泛

函数进行范德瓦耳斯力校正，底层计算则采用原子轨道基组和模守恒赝势。布里渊区采样仅取中心 Γ 点（ $1\times1\times1$ 网格），平面波截断能设为120Ry，以此进行5000步AIMD模拟。为了降低时间序列上采样构型的相关性，模拟中每10步提取一帧包含能量与原子受力信息的构型，最终进行汇总构成后续模型训练的初始数据集。

3.2 深度势能函数模型训练

DP-GEN 工作流如图4所示，由训练、探索与标记三个阶段构成一个主动学习闭环。

（1）训练阶段：将初始数据集带入工作流，DeePMD-kit 引擎会进行模型训练。描述符采用 `se_e3`，邻近原子截断半径设定为 $6.4\text{\AA}$ ，神经网络的嵌入层和拟合层规模分别设置为[25,50,100]和[240,240,240]。对于训练过程中的损失函数，力的权重从1000逐渐衰减至1，能量的权重从0.02逐渐升至1。同时，使用同一数据集并赋予不同的随机种子并行训练出四个独立的DP模型。

（2）探索阶段：在得到初步DP模型后，采用LAMMPS进行相空间探索。针对常温常压下的电脱湿界面演化，目标物理温度设定为300K，基准压力为1bar。为了获取更宽广的势能面数据并提升DP模型的鲁棒性，温度采样区间拓宽至280K到360K，压力采样区间设定为1至3bar，以此获取大量候选原子构型。

（3）标记阶段：以四个并行DP模型对同一样本的最大力预测偏差为基准，构建 $0.08\text{eV/\AA}$ 到 $0.18\text{eV/\AA}$ 的力偏差上下限。低于下限的构型被视为已准确掌握，高于上限的则因偏离过大进行舍弃，落入区间内的视为候选构型，提交给ABACUS程序进行高精度SCF计算，重新赋予其精确的能量、受力及维里张量标签。

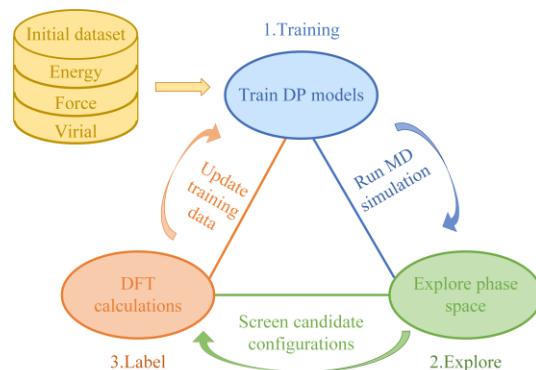


图4 DP模型训练流程

Fig.4. DP model training workflow.

重获精确标签的数据会被加入初始数据集中，开启新一轮的训练。这种迭代训练会持续进行，直至探索阶段产生的新构型绝大多数都能被当前模型准确预测，即可认为该模型已实现了对预设相空间的有效覆盖，主动学习循环终止，最终输出高精度的DP模型。

3.3 分子动力学模拟

将训练得到的DP模型导入LAMMPS软件，对大规模溶液体系进行MD模拟。初始构象建立在尺寸 $31.91\times31.91\times31.91\text{\AA}^3$ 的三维周期性盒子中，体系包含15个 $\text{C}_7\text{H}_{18}\text{N}^+$ 阳离子、15个 Cl^- 阴离子及960个 H_2O 分子。生产模拟在NVT系综下进行，通过Nosé-Hoover热浴将体系温度恒定在300K。考虑到MD模拟的空间尺度局限于纳米量级，将该微观区域内的局部电场合理近似为均匀电场，如图1所示。基于此近似，模拟重点选取液滴中心的体相区域，施加4V电势差的均匀场以驱动离子迁移。模拟积分时间步长设定为0.01fs，体系总演化时间为10ps，以此为基础深入考察BTMAC阳离子的扩散特征及相关动力学参数。

3.4 DP模型验证

为评估所训练的 DP 模型精度,不仅计算了模型在能量与原子受力预测上的均方根误差 (Root Mean Square Error, RMSE), 还进一步分析了代表性原子的 *RDF*。旨在从计算偏差和微观几何结构两个角度, 验证该势函数在对 BTMAC 溶液体系进行 MD 模拟时的准确性与稳定性。

3.4.1 能量与受力预测的 RMSE 分析

在 AIMD 模拟结束后, 统一提取轨迹文件中的原子位置、受力和能量数据。将

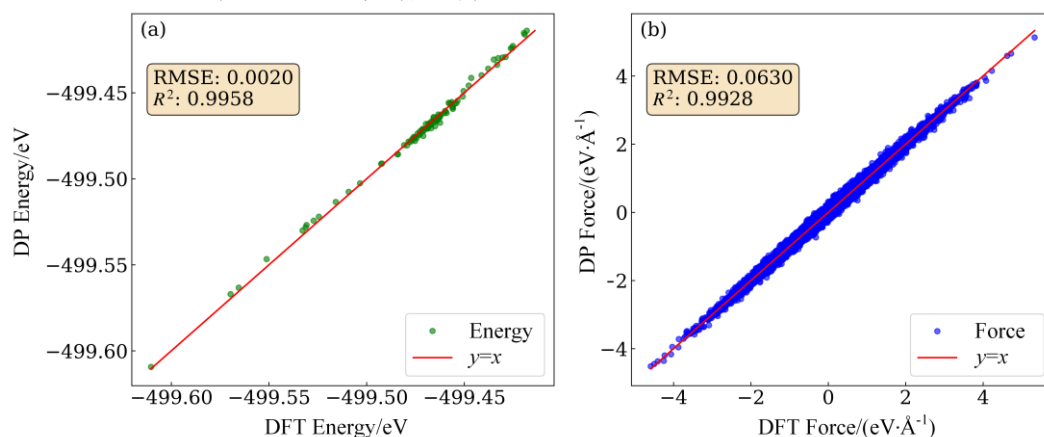


图 5 势函数能量与受力的 RMSE 测试结果 (a) DP 与 DFT 能量对比 (b) DP 与 DFT 力对比
Fig.5. RMSE test results of potential energy and force: (a) Comparison of DP and DFT energies; (b) Comparison of DP and DFT forces.

3.4.2 *RDF* 分析

为验证外加电场条件下力场参数的准确性以及所构建拓扑结构的合理性, 提取体系稳定后, BTMAC 阳离子内部核心原子对 (N-C、C-H、N-H) 的 *RDF*, 如图 6 所示。图中 C-H (1.1Å) 和 N-C (1.5Å) 均呈现出极窄的第一特征峰。这种尖锐的峰型符合典型单键的键长规律, 表明在外加电场的持续作用下, 离子内部的强共价键依然保持了良好的结构稳定性。N-H 曲线在 1.0~1.1Å 区间内未出现任何配位峰, 符合该活性剂的季铵盐阳离子特性, 即中心氮原子被四个碳原子完全包围, 不存在直接

提取的数据按帧随机划分为两部分: 80% 作为训练集用于训练 DP 模型, 剩余 20% 作为验证集用于检验模型对未见构型的预测效果。

能量与受力的误差图如图 5 所示, DP 预测值与 DFT 计算结果吻合较好, 其能量和受力的 RMSE 分别为 0.0020eV/atom 和 0.0630eV/Å, 决定系数 (R^2) 分别为 0.9958 和 0.9928, 表明 DP 模型具有很高的预测精度。

相连的 N-H 共价键。同时, N-H (2.1Å) 出现了第一特征峰, N-C (2.6Å) 出现了次级峰, 这些次近邻距离特征与 sp^3 杂化规律 (109.5°) 吻合, 展现了亲水头基在复杂液态环境下的空间刚性。在 $r>3.0\text{Å}$ 的长程区域, 各原子对的分布峰出现明显的宽化与衰减, 归因于烷基链内部 C-C 单键的自由旋转, 体现了疏水尾链在长程尺度上的柔顺特性。

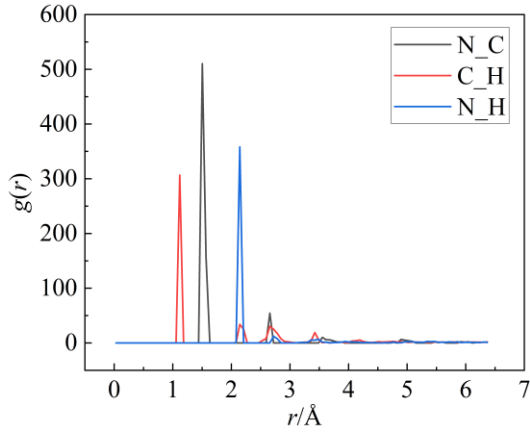


图 6 BTMAC 中原子间的 RDF 对比

Fig.6. Comparison of RDF between atoms in BTMAC.

总体而言，从短程键长到次近邻几何构型，体系展示的拓扑特征与理论预期基本一致^[19-20]，排除了外加电场导致 BTMAC 阳离子发生结构解离或非物理畸变的可能，进一步证明了 DP 模型的稳定性。

3.5 电场驱动的微观运输分析

为深入探讨 BTMAC 阳离子在外加电场下的运输性质，本节计算并提取了恒定均匀电场下其核心原子氢（H）、碳（C）、氮（N）的 MSD，如图 7 所示。

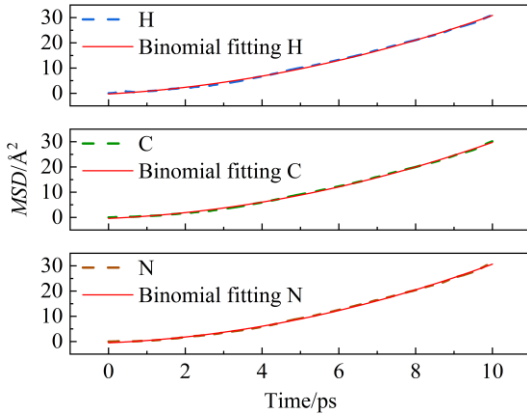


图 7 BTMAC 中各原子的 MSD 对比

Fig.7. Comparison of MSD between atoms in BTMAC.

扩散系数可通过 MSD 和斯托克斯-爱因斯坦方法求解^[21]：

$$MSD(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle |r_i(t) - r_i(0)|^2 \rangle \quad (1)$$

$$D_s = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6t} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle |r_i(t) - r_i(0)|^2 \rangle \right) = \frac{1}{6} K_{MSD} \quad (2)$$

其中 $MSD(t)$ 为均方位移， $r_i(t)$ 为第 i 个粒子在时刻 t 的位置矢量， $r_i(0)$ 为第 i 个粒子在初始时刻的位置矢量， D_s 为扩散系数， K_{MSD} 为均方位移随时间的变化率。

同时经典菲克定律^[22]指出，处于纯粹热运动状态下的平衡态离子，其 MSD 应随时间呈线性变化。然而，从图中观察到，在 10ps 的模拟时间内，核心原子 H、C、N 的 MSD 曲线彻底偏离了线性扩散机制，表现为显著向上弯曲的抛物线特征。产生这种现象的原因在于，持续的外加电场迫使阳离子克服了极性水分子的粘滞阻尼与随机碰撞。此时，其运动模式已由无序的布朗扩散转变为明显的宏观电泳迁移。在此阶段，体系的 MSD 不仅包含随机扩散贡献，还叠加了定向漂移项，其满足扩展的三维漂移-扩散模型^[23]：

$$MSD(t) \approx 6D_s t + v_d^2 t^2 \quad (3)$$

随着模拟时间的推移，由电场驱动的 t^2 项迅速占据主导地位，从而导致了图中明显的抛物线形态。

通过横向对比可以发现，无论是中心的 N 原子，还是 C 骨架或外围的 H 原子，它们各自的 MSD 曲线在演化趋势与定量数值上都表现出了高度的同步。这意味着在电场的持续作用下，该阳离子并未发生化学键断裂或结构解体，而是作为一个整体进行协同运输，进一步验证了所建模型在电场下的结构稳定性。

由于外加电场引发了体系的电泳漂移，总均方位移呈现非线性抛物线特征。为反映电场作用下离子的真实扩散行为，本研究引入二次多项式对轨迹数据进行拟合：

$$y = Ax^2 + Bx + C \quad (4)$$

其中对应电场贡献的二次项系数 A 决定了漂移速度 $v_d = \sqrt{A}$ ，通过代表真实扩散的一次项系数 B ，能够计算出有效扩散系数 $D_s = B/6$ 。

为验证二项式拟合的准确性，如图8对拟合结果进行了残差分析：

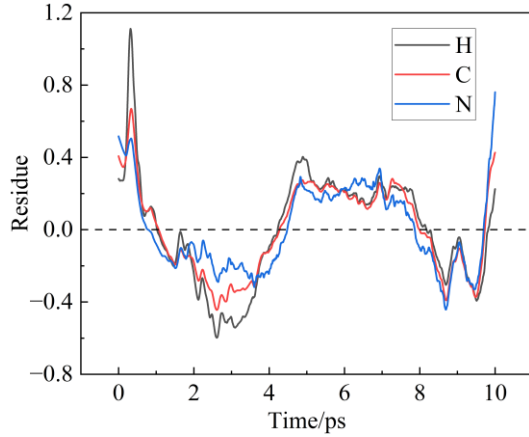


表 1 各原子 MSD 拟合方程参数

Table 1. MSD fitting equations parameters for each atom.

原子	二次项系数 A	一次项系数 B	扩散系数/ $(\text{\AA}^2 \cdot \text{ps}^{-1})$	漂移速度/ $(\text{\AA} \cdot \text{ps}^{-1})$
H	2.24×10^{-5}	0.878	0.146	4.73×10^{-3}
C	2.34×10^{-5}	0.682	0.114	4.84×10^{-3}
N	2.46×10^{-5}	0.661	0.110	4.96×10^{-3}

通过对上述核心原子的动力学参数进行算术平均，可等效反映整个阳离子表面活性剂的运输特性，由此提取出的等效扩散系数为 $0.123 \text{\AA}^2 \cdot \text{ps}^{-1}$ ，相应场强下的等效漂移速度为 $4.84 \times 10^{-3} \text{\AA} \cdot \text{ps}^{-1}$ 。

4. 电场作用下的宏观 EHD 模拟

4.1 宏观物理建模

为研究宏观电脱湿过程，进行物理建模。由于所研究的液滴特征尺度很小，忽略重力的影响，将其理想化为不可压缩的牛顿流体，并综合考量电场力、马兰戈尼

图 8 对原子 MSD 二项式拟合的残差分析
Fig.8. Residual analysis of quadratic fitting of atomic MSD.

结果表明，相较于超过 $30 \text{\AA}^2$ 的总位移量，各原子的拟合偏差仅在 -0.6 到 $1.2 \text{\AA}^2$ 之间轻微震荡，足以排除该拟合的系统性误差。此外，残差曲线潜藏着微小的周期性波动，捕捉到了离子在定向迁移过程中，内部碳链可能发生的局部弛豫或质心震荡。这些局部的微小波动并未干扰整体的电泳规律，表明该拟合不仅能够有效反映体系的漂移与扩散行为，还体现了离子内部的微观细节。

最终计算得出该活性剂中核心原子在通电水相中的扩散系数与漂移速度，如表 1 所示：

效应以及分子间作用力对界面演化的协同驱动。在几何处理上，考虑到基底上的固着液滴在对称电场驱动下呈现均匀的轴对称收缩或铺展行为，径向流动占据主导，因此将复杂的三维液滴演化降维近似为二维模型。该处理在极大降低偏微分方程计算成本的同时，能够有效提取三相接触线的主要形变特征。此外，为消除接触线的物理奇点，借助微观分离压来表征多相界面的相互作用，以此引入极薄前驱液膜假设^[16]，如图 1 所示。

4.2 EHD 控制方程

设 $u = (u, v)$ 分别为平行和垂直于基底的速度分量。不可压缩流体的连续性方程和动量守恒方程为：

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (5)$$

$$\rho_m \left(\frac{\sigma u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla(p - \Pi) + \mu \nabla^2 u \quad (6)$$

其中 ρ_m 为恒定液体密度， μ 是反映流体粘性阻力的动力粘性系数， p 是流体静压力， Π 是分离压。

在液气自由表面 $y = h(x, t)$ 处，需满足运动边界条件：

$$\frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial x} = v \quad (7)$$

同时，由于界面处存在活性剂，其浓度 $\Gamma(x, t)$ 会改变局部表面张力，根据朗缪尔状态方程，表面张力 σ 与活性剂浓度 Γ 的关系为：

$$\sigma = \sigma_0 \left[1 + \beta \ln \left(1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_\infty} \right) \right] \quad (8)$$

其中 σ_0 为无活性剂时的基础表面张力， β 为表面弹性数， Γ_∞ 为活性剂最大堆积浓度。

利用能斯特-普朗克方程描述液气界面上不可溶活性剂在流体对流、扩散以及局部电场力驱动下的动态演化：

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla_s \cdot (\Gamma u_s) = D_s \nabla_s^2 \Gamma - D_e \nabla_s (\Gamma E_s) \quad (9)$$

其中 ∇_s 为作用于界面切向方向的表面梯度算子， u_s 为沿表面的切向速度场， D_s 为液气表面的扩散系数， E_s 为电场切向分量， D_e 为电迁移系数。

将上述方程进行无量纲化，并引入润滑理论，定义流体域在流动方向上的特征长度远大于在液膜厚度方向上的特征高度。在低雷诺数极限，即粘性力远大于惯性力的情况下，忽略惯性项与高阶微小量，流体域内的水平动量方程可简化为：

$$u_{yy} = (p - \Pi)_x \quad (10)$$

在自由表面 $y = h(x, t)$ 处，法向应力由表面张力引发的拉普拉斯附加压强平衡，切向应力由活性剂浓度梯度诱发的马兰戈尼应力平衡。结合朗缪尔方程，可得界面处的压力和切向速度梯度：

$$p = -\Pi(h, \Gamma) - \sigma_0 h_{xx} \left[1 + \beta \ln \left(1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_\infty} \right) \right] \quad (11)$$

$$u_y = -\sigma_0 \beta \frac{\Gamma_x}{\Gamma_\infty - \Gamma} \quad (12)$$

结合基底无滑移边界条件（ $y = 0$ 处 $x = 0$ ），对简化的水平动量方程进行两次积分，得到液滴内部抛物线型的水平速度剖面：

$$u(x, y) = (p - \Pi)_x \left(\frac{1}{2} y^2 - hy \right) - \left(\frac{\sigma_0 \beta \Gamma_x}{\Gamma_\infty - \Gamma} \right) y \quad (13)$$

将上述速度场代入自由表面的连续性方程，得到薄膜厚度 $h(x, t)$ 随时间 t 的演化方程为：

$$h_t - \left[\frac{h^3}{3} p_x + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\sigma_0 \beta \Gamma_x}{\Gamma_\infty - \Gamma} \right) \right]_x = 0 \quad (14)$$

同理，活性剂浓度 $\Gamma(x, t)$ 随时间 t 的演化方程为：

$$\begin{aligned} \Gamma_t - \left[\frac{h^2 \Gamma}{2} p_x + h \Gamma \left(\frac{\sigma_0 \beta \Gamma_x}{\Gamma_\infty - \Gamma} \right) \right]_x \\ = \frac{1}{Pe} \Gamma_{xx} - D[\Gamma \varepsilon(x, h, t)]_x \end{aligned} \quad (15)$$

其中， $\tilde{p}_x = (p - \Pi)_x$ 表示总压力梯度； $Pe = L^2 / D_s T$ 表示流体层中对流传输与气体中扩散传输之间的相互作用； $D = \Psi_0 / Pe$ 表示电场诱导扩散系数； $\varepsilon(x, h, t)$ 代表自由表面处的无量纲切向电场强度。

此外，分离压 $\Pi(h, \Gamma)$ 的无量纲表达式为：

$$\Pi(h, \Gamma) = \frac{B}{h_\infty^n} \left[\left(\frac{h_\infty}{h} \right)^n - \left(1 + \frac{\Gamma}{\Gamma_\infty} \right)^k \left(\frac{h_\infty}{h} \right)^m \right] \quad (16)$$

其中 $B = A_H / 6\pi ULH^{n-2}$ ，是 Hamaker 常数 A_H 结合了流体的粘度以及几何特征尺度后，所形成的无量纲分离压系数。

(14) 和 (15) 这两个耦合公式表示了液膜厚度和活性剂浓度之间的潜在关系，为电场和流体力学之间相互作用的复杂现象提供解释。如表 2 所示为 EHD 模型中的关键无量纲参数。

表 2 EHD 模型关键无量纲参数
Table 2. Key dimensionless parameters of the EHD model.

参数名称	符号
基础表面张力系数	σ_0
表面弹性数	β
前驱膜厚度	h_∞
活性剂最大堆积浓度	Γ_∞
分离压系数	B
Peclet 数	Pe
分离压幂指数	n, m, k

基于实际物理边界条件与文献^[24-26]的经验拟合结果，对关键参数进行无量纲化处理与合理取值，具体如下：

$$h_\infty = 0.01, \quad \Gamma_\infty = 10, \quad \sigma_0 = 0.0064, \\ \beta = 0.023, \quad n = 4, \quad m = 3, \quad k = 2, \\ B = 3 \times 10^{-8}.$$

此外扩散系数 D_s 为有量纲的参数，单位为 $\text{\AA} \cdot \text{ps}^{-1}$ ，直接反映了活性剂在体系内部的运输规律，且与 Pe 和 D 密切相关。传统研究通常采用溶质的典型经验扩散系数（约 $10^{-9} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ）进行粗略计算，存在明显的精度局限，因此将 MD 模拟中获得的高精度扩散系数 D_s 对其进行替代。

4.3 模型跨尺度求解与仿真

MD 模拟提供了关键的微观参数，即活性剂的扩散系数 D_s 与其在特定场强下的漂移速度 v_d 。由于宏观液滴内部的电场呈非均匀分布，而 v_d 对局部瞬态电场强度高度

敏感，导致匀强电场下获取的 v_d 难以直接映射到复杂的非均匀宏观流场中。相对而言， D_s 主要受分子间作用力与流体环境主导，不受宏观电场分布的直接干扰。由此选择将高精度扩散系数 D_s 嵌入 EHD 模型中进行跨尺度数值计算。

液膜厚度 h 和活性剂浓度 Γ 的初始条件分别设定为：

$$h(x, 0) = 0.03 + \max \{d_h (1 - (\frac{x}{d_w})^2), 0\} \quad (17)$$

$$\Gamma(x, 0) = \frac{L}{2d_w} (1 - \tanh(200(|x| - d_w))) \quad (18)$$

其中，初始液滴中心高度 $d_h = 0.8$ ，液滴半宽 $d_w = 1.4$ ，计算域半宽 $L = 1.5$ ，空间坐标域为 $-L \leq x \leq L$ 。

自由表面 $h(x, t)$ 处电场的切向分量为：

$$\begin{aligned} \varepsilon(x, h, t) &= \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, h(x, t), t) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} (1 - \frac{e^{cx^2 h(x, t)}}{h(0, t)}) \psi(t) \end{aligned} \quad (19)$$

基于上述初始条件与控制方程，在空间离散上采用中心差分格式，在时间推进上依托适用于刚性方程组的向后微分公式，以保证跨尺度强耦合项在长时间演化中的数值稳定性。此外，考虑到电脱湿过程伴随着复杂的界面记忆效应及瞬态响应，将模拟过程分为三个演化阶段：

(1) 自然松弛阶段：系统处于无外加电场的状态，设定液滴呈抛物线型初始轮廓，并采用阶跃型浓度分布。随后，液滴将在分离压与表面张力的共同作用下自然演化，直至达到热力学平衡状态，形成稳定的初始接触角。该平衡状态将作为后续电场作用下液滴行为变化的基准参照。

(2) 电脱湿阶段：待系统达到初始松弛稳态后，立刻施加 4V 的正向电压。此时极化电场被激活，驱动液滴内部的活性剂进行重新分布，诱导液滴形态发生变化。

(3) 再润湿阶段：在脱湿过程达到稳态后，迅速将电压极性反转至-4V。观察逆向电场如何驱动活性剂进行重新排布，并评估液滴在形态上的再润湿表现。

基于上述计算方案，获得的液滴瞬态演化与界面浓度分布结果如图 9 所示。

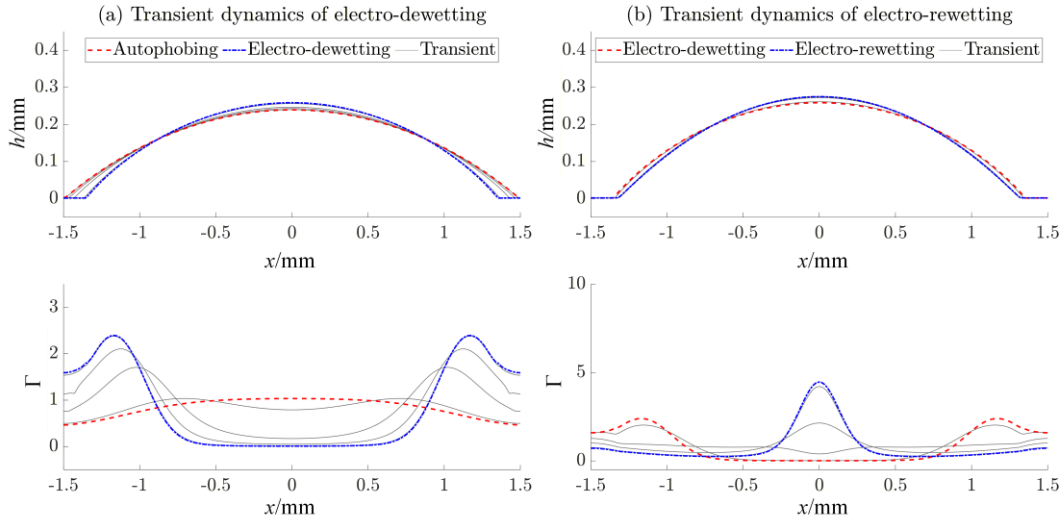


图 9 电脱湿与再润湿演化过程 (a) 电脱湿过程中液滴轮廓与活性剂浓度的演化；(b) 再润湿过程中液滴轮廓与活性剂浓度的演化

Fig.9. Evolution process of electro-dewetting and re-wetting: (a) Evolution of droplet contour and surfactant concentration during electro-dewetting process; (b) Evolution of droplet contour and surfactant concentration during re-wetting process.

施加正电压后，活性剂的运输主要由电迁移效应主导。此时，活性剂会迅速向三相接触线附近富集，使得该处的局部液气界面张力急剧下降。这种张力梯度随即引发了向内的马兰戈尼对流，拉动流体向中心收缩，宏观上表现为液滴的高度增加和基底的接触半径缩小，电脱湿阶段完成。随后将电压极性反转为负，界面电场梯度随之反转。原先聚集在液滴边缘的活性剂迅速向液滴顶部中心区域迁移与汇聚，形成极高的中心局部浓度峰值。中心区域表面张力的大幅下降诱发了向外的马兰戈尼径向流动，促使流体重新向四周铺展，液滴高度回落，最终发生再润湿现象。

模拟证实，在非均匀外电场的作用下，活性剂会发生空间上的重新分布，进而跨尺度诱发宏观层面流体力学的响应，最终表现为液滴形貌的收缩与铺展。

5. 电脱湿实验分析

5.1 实验平台搭建

为验证模型效果，通过电脱湿实验进行对比分析，搭建的实验平台如图 10 所示。实验基底采用重掺杂 P 型硅片，置于 y 轴精密位移台上，并通过导电的镀金弹簧探针压接作为底电极。一根直径 0.2mm 的铂丝固定于 xz 轴双向位移台上，垂直插入液滴内部作为针状对电极。该闭环回路由直流稳压电源（MS303D，220V，50Hz）进行供电，并串接双向转换开关（E-TEN1322）以满足实验对电场极性快速切换的操作需求。外置光源（XSP-00）与相机（SHL-500WS）呈对角线排布，将采集到的液滴形态演化实时传输至计算机，并借助 ImageJ 软件^[27]及其内置的 DropSnake 插件计算液滴接触角的变化参数。

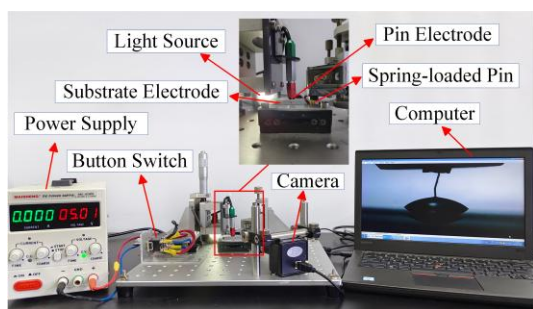


图 10 电脱湿实验装置

Fig.10. Electro-dewetting experimental apparatus.

5.2 实验过程与结果分析

实验开始前，使用去离子水对硅片基底进行冲洗并吹干，保证基底洁净。随后，使用移液枪将约 $5\mu\text{L}$ 的液滴置于基底表面，通过三维精密位移台的协同调节，将铂丝电极缓慢垂直插入液滴内部。在施加初始直流电压后，液滴进行脱湿收缩。接着，拨动转换开关迅速将电场极性反转，液滴随之发生铺展与润湿。

图 11 展现了外加电压与体系浓度对 BTMAC 溶液接触角动态演化过程的影响。

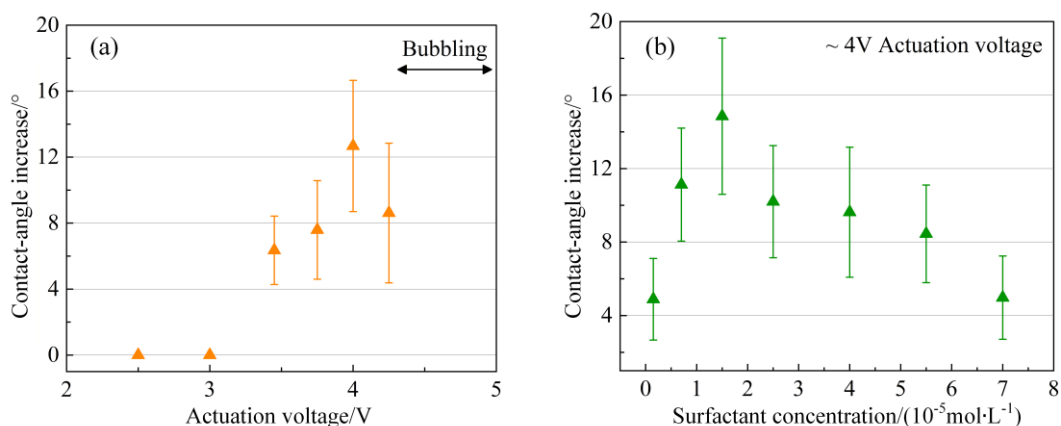


图 11 外加电压和离子表面活性剂浓度对电脱湿的影响 (a) 外加电压对液滴接触角增加的影响；(b) 离子表面活性剂浓度对液滴接触角增加的影响

Fig.11. Effect of applied voltage and ionic surfactant concentration on electro-dewetting: (a) Effect of applied voltage on the increase of droplet contact angle; (b) Effect of ionic surfactant concentration on the increase of droplet contact angle.

图中的每一个符号与误差棒，分别代表 8 次独立测量结果的平均值和标准差。通过横向对比可以看出，当驱动电压为 4V 且浓度为 $1.5 \times 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 时，液滴体系的接触

角展现出最显著的变化。图 12 展示了此时电脱湿与再润湿阶段液滴接触角的实验结果与数值仿真结果对比：

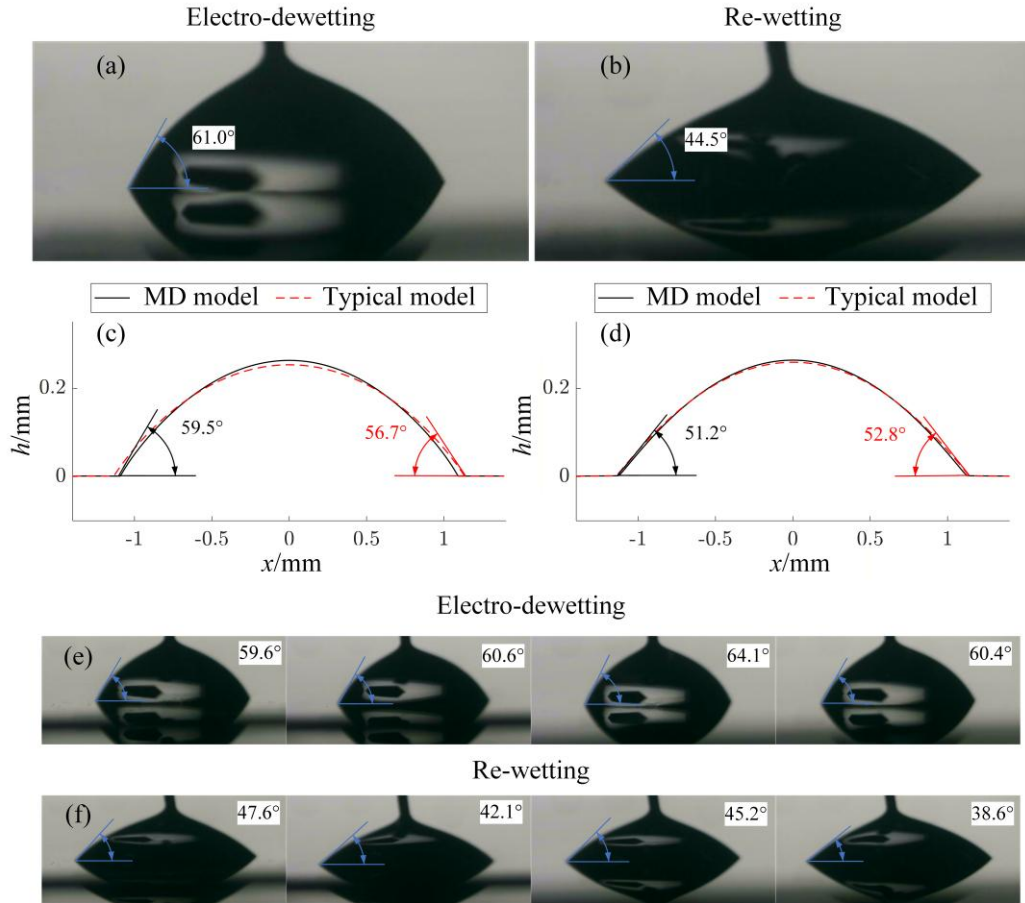


图 12 电脱湿与再润湿液滴接触角的实验结果与数值仿真结果对比 (a) 实验的电脱湿阶段; (b) 实验的再润湿阶段; (c) 仿真的电脱湿阶段(黑色实线为微观扩散系数 $0.123\text{\AA}^2\cdot\text{ps}^{-1}$ 计算的结果, 红色虚线为典型扩散系数 $0.1\text{\AA}^2\cdot\text{ps}^{-1}$ 计算的结果); (d) 仿真的再润湿阶段; (e) 电脱湿阶段的多次实验结果; (f) 与电脱湿阶段对应的再润湿阶段多次实验结果

Fig.12. Comparison between experimental results and numerical simulation results for electro-dewetting and re-wetting droplet shapes: (a) Experimental electro-dewetting stage; (b) Experimental re-wetting stage; (c) Simulated electro-dewetting stage (The black solid line is the result calculated from the microscopic diffusion coefficient of $0.123\text{\AA}^2\cdot\text{ps}^{-1}$, and the red dashed line is the result calculated from the typical diffusion coefficient of $0.1\text{\AA}^2\cdot\text{ps}^{-1}$.); (d) Simulated re-wetting stage; (e) Multiple experimental results of the electro-dewetting stage; (f) Multiple experimental results of the re-wetting stage corresponding to the electro-dewetting stage.

跨尺度模型电脱湿阶段与再润湿阶段的液滴接触角分别为 59.5° 与 51.2° , 传统模型分别为 56.7° 与 52.8° , 以单次基准实验结果分别为 61° 与 44.5° 作为参照, 将传统模型绝对误差与跨尺度模型绝对误差的差值占传统模型绝对误差的百分比, 来量化模型准确度提升率, 从而得出电脱湿及再润湿阶段接触角的准确度分别提升约 4.59% 和 3.59%, 两阶段接触角角差的准确度提升约 26.67%。多次实验表明, 液滴在电脱湿与

再润湿阶段的真实接触角分别为 $54.1^\circ\sim 59.6^\circ$ 与 $38.6^\circ\sim 47.6^\circ$, 跨尺度模型得到的接触角相比传统模型更接近真实的实验分布区间, 而且在接触角的变化范围上, 跨尺度模型也展现出了更高的准确度, 更符合实验观测到的趋势。

除接触角这一局部特征外, 也对液滴界面的全局动态形变进行了直观对比。首先使用 ImageJ 软件提取液滴轮廓, 之后对轮廓进行离散化处理, 同时剔除顶部区域

以排除铂丝的干扰。由于润滑理论的极薄液膜假设，电流体力学模型在处理大形变下的绝对高度存在局限。因此，为客观比较流体界面的演化趋势，对实验提取的二维离散轮廓进行了垂向缩放，将其等比例

映射至仿真的理论薄膜空间内。最终，在统一标度空间下，通过二维形态对比与逐点绝对误差量化分析，对模型进行进一步的验证，如图 13 所示。

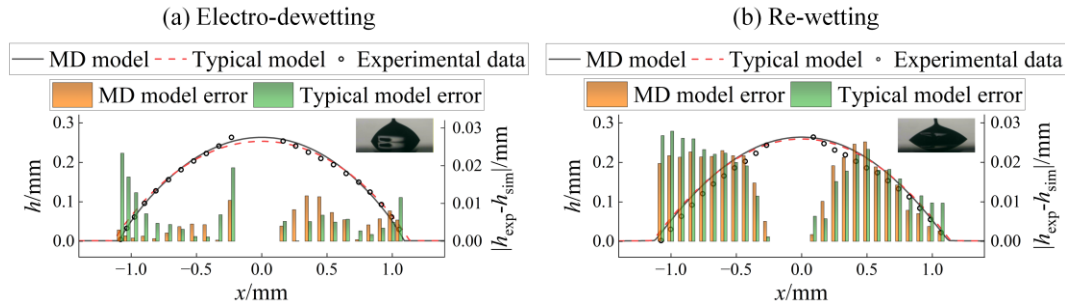


图 13 电脱湿与再润湿液滴二维离散轮廓与数值仿真结果对比及两种仿真误差分析 (a) 电脱湿阶段; (b) 再润湿阶段

Fig.13. Comparison between discrete 2D droplet contours and numerical simulation results during electro-dewetting and re-wetting, and error analysis of the two simulation models: (a) Electro-dewetting stage; (b) Re-wetting stage.

右侧纵坐标 $|h_{\text{exp}}-h_{\text{sim}}|$ 表征了数值仿真预测高度与实验高度之间的绝对误差。在电脱湿阶段的关键边缘区域 ($x=-1.08\text{mm}$ 与 $x=1.05\text{mm}$)，跨尺度模型误差分别为 0.003mm 和 0.0056mm ，相较于传统模型 0.0233mm 和 0.0116mm ，分别降低约 87.1% 和 51.7%。在再润湿阶段 ($x=-1.08\text{mm}$ 与 $x=1.07\text{mm}$)，跨尺度模型误差分别为 0.0197mm 和 0.0027mm ，相较于传统模型 0.0268mm 和 0.0097mm ，分别降低约 26.5% 和 72.2%。在预测三相接触线附近的动态行为时，跨尺度模型相较传统模型误差更小，表现出更高的准确性。然而，对于液滴的中上部区域，跨尺度模型的误差相对较大。这可能由于铂丝探针的毛细作用引发了局部液面畸变，或是重力作用导致了液滴的轻微塌陷所致。

6. 结论

为更好地理解电脱湿过程中电场与离子表面活性剂的协同作用，首先针对大分子表面活性剂缺乏经验力场的问题，基于第一性原理训练了 BTMAC 活性剂体系的

专属 DP 模型；其次，为突破单一尺度局限，提出了一种结合 MD 与 EHD 的跨尺度联合仿真方法。由此，基于 DP 模型进行了高精度的 MD 模拟，尝试刻画了液滴内局部微观区域的分子扩散行为，并提取了 BTMAC 活性剂阳离子的可靠微观扩散系数。同时，在驱动电压为 4V 且浓度为 $1.5 \times 10^{-5} \text{ mol/L}$ 的条件下，跨尺度方法相较于传统方法，在三相接触线附近的误差更小，且将两阶段接触角角差的准确度提升了约 26.67%，能够更真实地反映液滴接触角的动态变化范围与演化趋势。

然而，受限于当前理论模型的简化条件与复杂真实环境的差异，本研究在跨尺度揭示电脱湿现象的完整物理机制方面仍存在一定局限。首先，将微观区域内的局部电场近似为均匀电场，这一简化未能涵盖真实非对称电极下的强电场梯度效应。强电场梯度会诱发额外的介电泳作用并加剧局部极化，均匀场近似虽然有效捕捉了主导的电泳定向迁移，但可能低估了针尖处极高场强区域内活性剂分子的瞬态迁移速率与局部富集程度。其次，当前的微观

MD 模拟主要集中于液滴内部的分子迁移, 缺乏对液气界面与固液界面的微观模拟。这导致所提取的扩散系数更偏向于体相扩散特征, 从而在描述复杂三相接触线及液气界面处的动态行为时存在一定局限。此外, 宏观 EHD 方程涉及诸多物理参数, 本工作目前仅实现了扩散系数的微观替代,

宏观模型整体精度的进一步提升仍受限于其余经验参数。后续工作将围绕复杂多相界面的 MD 模拟, 以及其余宏观经验参数的微观跨尺度计算展开, 以期更深刻地揭示电脱湿过程的微观演化机制并提高模型的准确度。

参考文献

- [1] Chen C H, Yang K H 2025 *Sens. Actuators B Chem* **438** 137765
- [2] Wang C, Li X, Qiu Y, Wang L, Li C, Liu G, Liu G, Zheng Q, Chen X, Tian H, Wang C, Shao J 2022 *Nano Energy* **98** 107310
- [3] Li Y J, Echtermeyer D, Cahill B P, Pliquet U 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 18290
- [4] Xue Y, Kong M, Yuan Y, Liu Y, Dong Y 2024 *Opt. Laser Eng.* **181** 108402
- [5] Li J, Ha N S, Liu T L, van Dam R M, 'Cj' Kim C J 2019 *Nature* **572** 507
- [6] Zhou L, Zhang Z, Tang Y, Men C, Luo Y, Wang H T, Liu Y 2024 *Phys. Fluids* **36** 031705
- [7] Yang X, Xiao P, Shi Y, Zhao B, Liu X, Huang X, Chen Z 2025 *Energy* **330** 136999
- [8] Maddah M, Bagheri A 2023 *Colloid Surf. A-Physicochem. Eng. Asp.* **659** 130779
- [9] Sajad Mousavi Nejad Souq S, Ashenai Ghasemi F, Masoud Seyyed Fakhrabadi M 2022 *Comput. Mater. Sci.* **215** 111807
- [10] Liu H L, He H X, Zeng C, Wu K, Cheng Y H, Xiao B, 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 363 (in Chinese)
[刘浩良, 何骅轩, 曾超, 吴锴, 成永红, 肖冰 2025 物理学报 **74** 363]
- [11] Zhang L, Han J, Wang H, Car R, Ee W 2017 *Phys. Rev. Lett.* **120** 143001
- [12] Zeng J, Zhang D, Lu D, Mo P, Li Z, Chen Y, Rynik M, Huang L A, Li Z, Shi S, Wang Y, Ye H, Tuo P, Yang J, Ding Y, Li Y, Tisi D, Zeng Q, Bao H, Xia Y, Huang J, Muraoka K, Wang Y, Chang J, Yuan F, Bore S L, Cai C, Lin Y, Wang B, Xu J, Zhu J X, Luo C, Zhang Y, Goodall R E A, Liang

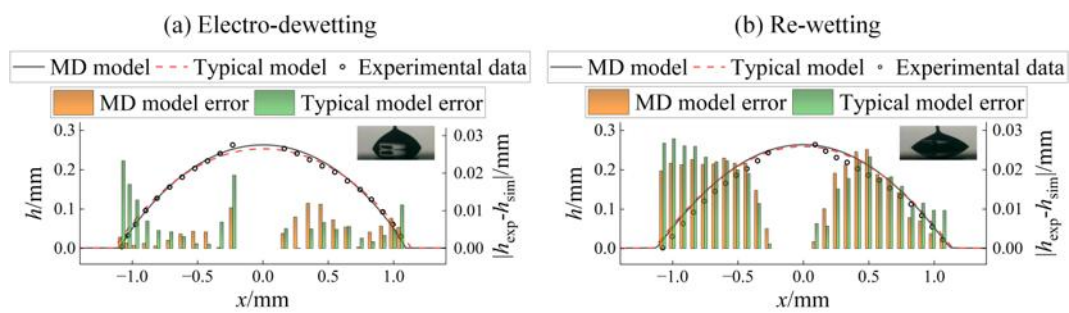
- W, Singh A K, Yao S, Zhang J, Wentzcovitch R, Han J, Liu J, Jia W, York D M, E W, Car R, Zhang L, Wang H 2023 *J. Chem. Phys.* **159** 054801
- [13] Thompson A P, Aktulga H M, Berger R, Bolintineanu D S, Brown W M, Crozier P S, in 't Veld P J, Kohlmeyer A, Moore S G, Nguyen T D, Shan R, Stevens M J, Tranchida J, Trott C, Plimpton S J 2022 *Comput. Phys. Commun.* **271** 108171
- [14] Li P, Liu X, Chen M, Lin P, Ren X, Lin L, Yang C, He L 2016 *Comput. Mater. Sci.* **112** 503
- [15] Zhang Y, Wang H, Chen W, Zeng J, Zhang L, Wang H, E W 2020 *Comput. Phys. Commun.* **253** 107206
- [16] Medina D, Valizadeh N, Samaniego E, Jerves A X, Rabczuk T 2020 *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **370** 113272
- [17] Gao Y, Liu J G 2021 *Physica D* **428** 133067
- [18] Chu W, Ji H, Wang Q, Kim C J C, Bertozzi A L 2023 *Phys. Rev. Fluids* **8** 073701
- [19] Kancharla S, Bedrov D, Tsianou M, Alexandridis P 2022 *J. Colloid Interface Sci.* **609** 456
- [20] Wang C, Tan Y, Jiang Z, Lin X, Hu S 2015 *Colloid Polym. Sci.* **293** 3479
- [21] Wu G, Cheng Y, Huang C, Yong C, Fu Y 2025 *Green Chem.* **27** 1556
- [22] Shao Z, Liu Z, Liang J, Liu H, Zhang Y 2025 *Reliab. Eng. Syst. Saf.* **264** 111336
- [23] Joo S, Jeon J H 2023 *Chaos Solit. Fractals* **177** 114288
- [24] Ervik Å, Eidsnes Penne T, Hellesø S M, Munkejord S T, Müller B 2018 *Int. J. Multiph. Flow* **98** 96
- [25] Beacham D R, Matar O K, Craster R V 2009 *Langmuir* **25** 14174
- [26] Craster R V, Matar O K 2007 *Langmuir* **23** 2588
- [27] Schneider C A, Rasband W S, Eliceiri K W 2012 *Nat. Methods* **9** 671

Cross-scale simulation of electro-dewetting and interfacial behavior prediction based on microscopic diffusion coefficient transfer

HUANG Peng, KE Ze-jie, ZHOU Fei-qiang, ZHAO Jia-yang, Long Rui, SONG Yue
(Key Laboratory of Advanced Manufacturing and Automation Technology in Guangxi Universities, School of Mechanical and Control Engineering, Guilin University of Technology, Guilin 541006, China)

Abstract

The physical essence of the electro-dewetting phenomenon lies in the interfacial migration of ionic surfactants driven by an external electric field, a complex process that poses a significant challenge to theoretical modeling. Traditional molecular dynamics (MD) struggles to reach the macroscopic spatiotemporal scales of droplet evolution, whereas macroscopic electrohydrodynamic (EHD) models typically rely on empirical parameters, lacking atomistic physical accuracy. To overcome this limitation, a cross-scale co-simulation method is proposed. First, to address the lack of dedicated empirical force fields for complex large-molecule surfactants, a highly accurate machine learning potential is constructed by combining first-principles calculations with a deep learning workflow. Based on this potential, high-precision MD simulations are performed on the bulk solution under a uniform electric field. Simultaneously, the mean square displacement of the surfactant molecules is extracted, and a drift-diffusion model is introduced to obtain a more accurate microscopic diffusion coefficient of the surfactant. Subsequently, this coefficient is incorporated into the macroscopic EHD model to substitute traditional empirical assumptions, thereby solving the coupled governing equations of liquid film thickness and surfactant concentration. Finally, the proposed cross-scale model is comprehensively validated through droplet manipulation experiments. Numerical results demonstrate that, compared to conventional EHD models, the cross-scale method exhibits lower errors and higher morphological agreement when capturing the dynamic behaviors near the three-phase contact line. Quantitative analysis indicates that the prediction accuracies of the macroscopic contact angles during the electro-dewetting and re-wetting stages are improved by approximately 4.59% and 3.59%, respectively, and the accuracy of the contact angle difference between the two stages is enhanced by 26.67%.



Keywords: electro-dewetting, electrohydrodynamics, molecular dynamics, first principles

* Project supported by the Guangxi key research and development program (Grant No. FN2600640602).

录用稿件，非最终出版稿