

外电场作用下纳米结构表面的固-液界面传热特性

齐凯 朱星光 王军[†] 夏国栋

(北京工业大学, 传热强化与过程节能教育部重点实验室暨传热与能源利用北京市重点实验室, 北京 100124)

(2024年5月17日收到; 2024年6月15日收到修改稿)

在固体表面布置纳米结构是一种强化固-液界面传热的简单有效的方法. 但是, 当固-液界面相互作用较弱时, 由于纳米结构并不能被液体浸润, 纳米结构的存在反而会弱化固-液界面之间的传热, 而外电场的施加则可以解决这一问题. 本文基于分子动力学模拟的方法, 研究了纳米结构固-液界面在外电场作用下的传热特性. 通过在2块平行金属板布置数量相同的正负电荷, 产生垂直于板面的均匀电场, 并在下层金属板上布置了不同尺寸的纳米结构. 结果表明: 在外电场作用下, 纳米结构处会产生电润湿现象, 固-液界面的润湿状态能够从 Cassie 态变为 Wenzel 态, 界面处的 Kapitza 热阻长度明显减小, 因而热流密度显著增大; 当电荷量增至发生电冻结的临界值, 液态水会产生电冻结现象, 其热导率骤增至 $1.2 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 热流密度也随之发生骤增; 继续增加电场强度, 由于电冻结现象的发生, 固-液界面热阻则基本保持不变.

关键词: 电润湿, 纳米结构, 外电场, 固-液界面热阻, 分子动力学**PACS:** 68.08.-p, 68.08.Bc, 61.30.Hn**DOI:** 10.7498/aps.73.20240698

1 引言

随着电子技术的发展, 电子芯片的特征尺寸越来越小, 集成度越来越高, 使得其单位面积上生成的热量急剧升高, 过多的热量聚集会导致电子器件温度过高, 成为了当前制约微电子设备性能和可靠性的关键因素之一^[1]. 作为一种新兴散热方法, 液体冷却技术因其较高的传热系数而得到了广泛应用^[2]. 一般而言, 当热量通过固-液界面进行传递时, 由于固体和液体之间的热力学性质存在显著的差异, 界面附近会产生不连续的温度分布, 称之为温度跃变, 而这种温度跃变通常是 Kapitza 热阻^[3]导致的, 其定义如下:

$$R_K = \frac{\Delta T}{q} \quad (1)$$

式中, R_K 为界面处的 Kapitza 热阻或界面热阻, ΔT 为界面上的温度跃变, q 为通过界面的热流密度.

固-液界面热阻受多种因素的影响, 一般认为, 固-液相互作用强度 (表面润湿性) 的增加会导致 R_K 的减小^[4-6], 界面温度的增加使 R_K 呈指数形式减小^[7], 表面粗糙度的增加能够有效降低 R_K ^[8,9]. 近期研究表明, 在固体表面布置纳米结构是一种强化固-液界面传热的简单有效的方法. Chakraborty 等^[10] 和 Yao 等^[11] 发现, 表面粗糙度的增加能够显著增强液体和壁面之间的热传递, 原因是两者之间的接触面积得到了增加; Rashidi 等^[8] 及 Qin 等^[12] 指出, 表面粗糙度的增加削弱了界面附近液体原子的扩散特性, 导致更多的液体原子被困于纳米结构中, 进而使液体原子与固体表面的接触时间延长, 影响界面处的热流量.

当液滴被放置于纳米结构表面时, 根据润湿程度的不同一般会出现 2 种状态^[13,14]: 如果液滴漂浮于粗糙的纳米结构表面上, 则称为 Cassie 态; 如果液滴浸泡纳米结构, 则称为 Wenzel 态. 与 Cassie 态相比, Wenzel 态与固体表面会产生更小的接触

[†] 通信作者. E-mail: jwang@bjut.edu.cn

角, 接触面积更大, 因此 Kapitza 热阻会更低, 界面传热效果更好. 一般情况下, 当液滴被放置于纳米结构表面时, 在加热、振动以及施加压力等外界作用下可以实现 Cassie 态到 Wenzel 态之间的润湿状态转变 [15-18]. 即使是具有相同亲疏水性的粗糙表面, 液滴也会因为纳米结构的不同而形成不同的润湿状态 [17].

通过外加电场, 也可以改变液体和固体之间的表面张力接触角. 早在 1875 年, Lippmann [19] 便在汞和电解质之间施加电压时就观察到了毛细管力的降低, 随后提出了著名的 Lippmann-Young 方程. 在此基础上, Orejon 等 [20] 利用 Lippmann-Young 方程进一步从理论上验证了接触角受外加电场变化的影响. 在纯水中, 当受到均匀外加电场时, 水分子会产生重新定向并发生位移 [21-24], 这是由于水分子极化产生的电场力主导了分子间的相互作用, 这种现象被称为电拉伸 [21]. 即使在室温下, 外加电场的存在也会使水分子形成冰状结构, 导致水的相态发生变化, 这种现象被称为电冻结 [25-29]. 近期, 关于电润湿以及电冻结在传热强化方面的研究得到了许多关注. 在池沸腾换热过程中, 气膜的存在导致热阻的增加, 而施加外电场可以将液体拉向固体表面, 从而强化沸腾换热过程甚至可以增加沸腾换热的临界热流密度 [18,30,31].

作为一种主动控制传热的典型技术, 纳米结构强化固-液界面传热的主要机理在于液体对纳米结构具有良好的润湿性. 但是, 当固-液界面相互作用较弱时, 纳米结构的存在反而会弱化固-液界面之间的传热, 原因是此时液体并不能够浸润纳米结构 (Cassie 态), 从而增大了界面热阻. 由前文可知, 利用电场操纵液体的现象可以改变固-液界面之间的润湿性 [32,33], 有望解决纳米结构固-液界面相互作用较弱时界面热阻较大的问题. 因此, 本文将利用外电场改变纳米结构的浸润状态, 实现在疏水表面上由 Cassie 态到 Wenzel 态之间的润湿状态转变, 强化固-液界面传热.

本文基于分子动力学模拟方法, 建立了外电场作用下纳米结构表面的固-液界面传热模型, 探究外电场强度和纳米结构尺寸的变化对固-液传热过程的影响规律. 计算结果表明, 在外电场作用下, 纳米结构处会产生电润湿现象, 固-液界面的润湿状态能够从 Cassie 态变为 Wenzel 态, 因而固-液界面热阻降低.

2 分子动力学模型

2.1 结构设置

本文采用分子动力学方法进行模拟, 该方法遵循牛顿力学定律, 通过对原子的运动方程进行积分来追踪原子的位置及动量的时间演化, 再采用统计力学方法对原子的运动过程进行统计, 最终能够得到整个系统的热力学状态参数和其他宏观性质. 基于 LAMMPS (large-scale atomic/molecular massively parallel simulator) 软件, 本文构建了外电场作用下纳米结构表面固-液界面传热的计算模型 [34]. 如图 1 所示, 该模型由 2 块平行金属板和中间的去离子水组成, 其中金属板由晶格常数为 0.408 nm 的面心立方晶体组成, 水分子采用 SPC/E (extended simple point charge models) 模型, 并使用 SHAKE 算法对键角进行固定. 该模型中金属板最外层的 3 层原子被设置为电荷层, 分别将一定量的正负电荷均匀布置于上、下 2 个电荷层的原子上, 以在系统内部形成均匀电场. 模型的 x 和 y 方向设置为周期性边界条件, z 方向为固定边界条件.

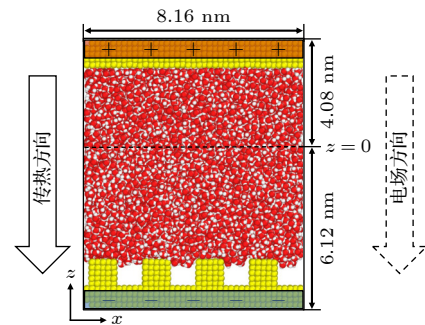


图 1 纳米结构界面的固-液传热系统模型

Fig. 1. Heat transfer system at nanostructured interface.

为了计算周期性边界系统中的长距库仑相互作用, 模拟过程中使用了 PPPM (particle-particle-mesh) 求解器, 并采用 Velocity-Verlet 算法以 1 fs 的时间步长对原子的牛顿运动方程进行积分. 在本文的分子动力学模拟中, 系统初始温度为 313 K, 所有原子的初始速度分布均服从 Maxwell 速度分布. 初始时系统在 313 K 的温度下进行 1 ns 的弛豫, 随后使用 Nose-Hover 热浴进行温度的控制, 控温层同样设置为金属板的上、下平板最外层的 3 层原子. 在此过程中, 为了避免液态水发生相变 (结冰或沸腾), 壁面的高温端和低温端分别设置为 343 K 和 283 K, 电场方向和传热方向

则均为 z 方向. 经过 1 ns 弛豫之后, 系统内形成稳定的热传递, 随后的 6 ns 进行数据的采集.

为了研究不同纳米结构对系统传热性能的影响, 本文设置了 4 种不同表面的金属板, 如图 2 所示, 图中 Case 1 为光滑壁面; Case 2, Case 3 和 Case 4 分别是布置不同规格纳米结构的表面, 其中 d 为纳米结构凹槽的深度, s 为凹槽之间的距离, w 为凹槽的宽度, 结构参数见表 1.

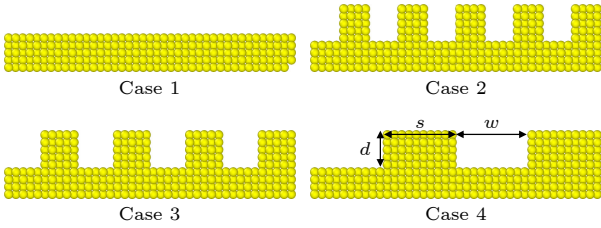


图 2 纳米结构界面的结构示意图

Fig. 2. Structure diagram of nanostructured interface.

表 1 4 种纳米结构的参数

Table 1. Parameters of four nanogroove configurations.

	d/nm	w/nm	s/nm
Case 1	—	—	—
Case 2	1.02	0.816	0.816
Case 3	1.02	1.02	1.02
Case 4	1.02	2.04	2.04

2.2 势函数设置

在分子动力学模拟中, 固体与液体原子之间的相互作用由 Lennard-Jones (L-J) 混合势描述:

$$U_{ij}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2)$$

式中, U_{ij} 为势函数, 参数 ϵ 和 σ 分别为相互作用势阱深度和势能为零时的距离, r_{ij} 为原子 i 和 j 之间的距离. 固-液原子之间势能参数 ϵ 和 σ 的选取则遵循 Lorentz-Berthelot (L-B) 原则:

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_{ii} + \sigma_{jj}), \quad (3)$$

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_{ii}\epsilon_{jj}}. \quad (4)$$

同时, 采用库仑势来模拟不同原子之间的静电相互作用:

$$U_{(\text{Coul})} = \frac{Cq_iq_j}{\epsilon r_{ij}}, \quad (5)$$

式中, C 为库仑常数, q_i 和 q_j 代表 2 个不同原子所携带的电荷量, ϵ 为真空的介电常数. 具体参数见表 2.

表 2 L-J 势函数的具体参数

Table 2. Parameters of L-J potential.

原子类型	σ/nm	ϵ/eV	q
O-O	0.3166	0.0068	-0.8476e
H-H	0	0	+0.4238e
Au-O	0.2867	0.0114	—
Au-H	0	0	—

对于金属原子之间的相互作用, 上述的 L-J 很难正确描述其特性, 而 Morse 势函数一般被广泛用于描述金属之间的势函数, 因此, 对于金属之间的相互作用可以表示为

$$U_{ij} = D_c \left[e^{-2\beta(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\beta(r_{ij}-r_0)} \right], \quad (6)$$

式中, D_c 为原子间相互作用的深度; β 为常数, 用于控制势能随原子间距离变化的平缓程度, r_0 为原子间的基本距离.

3 结果分析

3.1 外电场作用下的润湿态转变

图 3 显示了 4 种不同 Case 的纳米结构在不同外电场作用下的润湿态转变过程. 由图 3(a1)—(a4) 可知, 当电荷量为 0 (无外电场) 时, 由于下方金属板为超疏水表面, 没有任何一个纳米结构被浸润, 此时的润湿状态为 Cassie 态; 在施加一定量的电荷之后, 如图 3(b1)—(g4) 所示, 系统中的水能够逐渐浸润纳米结构, 润湿状态从 Cassie 态转变为 Wenzel 态. 因此, 该润湿状态的转变证明了施加外电场是改变固-液界面润湿状态的一种有效方法. 对于不同尺寸的纳米结构, 其润湿状态转变所需的电荷量是不完全相同的. 在 Case 2 和 Case 3 中, 润湿状态的转变都是在电荷量约为 $0.045e$ (单位电荷量 $e = 1.6 \times 10^{-19}$ C) 时完成的; 在 Case 4 中, 湿润状态的转变则是在电荷量约为 $0.03e$ 时完成的. 由此看来, 完成润湿状态转变所需的电荷量与纳米结构的尺寸相关, 纳米结构的凹槽越宽, 水越容易润湿超疏水性的纳米结构. 当电荷量增加到 $0.15e$ 时, 在所有的 Case 下都会产生电冻结晶现象. 此外, 对于同一参数下的不同模拟中, 当发生电冻结时, 水分子排列方式的不同会产生不同的晶界.

3.2 外电场作用下水的密度和温度分布

通过计算水在 z 方向上的质量密度分布, 很容

易发现电润湿和电冻结现象的产生. 图 4 显示了 Case 1 和 Case 3 中的水在不同外电场作用下的质

量密度分布. 如图 4(a) 所示, 对于 Case 1, 系统中中间水的质量密度保持在 1 g/cm^3 , 同时密度分层现

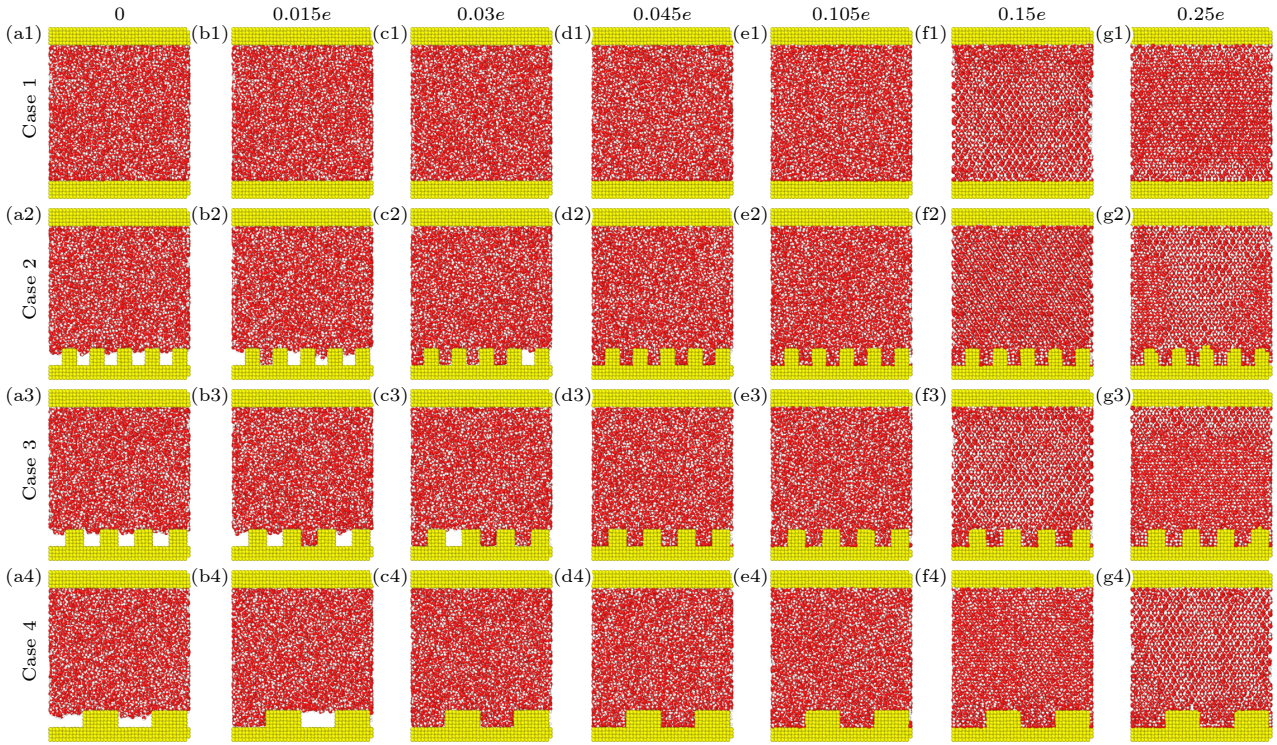


图 3 Case1, Case 2, Case 3 和 Case 4 在不同电荷量下的系统快照图

Fig. 3. Snapshots of Case 1, Case 2, Case 3 and Case 4 at different electrode charges.

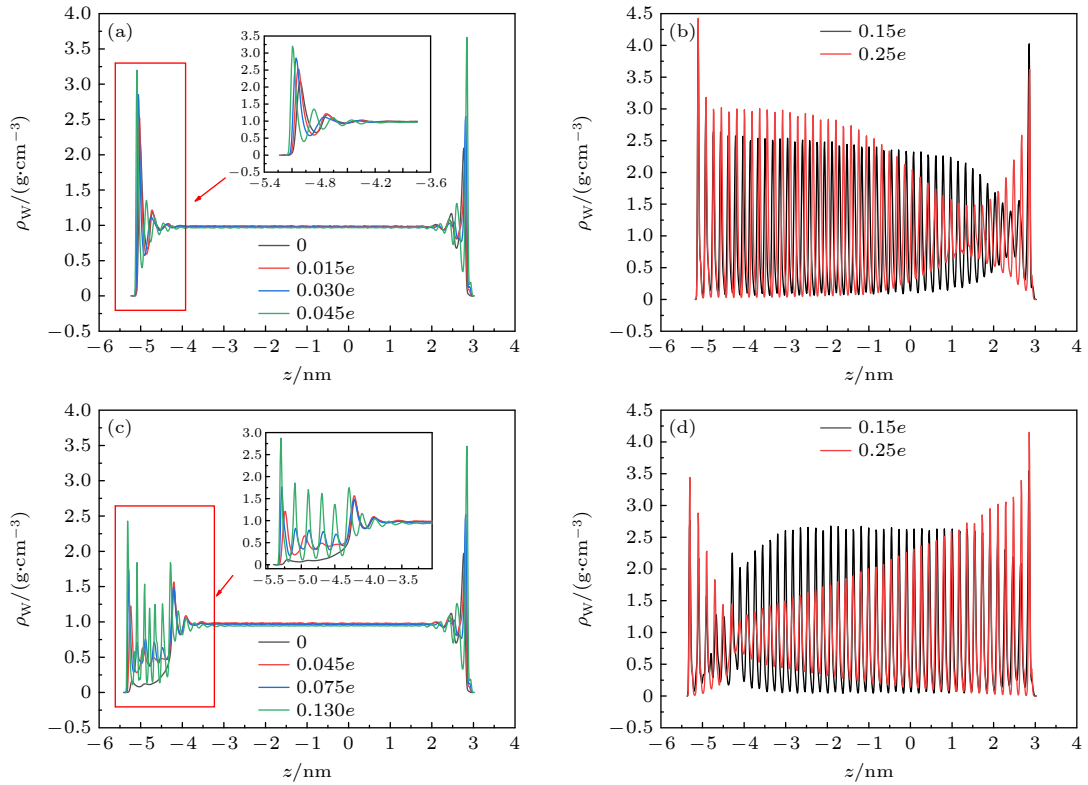


图 4 Case 1 和 Case 3 在不同电荷量下的密度分布 (a), (b) Case 1; (c), (d) Case 3

Fig. 4. Density distribution of Case 1 and Case 3 at different electrode charges: (a), (b) Case 1; (c), (d) Case 3.

象主要发生在表面附近, 并随着电荷量的增加而逐渐向表面移动. 这是因为电荷量的增加使得电润湿现象更加强烈, 表面润湿性增强; 另一方面, 由外电场引起的极化力也在增加, 这意味着水和表面之间的耦合作用增强, 进一步增强了表面的润湿性. 当电荷量达到 $0.15e$ 时, 图 4(b) 中形成了类似于固体的密度分布, 产生电冻结现象. 继续增大电荷量至 $0.25e$, 密度分布曲线的波幅更大, 分层现象更加明显, 电冻结现象更加强烈.

对于具有纳米结构的系统 (以 Case 3 为例), 图 4(c) 和图 4(d) 中 $z = -5.375 \text{ nm}$ 至 $z = -4.355 \text{ nm}$ 为纳米结构区域. 电荷量小于 $0.13e$ 时, 由于纳米结构未被完全浸润, 因此该区域中的水密度较低. 随着电荷量的增加, 电润湿现象增强, 纳米结构逐渐被完全浸润, 该区域中的水密度逐渐增加, 并且由于水分子在较小尺寸的纳米凹槽中运动受到限制, 因而出现了层状的密度分布. 随着电荷量的持

续增加并达到 $0.15e$ 以及 $0.25e$ 时, 如图 4(d) 所示, 同样形成了类似于固体的层状密度分布, 即电冻结.

图 5 显示了在不同外电场作用下, Case 1 和 Case 3 中固体 (T_S) 和液体 (T_L) 的温度分布. 由于固-液界面处存在的 Kapitza 热阻, 在界面处的温度分布产生了相应的跃变, 同时水中的温度分布呈线性分布. 随着电荷量的增强, 水中的温度梯度也逐渐增大, 高温端和低温端处的温度跃变逐渐减小. 由系统中的温度分布可知, 在施加外电场后, 固-液界面润湿性的提高可以有效地降低界面热阻. 当电荷为 0 时, Case 3 中润湿状态为 Cassie 态, 即水没有润湿到纳米结构中, 因而 Case 3 中的水的温度梯度小于 Case 1; 但在施加外部电场后, 纳米结构处的润湿状态逐渐从 Cassie 态变为 Wenzel 态, Case 3 中水的温度梯度逐渐增大, 并大于 Case 1 中水的温度梯度. 由此可知, 外电场和纳米结构的存在有利于强化固-液界面传热.

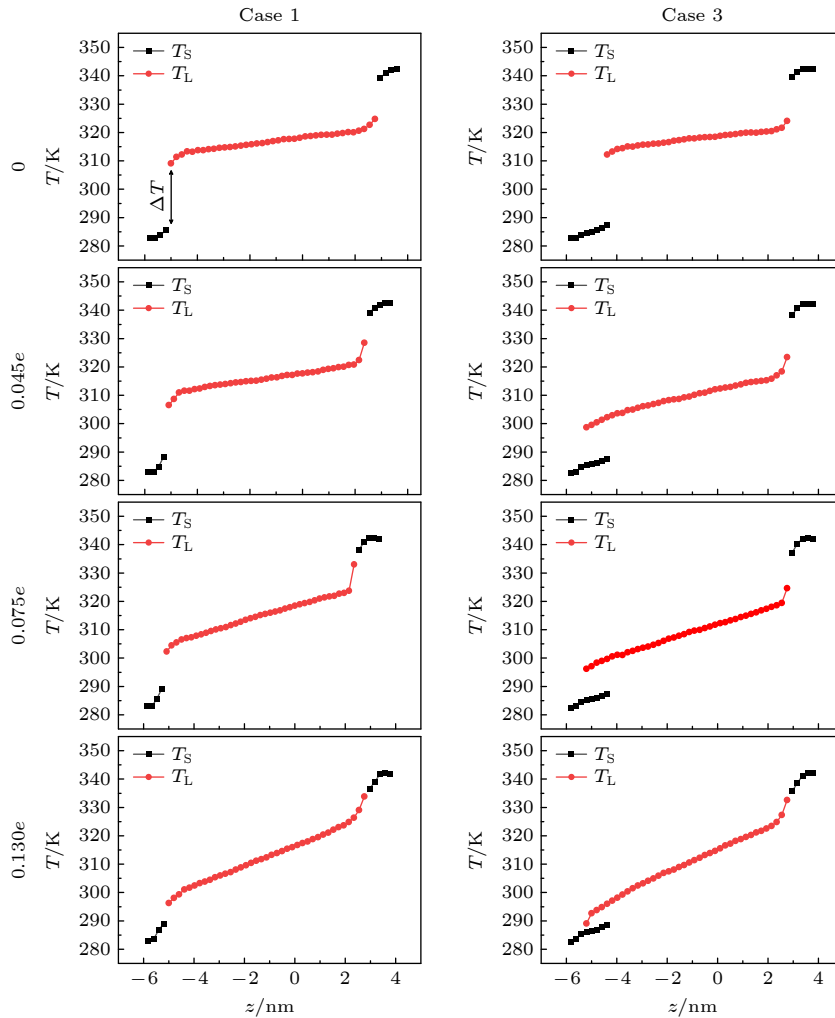


图 5 Case 1 和 Case 3 在不同电荷量下的温度分布

Fig. 5. Temperature distribution of Case 1 and Case 3 at different electrode charges.

3.3 外电场作用下的热阻长度、热导率和热流密度

界面热阻通常可以通过 Kapitza 热阻长度 L_K 来表征:

$$L_K = \Delta T \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{\text{liquid}} \quad (7)$$

式中, ΔT 为固-液界面处的温差, $\partial T/\partial z$ 为水中的温度梯度. 对于 Case 2, Case 3 和 Case 4, 将纳米结构量化为一层厚度为 $wd/(w+s)$ 的平坦固体层, 即底壁表面延伸厚度为 $d/2$, 以考虑纳米结构的影响. 计算结果如图 6 所示, 随着施加电荷量的增加, 导致极化应力的增大, 产生了更好的电润湿效果, 从而能够降低 L_K , 因此 L_K 在高温端和低温端都有明显的降低趋势. 从图 6(a) 可知, 由于高温端被设置于光滑表面的金属板处, 因此在 4 种 Case 下的 L_K 并无明显差异. 图 6(b) 则显示了低温端存在的 L_K 差异, 当电荷量为 0 时, Case 1 中的 L_K 略低于其他 3 种 Case, 说明此时纳米结构处的润湿状态处于 Cassie 态, R_K 比平壁处的大. 当

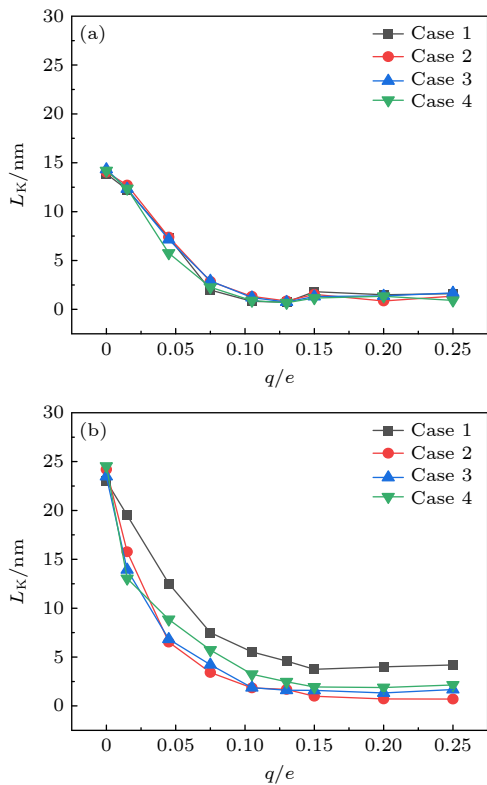


图 6 Case1, Case 2, Case 3 和 Case 4 在不同电荷量下的 L_K (a) 高温端; (b) 低温端

Fig. 6. Kapitza length of Case 1, Case 2, Case 3 and Case 4 at different electrode charges: (a) High-temperature end; (b) low-temperature end.

电荷量 $q < 0.13e$ 时, 由于受到外电场的电润湿作用, 纳米结构表面开始发生润湿状态的改变, 即水分子开始浸润纳米结构, 使得水分子与壁面之间的接触面积增大, 接触时间延长, 从而降低了低温端的 L_K ; 电荷量 $q \geq 0.15e$ 时, 电冻结的产生导致类固体流体的出现, L_K 则保持基本恒定. 通过对 4 种金属板面进行比较, 可以发现不同纳米结构壁面在相同电荷量下的 L_K 也有所不同, 呈现 L_K (Case 1) $>$ L_K (Case 4) $>$ L_K (Case 3) $>$ L_K (Case 2) 的趋势. 如上所述, 纳米结构之所以能够降低 R_K , 是因为固体和液体之间接触面积和接触时间的增加. 因此, 对于本文中的 3 种具有纳米结构的情况, 由于纳米结构的 w 和 s 在 Case 4 中较大, 而在 Case 2 中较低, 故 Case 2 中的传热接触面积较 Case 3 和 Case 4 会更大, 在低温端产生更小的 ΔT , 导致低温端的 L_K 更低.

上、下 2 个平壁之间水的热导率 κ 计算结果如图 7 所示. 尽管每个系统中的低温端表面结构不同, 但水的 κ 随电荷量的变化趋势几乎完全相同, 因此施加纳米结构并不会对电场作用下水的热导率产生影响. 无外电场时, 水的 κ 为 $0.735 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$; 在施加外电场后, κ 略有降低, 原因是外电场作用下水分子的扩散得到了抑制; 当产生电冻结现象之后, 系统中形成了稳固的氢键网络结构, 导致水的 κ 突然增至 $1.168 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 约为无外电场时的 1.6 倍. 文中无外电场时液态水与发生电冻结后水的 κ 均与文献 [35] 计算结果 0.806 及 $1.048 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 相近, 验证了该模型的有效性. 在此之后, 继续增加电荷量, 水的氢键网络结构基本不变, κ 也几乎保持不变, 结果如图 7 所示.

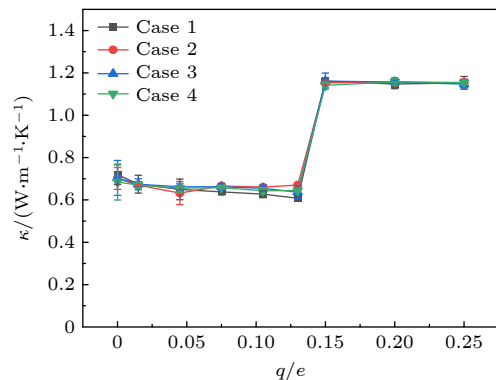


图 7 在不同电荷量下 Case 1, Case 2, Case 3 和 Case 4 中水的热导率

Fig. 7. Thermal conductivity of waters of Case 1, Case 2, Case 3 and Case 4 at different electrode charges.

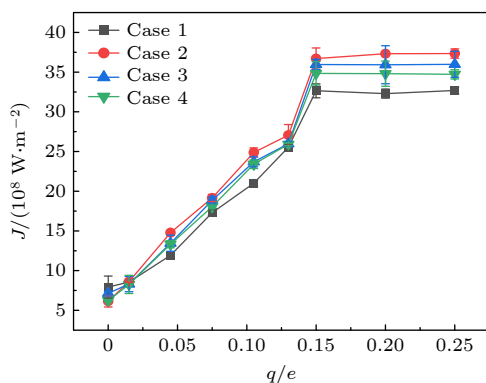


图 8 在不同电荷量下 Case 1, Case 2, Case 3 和 Case 4 中水的热流密度

Fig. 8. Heat flux of waters of Case 1, Case 2, Case 3 and Case 4 at different electrode charges.

最后, 本文计算了系统整体的热流密度 J , 结果如图 8 所示. 研究表明, J 随着电荷量的增加而增加, 并在电冻结现象出现之后保持不变. 在布置了纳米结构的 3 种 Case 中, 纳米凹槽布置最密集的 Case 2 中 J 最高, 为初始 J 的 6 倍左右, 其次为 Case 3, 纳米凹槽尺寸较大且布置稀疏的 Case 4 最低. 但 3 种不同的纳米结构界面的传热系统中的 J 皆大于平壁界面传热系统 Case 1 中的 J , 这表明施加外电场和布置纳米结构的应用可以强化固-液界面的传热.

4 结 论

本文基于分子动力学模拟方法, 研究了纳米结构固-液界面在外电场作用下的传热特性. 计算结果表明: 随着外电场的增强, 水分子会产生极化作用, 固-液之间的相互作用增强, 纳米结构逐渐被完全浸润, 实现由 Cassie 态到 Wenzel 态的润湿状态转变, 显著降低固-液界面 Kapitza 热阻; 纳米结构的凹槽越宽, 实现完全浸润所需的外电场强度越小; 当外电场强度超过一个临界值后, 中间区域的液态水则产生电冻结现象, 电冻结后的水分子, 由于稳定氢键网络结构的出现, 水的热导率增大至液态水的 1.6 倍左右.

参考文献

[1] Razeeb K M, Dalton E, Cross G L W, Robinson A J 2018

- Int. Mater.* **63** 1
- [2] Pop E 2010 *Nano Res.* **3** 147
- [3] Kapitza P L 1971 *J. Phys. U.S.S.R.* **4** 181
- [4] Shenogina N, Godawat R, Kebllinski P, Garde S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 156101
- [5] Harikrishna H, Ducker W A, Huxtable S T 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 251606
- [6] Park S C, Cho H R, Kim D, Choi S H, Choi C, Yu D I 2024 *Int. J. Heat Fluid Flow* **107** 109388
- [7] Song G, Min C 2013 *Mol. Phys.* **111** 903
- [8] Rashidi M M, Ghahremanian S, Toghraie D, Roy P 2020 *Int. Commun. Heat Mass* **117** 140741
- [9] Zhang C B, Xu Z L, Chen Y P 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 214706 (in Chinese) [张程宾, 许兆林, 陈永平 2014 物理学报 **63** 214706]
- [10] Chakraborty P, Ma T, Cao L, Wang Y 2019 *Int. J. Heat Mass. Tran.* **136** 702
- [11] Yao S T, Wang J S, Jin S F, Tan F G, Chen S P 2024 *Int. J. Therm. Sci.* **203** 109161
- [12] Qin S Y, Chen Z X, Wang Q, Li W G, Xing H W 2024 *Int. Commun. Heat Mass* **151** 107257
- [13] Cassie A B D 1948 *Discussions of the Faraday Society* **3** 11
- [14] Wenzel R N 1936 *Ind. Eng. Chem.* **28** 988
- [15] Bormashenko E 2015 *Adv. Colloid Interface Sci.* **222** 92
- [16] Bormashenko E, Pogreb R, Stein T, Whyman G, Erlich M, Musin A, Machavariani V, Aurbach D 2008 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10** 4056
- [17] Li W, Ma X J, Xu J L, Wang Y, Lei J P 2015 *Acta Phys. Sin.* **70** 126101 (in Chinese) [李文, 马晓婧, 徐进良, 王艳, 雷骏鹏 2015 物理学报 **70** 126101]
- [18] Sur A, Lu Y, Pascente C, Ruchhoeft P, Liu D 2018 *Int. J. Heat Mass Tran.* **120** 202
- [19] Lippmann G 1875 *Ann. de Chim. et de Phys.* **5** 494
- [20] Orejon D, Sefiane K, Shanahan M E 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 201601
- [21] Daub C D, Bratko D, Leung K, Luzar A 2007 *J. Phys. Chem. C* **111** 505
- [22] Song F H, Li B Q, Liu C 2013 *Langmuir* **29** 4266
- [23] Lee M W, Latthe S S, Yarin A L, Yoon S S 2013 *Langmuir* **29** 7758
- [24] Zhang B X, Wang S L, He X, Yang Y R, Wang X D, Lee D J 2021 *J. Mol. Liq.* **342** 117468
- [25] Luedtke W D, Gao J P, Landman U 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 20343
- [26] Zhu X Y, Yuan Q Z, Zhao Y P 2014 *Nanoscale* **6** 5432
- [27] Sun W, Xu X B, Zhang H, Xu C X 2008 *Cryobiology* **56** 93
- [28] Zangi R, Mark A E 2004 *J. Chem. Phys.* **120** 7123
- [29] Jinesh K B, Frenken J W M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 036101
- [30] Ahmad I, Ranjan A, Pathak M, Khan M K 2023 *Int. J. Therm. Sci.* **192** 108440
- [31] Lu Y, Liu D 2023 *Int. J. Heat Mass Tran.* **208** 124055
- [32] Hu J, Zhang S, Lou Q 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 176401 (in Chinese) [胡剑, 张森, 娄钦 2023 物理学报 **72** 176401]
- [33] Mugele F, Baret J C 2005 *J. Phys.: Condens. Matter* **17** R705
- [34] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [35] Yenigun O, Barisik M 2019 *Nanoscale Microscale Thermophys. Eng.* **4** 304

Heat transfer characteristics of solid-liquid interface on nanostructure surface under external electric field

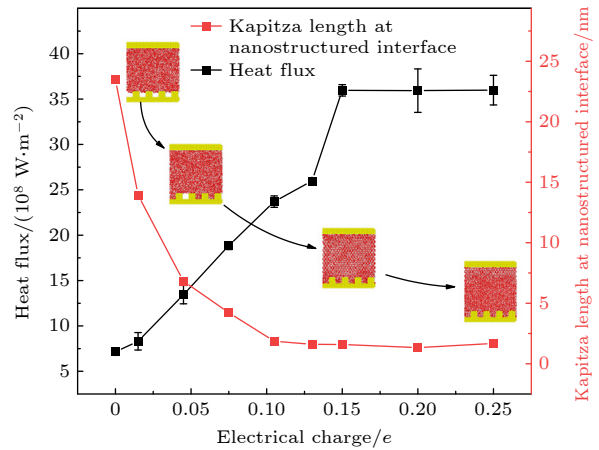
Qi Kai Zhu Xing-Guang Wang Jun[†] Xia Guo-Dong

(Key Laboratory of Enhanced Heat Transfer and Energy Conservation, Ministry of Education, Beijing Key Laboratory of Heat Transfer and Energy Conservation, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China)

(Received 17 May 2024; revised manuscript received 15 June 2024)

Abstract

With the size of high-performance electronic device decreasing (down to nanoscale), and the accompanying heat dissipation becomes a big problem due to its extremely high heat generation density. To tackle the ever-demanding heat dissipation requirement, intensive work has been done to develop techniques for chip-level cooling. Among the techniques reported in the literature, liquid cooling appears to be a good candidate for cooling high-performance electronic devices. However, when the device size is reduced to the sub-micro or nanometer level, the thermal resistance on the solid-liquid interface cannot be ignored in the heat transfer process. Usually, the interfacial thermal transport can be enhanced by using nanostructures on the solid surface because of the confinement effect of the fluid molecules filling up the nano-grooves and the increase of the solid-liquid interfacial contact area. However, in the case of weak interfacial couplings, the fluid molecules cannot enter into the nano-grooves and the interfacial thermal transport is suppressed. In the present work, the heat transfer system between two parallel metal plates filled with deionized water is investigated by molecular dynamics simulation. Electronic charges are applied to the upper plate and lower plate to create a uniform electric field that is perpendicular to the surface, and three types of nanostructures with varying size are arranged on the lower plate. It is found that the wetting state at the solid-liquid interface can change from Cassie state into Wenzel state with strength of the electric field increasing. Owing to the transition from the dewetting state to wetting state (from Wenzel to Cassie wetting state), the Kapitza length can be degraded and the solid-liquid interfacial heat transfer can be enhanced. The mechanism of the enhancing heat transfer is discussed based on the calculation of the number density distribution of the water molecules between the two plates. When the charge is further increased, electrofreezing appears, and a solid hydrogen bonding network is formed in the system, resulting in the thermal conductivity increasing to 1.2 W/(m·K) while the thermal conductivity remains almost constant when the electric charge continues to increase.



Keywords: electrowetting, nanostructure, external electric field, solid-liquid interfacial thermal resistance, molecular dynamics

PACS: 68.08.-p, 68.08.Bc, 61.30.Hn

DOI: 10.7498/aps.73.20240698

[†] Corresponding author. E-mail: jwang@bjut.edu.cn

外电场作用下纳米结构表面的固-液界面传热特性

齐凯 朱星光 王军 夏国栋

Heat transfer characteristics of solid-liquid interface on nanostructure surface under external electric field

Qi Kai Zhu Xing-Guang Wang Jun Xia Guo-Dong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 156801 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240698

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240698>

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

非对称纳米通道内界面热阻的分子动力学研究

Molecular dynamics study of interface thermal resistance in asymmetric nanochannel

物理学报. 2020, 69(22): 224701 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200491>

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>

纳米结构及浸润性对液滴润湿行为的影响

Effects of base angle and wettability of nanostructures on droplet wetting behaviors

物理学报. 2021, 70(12): 126101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201584>

基于密度泛函理论的外电场下 $C_5F_{10}O$ 的结构及其激发特性

Structure and excitation characteristics of $C_5F_{10}O$ under external electric field based on density functional theory

物理学报. 2020, 69(1): 013101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191455>

外加横向电场作用下石墨烯纳米带电子结构的密度泛函紧束缚计算

Electronic structure of graphene nanoribbons under external electric field by density functional tight binding

物理学报. 2021, 70(5): 053101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201619>

电驱动引发液滴弹跳过程中的能量转换

Energy conversion during electrically actuated jumping of droplets

物理学报. 2022, 71(11): 114702 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212133>