

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*

余绵¹⁾ 李丙衡¹⁾ 孟祥文¹⁾ 吴连锋²⁾ 马连湘¹⁾ 唐元政^{1)†}

1) (青岛科技大学机电工程学院, 青岛 266061)

2) (海洋化工研究院有限公司, 海洋涂料国家重点实验室, 青岛 266072)

(2025年6月4日收到; 2025年9月3日收到修改稿)

气泡成核在沸腾换热、微流控制设备中的气液分离以及生物学中的气体传输等相变和流动过程中扮演关键角色, 易受表面润湿性能和粗糙结构的影响. 鉴于实验研究的局限, 本文采用分子动力学方法系统研究了具有不同润湿性能和不同数量纳米凸起的恒热流过热表面对水中气泡成核的影响规律和微观机制. 结果表明, 在相同表面润湿性能下, 随纳米凸起数量增加, 表面粗糙度增加, 气泡成核时间点提前; 对具有相同粗糙度的表面, 随表面亲水性增强, 气泡成核时间点提前; 在本文研究范围内, 具有最大粗糙度的亲水表面上水的气泡成核最早. 近壁面处水的密度和温度随时间的变化以及密度和温度的空间分布的分析表明: 由于热量积聚, 纳米凸起与底部平面连接拐角处最易成为气化核心. Kapitza 热阻的计算结果表明: 亲水性越强的表面具有越低的固-液界面热阻, 越有利于气泡成核. 本文为理解气泡成核的微观机制及优化传热、传质和流体控制系统的设计提供了理论依据.

关键词: 分子动力学, 气泡, 粗糙度, 润湿条件

PACS: 47.11.Mn, 47.55.dd, 68.35.Ct, 61.30.Hn

CSTR: 32037.14.aps.74.20250717

DOI: 10.7498/aps.74.20250717

1 引言

气泡成核现象是一种在自然界和工程应用中普遍存在的复杂现象, 它不仅是水沸腾现象的基础过程, 也与沸腾换热^[1-4]、电子器件冷却^[5-7]、生物医药传输^[8,9]、超声波造影^[10]等领域密切相关. 以往的研究多聚焦于宏观尺度下气泡成核现象, 而随着电子器件等各种设备元件向微纳米尺度发展, 纳米结构表面的气泡成核成为当前的研究热点. 分子动力学 (molecular dynamics, MD) 模拟^[11,12]作为一种能够追踪原子、分子运动的有效工具, 近年来被广泛应用于气泡成核过程的研究. 通过分子

动力学模拟, 综合考察表面结构、润湿性能等因素对气泡成核的影响, 探索纳米尺度下的成核条件、过程及机理, 进而为深入理解和优化多种应用场景中的气泡动力学提供理论支持.

现有研究表明, 表面结构可显著影响气泡成核. Wen 等^[13]开展了两级分级表面上沸腾传热的实验研究, 发现该表面上铜纳米线阵列形成的纹理结构可显著促进气泡成核. Miao 和 Xia^[14]借助 MD 模拟对比研究了平整表面和带有不同深度矩形沟槽表面上的流动沸腾, 发现沟槽结构有利于气泡成核, 且增加沟槽深度可进一步强化气泡成核. 类似地, Liu 等^[15], Zhang 等^[16], Wang 等^[17]和 Zhang 等^[18]的 MD 模拟研究也均得出了表面纳米

* 国家自然科学基金 (批准号: 52176077) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: tangyuanzheng@163.com

粗糙结构可显著促进气泡成核和强化沸腾传热的结论. 此外, 杨海昌等^[19]的 MD 研究则系统分析了表面粗糙度和气体过饱和对纳米气泡成核的综合影响. 表面润湿性能对气泡成核过程的影响也是当前的研究热点之一. 白璞^[20]建立三维表面势能模型, 借助 MD 研究探讨了表面势能、润湿性与沸腾传热三者之间的关系, 发现亲水表面比疏水表面更有利于气泡成核, 进而强化沸腾传热. Yang 等^[21]和 Mahmood 与 Young^[22]等的 MD 研究则考虑了气体过饱和影响下表面润湿性能对气泡成核的影响. Zhou 等^[23]和 Liu 等^[24]的 MD 研究则综合考虑了表面粗糙结构和润湿性能对气泡成核和沸腾过程的影响. 除以上气泡成核的 MD 研究以外, 气泡溃灭等相关过程^[25]也已有 MD 研究报道.

尽管前述研究已提供大量有价值的结论, 但针对不同表面润湿条件下带有正弦凸起纳米结构表面上气泡成核的研究尚未开展. 与以往研究中的纳米结构表面相比, 本文构建的带有连续正弦凸起的纳米结构表面具有显著差异和优势: 首先, 通过改变正弦凸起的数量和单个正弦凸起的宽度, 可直接调控表面的粗糙度; 其次, 正弦曲线在数学上具有连续性与平滑性, 便于气泡聚并行为和气泡接触角的观测; 第三, 本文保持不同模型中所有正弦凸起的高度及其宽度之和不变, 从而保持正弦凸起的体积不变, 确保不同模型中气泡生长速率等的测量和比较的一致性. 此外, 与以往研究所采用的恒温过热表面不同, 本文通过对纳米结构表面施加恒定热流密度诱发水气泡成核, 这更接近电子器件冷却等

工程应用的实际工况. 本文采用分子动力学方法研究不同润湿条件下带正弦凸起表面上的水气泡成核, 借助紧邻加热表面区域水的温度和密度随时间的变化、温度分布、密度分布和 Kapitza 热阻的分析, 系统研究了润湿性能和表面粗糙度对气泡成核的影响规律和微观机制.

2 模拟方法

模拟系统整体结构如图 1(a) 所示, 由三部分组成: 自上而下分别为铜 (Cu) 原子构成的顶板、中间水 (H₂O) 分子和 Cu 原子构成的基底. 本文中各模型基底中央区域的 Cu 原子按正弦凸起波浪起伏排列, 以构建纳米粗糙表面. 正弦凸起的轮廓符合函数:

$$f(x) = h_0 + A \sin(2\pi x/p), \quad (1)$$

其中 x 是原子的 X 轴坐标; h_0 是到 Z 轴的距离; A 是振幅; p 是周期^[26]. 如图 1(b) 所示, 通过改变周期 p 改变凸起数量, 并在下文分别记为模型 #1, #2, #3, #4 和模型 #5. 需要注意的是, 各个模型的正弦凸起的高度 h 和凸起区域的总宽度 d 保持相等, 因此所有模型均为包含 25869 个原子的长方体, 在 X , Y 与 Z 方向上的尺寸分别为 122.69 Å, 20.00 Å 与 520.00 Å. 如图 1(c) 所示, 基底中凸起下方的 9 层共 3888 个 Cu 原子按其功能划分为三个子层: 最底部 3 层 Cu 原子被固定, 避免基底因加热发生变形; 中间 3 层 Cu 原子被施加热流, 作为系统的热源; 最顶部 3 层 Cu 原子作为传热层,

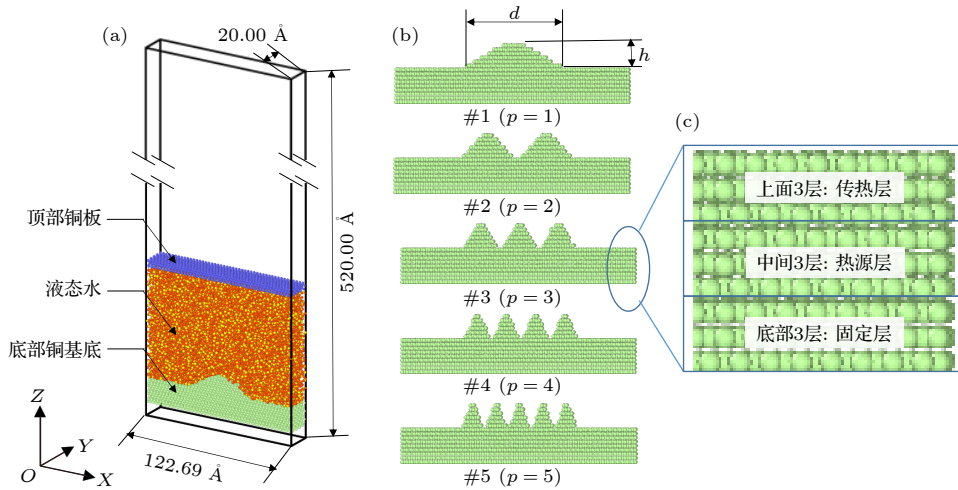


图 1 模拟系统结构 (a) 整体结构图; (b) 不同模型基底结构投影图; (c) 基底中 Cu 原子的功能分层示意图

Fig. 1. Structure of the simulation system: (a) Overall structure diagram; (b) projection diagrams of substrate structures for different models; (c) schematic diagram of functional layering of Cu atoms in the substrate.

将热源热流传递至液态 H₂O 区域. 不同模型中, 顶板中 Cu 原子数目均为 1296 个, H₂O 分子数目均为 6679 个, 基底上的凸起由 648 个 Cu 原子排列组成. 整个模拟系统在负 Z 方向上采用固定边界条件, 在其他方向上采用周期边界条件.

模拟的各系统中, Cu 原子按照面心立方晶格排列, 晶格常数为 3.61 Å. Cu 原子间的相互作用力用范德瓦耳斯力表示, 由 12-6 Lennard-Jones 势函数 (L-J 势函数) 描述为

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

其中 ϵ 为能量参数; σ 为距离参数; r_{ij} 为原子 i 和 j 之间的距离; r_{cut} 为截断半径. 此外, 对所有 Cu 原子施加弹性力^[27]

$$F = -Kr. \quad (3)$$

以确保它们仅在各自的位置振动, 防止正弦凸起结构的坍塌, 其中 $K = 52 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ 为弹性常数, r 为原子对之间相对于初始位置的位移. SPC/E 模型能够很好地体现 H₂O 分子^[28,29] 的物理和化学特性, 被用于本文中 H₂O 分子的描述. 采用 SHAKE 算法^[30] 实现 H₂O 分子中 O—H 键和 H—O—H 角的刚性约束, 以节约整个模拟过程所需机时. O 和 H 原子的电荷为 $q_{\text{O}} = -0.8476e$, $q_{\text{H}} = 0.4238e$. 长程库仑相互作用通过粒子-粒子-粒子-网格算法进行高效计算^[31]. H₂O 分子间的相互作用通过 O—O 原子对 L-J 势函数描述. 润湿条件由 H₂O 分子与 Cu 原子的相互作用决定, 并通过 O—Cu 原子对 L-J 势函数参数进行调节, 具体如下:

$$\phi(r_{ij}) = 4\epsilon' \left[\left(\frac{\sigma'}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma'}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad r \leq r_{\text{cut}}, \quad (4)$$

$$\epsilon' = \epsilon\beta^2, \quad (5)$$

$$\sigma' = \beta^{-1/6}\sigma, \quad (6)$$

其中 ϵ' 和 σ' 分别代表改变润湿条件控制参数 β 之后得到的新能量参数和新距离参数. 本文选用的 L-J 势函数参数如表 1 所列. 根据表 1 中 O—Cu 相互作用参数, 采用柱状液滴 MD 模型计算得到的疏水、中性和亲水表面上的水的接触角分别为 120.0°, 87.3° 和 4.7°.

本文采用活塞辅助压力控制方法以稳定模拟系统的压力^[32]. 具体而言, 将模拟系统的顶板设置为一个可移动的活塞, 通过对其上每个原子施加

沿 Z 方向的外力来控制其运动, 维持模拟系统的压力平衡, 从而避免压力波动对气泡行为的干扰. 施加于顶板中每个 Cu 原子的力为

$$F_{\text{atom}} = \frac{F_{\text{total}}}{N_{\text{up}}} = \frac{P \cdot S_{XOY}}{N_{\text{up}}}, \quad (7)$$

式中, F_{total} 为施加于顶板的外力; N_{up} 为顶板中 Cu 原子的数目; $P = 1 \text{ bar}$ ($1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$) 为设定压力; S_{XOY} 为顶板投影于 XOY 平面上的面积.

表 1 L-J 势函数参数

Table 1. L-J potential parameters.

Atom pairs	σ/nm	ϵ/meV
Cu—Cu	0.2377	409.300
O—O	0.3166	6.739
O—Cu (疏水)	0.3380	3.685
O—Cu (中性)	0.3190	7.370
O—Cu (亲水)	0.3011	14.740

本文的分子动力学模拟流程根据先后顺序可分为两个过程: 弛豫过程和成核过程. 弛豫过程是将除去最底部固定 Cu 原子外的整个模拟系统弛豫到正则 (NVT) 系综. 弛豫过程在 298 K 的恒温条件持续 1 ns, 温度由 Langevin 方法^[33] 调控. 成核过程中, 模拟系统转为由微正则 (NVE) 系综控制, 并通过对基底的中间 3 层 Cu 原子施加热流以触发气泡成核. 由于不同润湿条件下气泡生成时间差异较大, 疏水条件下成核过程持续 2 ns, 而中性和亲水条件下成核过程仅持续 1 ns. 以上模拟过程中, 原子轨迹、温度和密度等数据抽样间隔为 1 ps.

温度 T 通过以下公式计算:

$$\text{DOF} \cdot \frac{1}{2} k_{\text{B}} T = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2, \quad (8)$$

其中 DOF 表示用于温度计算的原子总自由度; k_{B} 为玻尔兹曼常数; N 是原子数; m_i 和 v_i 分别是第 i 个原子的质量和速度. 具体而言, 未受约束的每个 Cu 原子的自由度为 3, 因此固体区域取 $\text{DOF} = 3N$ (N 为 Cu 原子数); 受 SHAKE 算法约束的 H₂O 分子自由度为 6 (等价于每个原子的自由度为 2), 因此液体区域取 $\text{DOF} = 2N'$ (N' 为 H₂O 分子包含的原子数); 在固-液界面区域, $\text{DOF} = 3N + 2N'$; 在液-气界面区域的 H₂O 分子与液相相同, 取为 $\text{DOF} = 2N'$.

本文使用 LAMMPS 开源软件^[34], 采用时间步长 1 fs 的速度 Verlet 积分算法对原子运动方程

进行积分计算. 模拟结果的可视化和数据分析使用 open visualization tool [35] 和 visual molecular dynamics (VMD)[36] 软件完成.

3 结果与讨论

3.1 表面粗糙度对气泡成核的影响

本文模拟系统的表面粗糙度计算公式如下:

$$R_A = \frac{A}{A'}, \quad (9)$$

其中 A 为与液体接触的基底的真实表面积; A' 为底部 Cu 基底投影于 XOY 平面上的面积. 所有模型粗糙度结果详见表 2, 可见表面粗糙度随正弦凸起数目的增加而单调增加.

表 2 各模型的表面粗糙度

Table 2. The surface roughness of each model.

模型	#1	#2	#3	#4	#5
粗糙度	1.04	1.16	1.32	1.49	1.67

图 2 为中性润湿条件下, 模型 #1、#3 和 #5 在成核模拟过程中的原子轨迹快照 (篇幅限制, 其他没有明显差异性规律的模型不再展示). 未见气泡成核的模拟初期, 底部热源向液态 H_2O 分子传递热量使其无规则热运动加剧 [37], 导致液相区域的体积膨胀; 同时因为系统压力平衡, 顶板相应地向上移动. 经典成核理论 [38] 表明, 加热表面上的沟槽是最有可能成为气化核心的位置之一. 结合对紧邻加热表面上 H_2O 分子运动的观察, 图 2 中虚线框标出的是在 0.72 ns, 0.51 ns 和 0.37 ns 时刻, 分别于模型 #1, #3 和 #5 中观察到明显的空腔, 这些空腔位于凸起与基底平面区域接触的转角区域或多个凸起围成的凹槽区域, 标志着气化核心位置, 这与经典成核理论的说法一致. 随模拟的继续进行, 这些空腔不断生长成气泡, 气泡持续长大直至到达模型 X 方向的周期性边界, 并在基底和液相之间形成一层蒸气膜. 观察图 2, 对应模型 #1, #3 和 #5, 蒸气膜形成时刻分别为 0.77 ns, 0.67 ns 和 0.61 ns. 随后, 该蒸气膜将液相推离基底表面.

此外, 值得注意的是图 2(c) 所示的模型 #5 在气泡模拟初始的 0 ns 时刻, 于底部凸起区域处, 可观察到明显的空隙. 这些空隙的产生来源于纳米粗糙结构对液体铺展的抑制作用 [39], 同时这些空隙较有可能成为气化核心进而促进气泡成核.

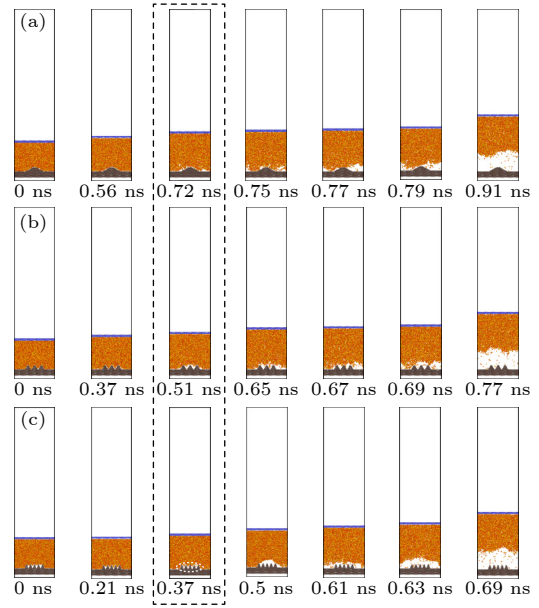


图 2 模拟系统在中性润湿条件下的气泡成核快照 (a) 模型 #1; (b) 模型 #3; (c) 模型 #5

Fig. 2. Snapshots of bubble nucleation under neutral wetting condition in simulation systems: (a) Model #1; (b) Model #3; (c) Model #5.

为进一步考察表面粗糙度对气泡成核的影响, 对图 3 所示靠近加热表面 20 Å 范围内 H_2O 分子的数密度进行了计算与输出, 结果如图 4 所示. 图 4 中 H_2O 分子的数密度表现出明显的分段特征: 初始 0 ns 时刻, 模型 #1, #3 和 #5 中 H_2O 分子数密度基本一致, 约为 0.118 nm^{-3} , 与液相水的数密度相同. 受热导致的液相区域膨胀, H_2O 分子数密度开始减小. 随后, 对应前述各模型出现明显空腔的时刻, 模型 #1 中该区域的 H_2O 分子数密度于 0.72 ns 之后持续减小; 而 H_2O 分子数密度则分别在 0.51 和 0.37 ns 后以波动方式下降. 这主要是因为模型 #1 单一凸起两边会先形成空腔, 模型 #3 和

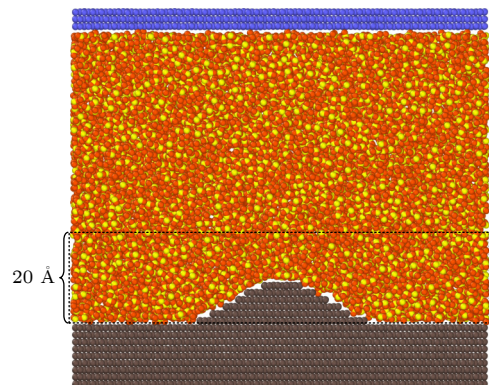


图 3 密度统计区域示意图

Fig. 3. Schematic diagram of the density statistical region.

#5 每两个凸起围成的凹槽里均会形成空腔, 这些空腔生长成的气泡长大直至达到凸起顶部, 合并成为大气泡. 对具有多个凸起的表面, 气泡合并过程造成气泡生长的不稳定, 进而导致 H_2O 分子数密度的波动. 最后, 在蒸气膜形成时刻, H_2O 分子数密度急剧下降. 以上结果表明, 表面粗糙度不仅影响气泡的产生, 也会对气泡生长的稳定性产生影响.

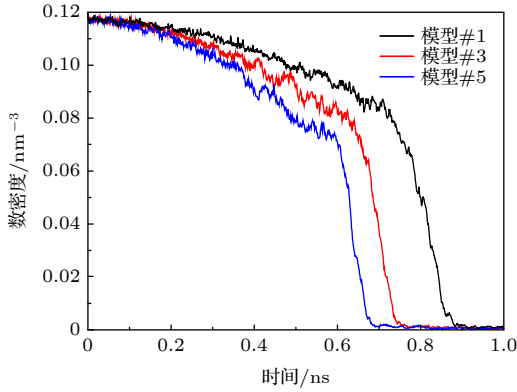


图 4 各模型统计区域内 H_2O 分子数密度随时间的变化图
Fig. 4. Number density variation of H_2O molecules over time in the statistical region for each model.

用于控制模拟系统压力的顶板的位移变化可反映气泡体积变化, 从而揭示气泡生长状态的变化. 由图 5 可以观察到, 三条位移曲线整体上呈现出相似的增长趋势. 本文对顶板位移曲线的演变进行详细分析, 发现整个气泡模拟过程表现出三个阶段, 即初始受热阶段、稳定生长阶段和蒸气膜脱离阶段. 从 0 至 0.21 ns 的初始受热阶段, H_2O 分子持续吸收基底的热量, 导致各模型顶板的缓慢位移. 由于在该阶段, 如图 5(a) 所示的模型 #5 基底上的凸起附近存在空隙, 其顶板的位移波动较为明

显. 随后阶段, 气泡的稳定生长使顶板位移加速. 且表面粗糙度越大, 位移加速度越大, 这表明表面粗糙度的增加有利于气泡成核. 最终的蒸气膜脱离阶段, 一旦表面形成蒸气膜, 顶板急速上移, 位移曲线出现拐点. 顶板位移曲线的分段特征与前述 H_2O 分子数密度的分段特征相吻合.

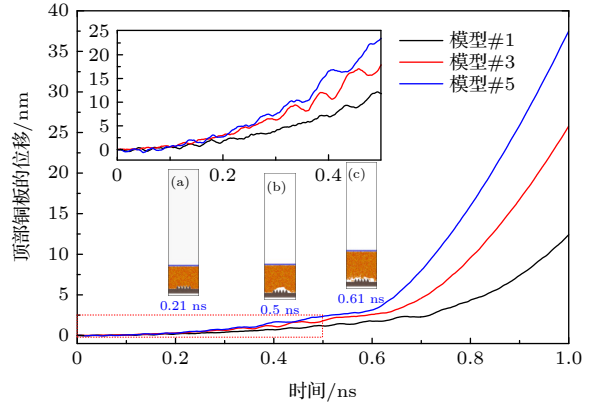


图 5 各模型顶部 Cu 板位移随时间变化图 (a) 模型 #5, 0.21 ns; (b) 模型 #5, 0.5 ns; (c) 模型 #5, 0.61 ns
Fig. 5. Time evolution of the top Cu plate displacement for each model: (a) Model #5, 0.21 ns; (b) Model #5, 0.5 ns; (c) Model #5, 0.61 ns.

为更深入地揭示表面粗糙度对气泡生长方式的影响, 本文选取顶板位于同一高度时, 展示三个模型的密度分布, 如图 6 所示. 图 6 中密度云图通过将模拟系统划分为 $1/100(Z$ 方向) $\times 1/20(X$ 方向) 的二维网格, 并计算密度, 绘制而成. 图 6 中虚线圈出的位于固-液界面附近的低密度区域对应气泡的成核位置. 图 6(a) 中, 气泡主要在基底表面、凸起两侧发生成核; 尽管凸起顶部也存在气泡生成, 但其体积较小. 在图 6(b) 和图 6(c) 中, 成核位

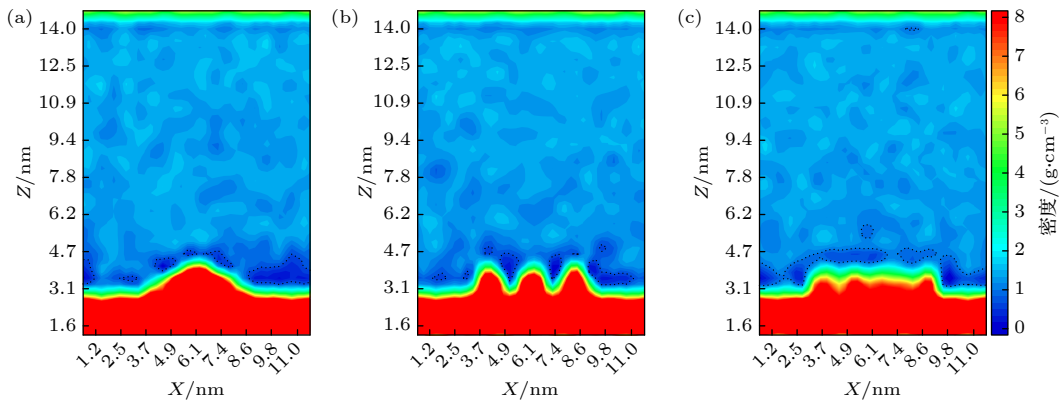


图 6 各模型顶部 Cu 板高度相同时的密度分布图 (a) 模型 #1, 0.75 ns; (b) 模型 #3, 0.65 ns; (c) 模型 #5, 0.54 ns
Fig. 6. Density distribution maps of each model at the same top Cu plate height: (a) Model #1, 0.75 ns; (b) Model #3, 0.65 ns; (c) Model #5, 0.54 ns.

点数量明显增多,且主要集中在两个相邻凸起围成的凹槽区域,随后多个气泡在这些凹槽中独立形成并同时生长.这一结果进一步验证了基底上凸起与基底平面区域接触的转角区域或多个凸起围成的凹槽区域是气泡成核的主要位置;且表面粗糙度增加带来成核位点数量的增加,进而强化气泡成核.这些结果与之前相关研究^[40,41]的结果高度一致.

将模拟系统划分为 $1/100(Z\text{方向}) \times 1/20(X\text{方向})$ 的二维网格,并按照(8)式计算各网格温度,绘制如图7所示的温度分布云图.图中黑色虚线表示等温线,黑色实线表示基底表面轮廓.由图7可见,凸起与基底平面区域接触的转角区域的温度高于表面其他区域,必将有利于气泡成核.拐角区域的高温来源于局部热量积聚^[42].

图3中紧邻加热表面区域内 H_2O 的温度随时间的变化如图8所示.由图8可知,从成核模拟开始到气泡成核, H_2O 的温度持续上升;当蒸气膜形成后, H_2O 的温度出现较大波动.此外,表面粗糙度越高,紧邻加热表面区域内 H_2O 升温越快.这是

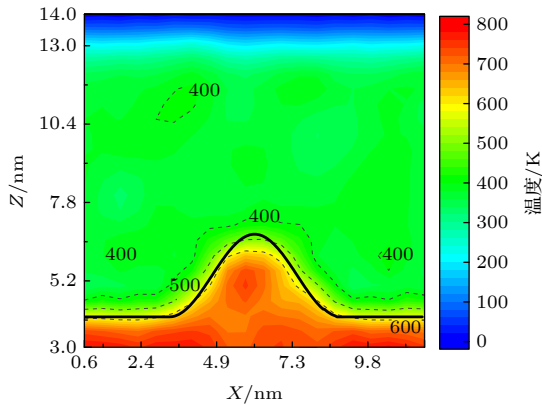


图7 0.5 ns时刻模型#1温度分布图

Fig. 7. Temperature distribution of Model #1 at 0.5 ns.

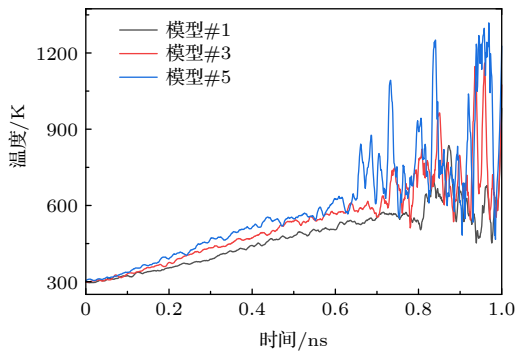


图8 统计区域内各模型 H_2O 的温度随时间的变化

Fig. 8. Temperature variation of H_2O in the statistical region over time for each model.

因为随表面粗糙度的增加,基底与液相的接触面积增加,从而强化了固-液热量传递^[41],促进了气泡成核的发生.

3.2 润湿条件对气泡成核的影响

图9对比了模型#1和#5在三种不同润湿条件下的原子轨迹快照.可见,模型#1在疏水、中性

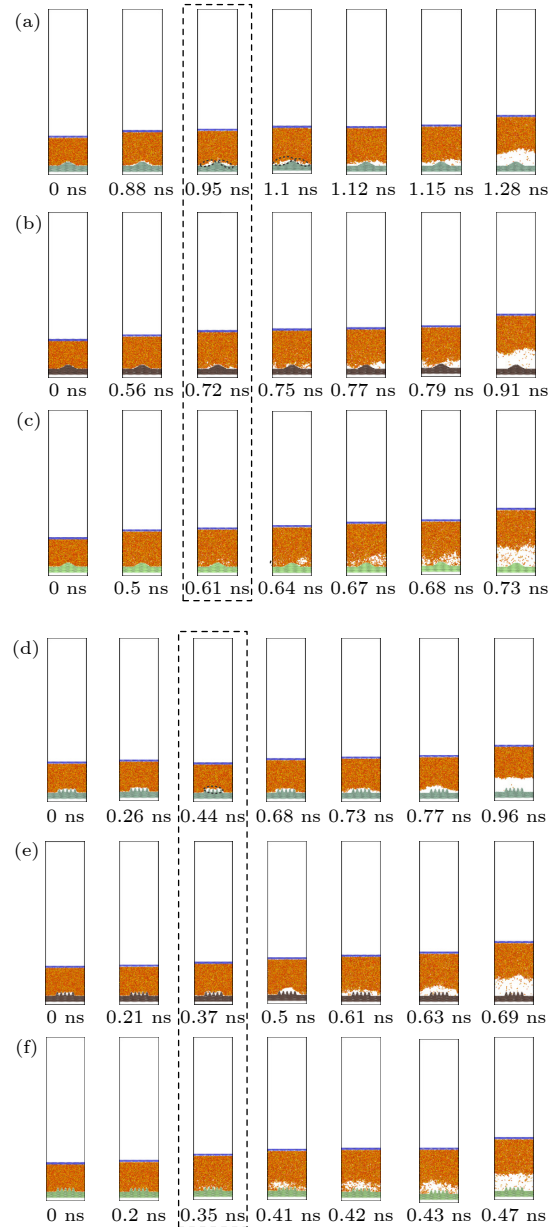


图9 模型#1和#5在不同润湿条件下的气泡成核快照
模型#1: (a) 疏水条件; (b) 中性条件; (c) 亲水条件
模型#5: (d) 疏水条件; (e) 中性条件; (f) 亲水条件

Fig. 9. Snapshots of bubble nucleation in Models #1 and #5 under different wettability conditions. Model #1: (a) Hydrophobic condition; (b) neutral condition; (c) hydrophilic condition. Model #5: (d) Hydrophobic condition; (e) neutral condition; (f) hydrophilic condition.

和亲水条件下, 分别于 0.95 ns, 0.72 ns 和 0.61 ns 时刻产生空腔, 模型#5 的空腔则分别在 0.44 ns, 0.37 ns 和 0.35 ns 时刻产生. 以上结果表明, 随着表面润湿性增强 (即表面由疏水条件变为亲水条件), 气泡成核发生得更早, 即增强表面亲水性有利于促进气泡成核, 这与宏观条件下的经典成核理论认为的疏水表面易于产生气泡的说法相悖, 但之前相关 MD 研究^[40]的结论一致.

非亲水条件下的模型#5 在初始 0 ns 时刻基底上的明显空隙可成为气化核心, 进而强化气泡成核; 而亲水条件下的模型#5 在初始 0 ns 时刻没有明显空隙. 但是, 对比图 9(d)–(f) 发现, 亲水条件下模型#5 气泡成核最早, 气泡生长最为迅速. 这个结果表明, 表面亲水性增强对气泡成核的强化要显著强于疏水条件造成的初始空隙对气泡成核的强化.

不同润湿条件下, 模型#1 和#5 中靠近基底上方 20 Å 区域内 H₂O 分子数密度的变化如图 10 所示. 由于疏水条件下的模型#5 在初始 0 ns 时刻存在明显空隙, 其 H₂O 分子数密度远低于液相水的数密度, 而其他模型在初始 0 ns 时刻的 H₂O 分子数密度均与液相水的数密度相等. 针对同一模型, 随着表面亲水性增强, H₂O 分子数密度的下降速度明显加快.

不同润湿条件下, 于蒸气膜生成时刻, 模型#1 的密度分布如图 11 所示. 根据密度分布定量分析得到的气泡接触角随时间变化如图 12 所示. 对比图 11 和图 12 可见, 随着表面亲水性增强, 气泡接触角增大, 气泡体积增大.

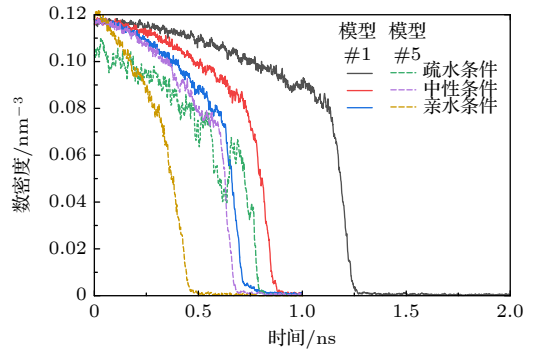


图 10 模型#1 和#5 在不同润湿条件下统计区域内 H₂O 分子数密度随时间的变化图

Fig. 10. Temporal evolution of H₂O molecular number density in the sampling region for Models #1 and #5 with different wettability conditions.

气泡体积的变化可通过图 13 中顶板位移随时间的变化体现出来. 针对同一模型, 表面亲水性越强, 顶板位移速度越快, 这说明表面越亲水, 气泡成核越早, 体积增长越快. 图 13 中顶板位移曲线的拐点代表蒸气膜的形成. 亲水条件下蒸气膜形成最早, 中性条件下次之, 而疏水条件下最晚. 以上结果进一步验证了提高表面亲水性能能够显著促进气泡的成核和生长过程.

不同润湿条件下, 模型#1 和#5 中图 3 所示区域内 H₂O 温度随时间变化如图 14 所示. 可以看出, 在模拟初期, 模型#1 和#5 在三种润湿性条件下的温度基本相同. 随着模拟的进行, 模型#1 和#5 在亲水条件下 H₂O 的升温最快, 中性条件下次之, 而疏水条件下最慢. 这是因为亲水表面具有最强的固–液作用^[41,43], 增强了基底与液相之间的热传导效率, 从而加速了气泡的成核过程.

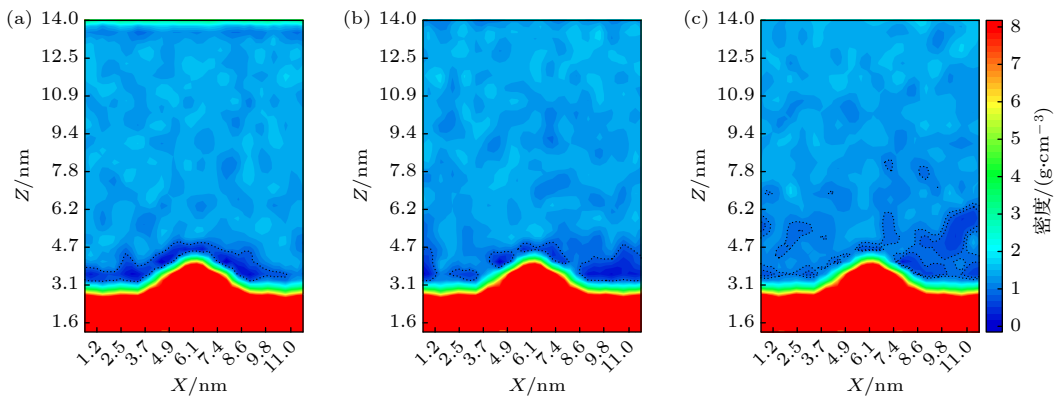


图 11 模型#1 在不同润湿条件下气泡成核时刻的密度分布图 (a) 疏水条件, 1.12 ns; (b) 中性条件, 0.77 ns; (c) 亲水条件, 0.67 ns
Fig. 11. Density distribution diagram at the moment of bubble nucleation in Model #1 under different wettability conditions: (a) Hydrophobic condition, 1.12 ns; (b) neutral condition, 0.77 ns; (c) hydrophilic condition, 0.67 ns.

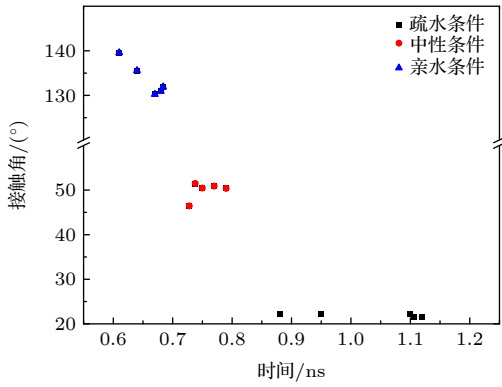


图 12 模型#1在不同润湿条件下气泡接触角随时间变化图

Fig. 12. Temporal evolution of bubble contact angle for Model #1 under different wettability conditions.

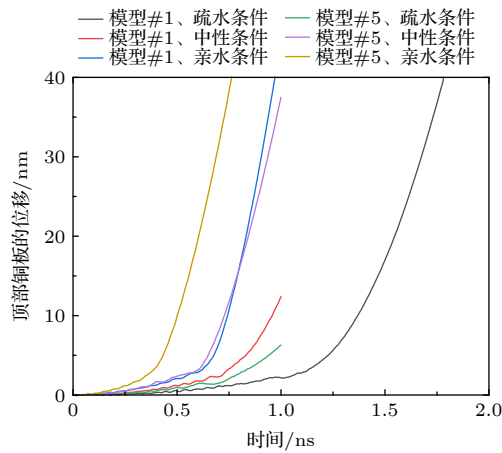


图 13 模型#1和#5在不同润湿条件下顶板的位移随时间的变化图

Fig. 13. Displacement of the top copper plate over time in Models #1 and #5 under different wettability conditions.

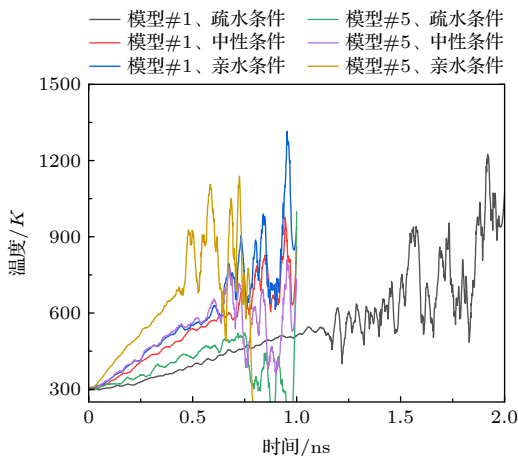


图 14 模型#1和#5在不同润湿条件下统计区域内H₂O的温度随时间的变化图

Fig. 14. Temperature variation of H₂O in the sampling region over time for Models #1 and #5 under different wettability conditions.

为了进一步揭示表面润湿条件对基底与液相之间热传导效率的影响,按下式计算了 Kapitza 热阻^[44]:

$$R_k = (T_2 - T_1)/q, \quad (10)$$

其中 T_2 表示基底中热源层上方 3 层 Cu 原子及凸起部分 Cu 原子的温度; T_1 为图 3 所示区域中 H₂O 分子的温度; q 为施加的热流密度,其值为 $1.45 \times 10^{10} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$. 由图 15 可见,针对同一模型,疏水条件的 Kapitza 热阻最高,中性条件次之,亲水条件最低,这证明了表面亲水性增强对固-液界面传热的强化效果.

图 16 绘制了本文研究的所有模型生成气泡核的时间点. 结果表明,粗糙度越高且亲水条件越强,气泡成核速度越快.

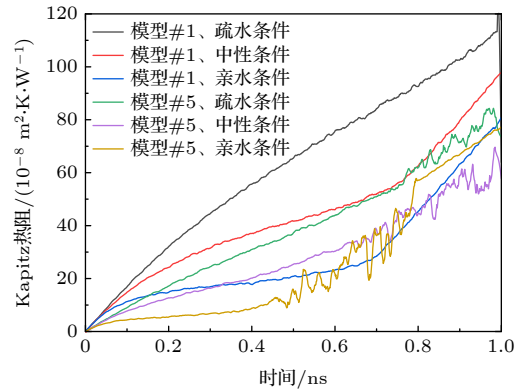


图 15 模型#1和#5在不同润湿条件下的 Kapitza 热阻随时间的变化图

Fig. 15. Variation of Kapitza resistance over time for Models #1 and #5 under different wettability conditions.

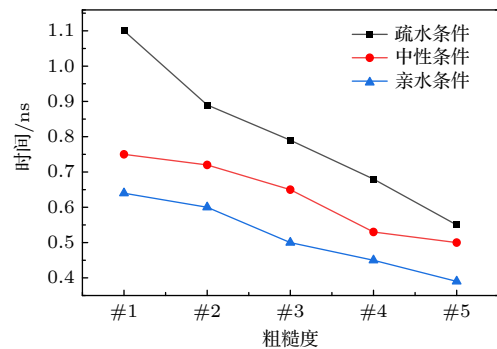


图 16 不同粗糙度和润湿条件下的稳定气泡形成时间
Fig. 16. Stable bubble formation time under different roughness and wetting conditions.

4 结论

综上所述,本文探究了表面粗糙度和润湿条件

对气泡成核的综合影响, 得到主要结论如下.

1) 正弦凸起结构表面上, 凸起与基底平面接触的转角区域或多个凸起围成的凹槽区域是主要的气泡成核位点; 增加凸起数量, 即增加粗糙度, 可增加气泡成核位点, 因而增加表面粗糙度可促进气泡成核.

2) 随着表面亲水性增强, 基底向液相传热的 Kapitza 热阻越小, 传热效率越高, 越有利于气泡成核.

3) 非亲水条件下表面粗糙度增加产生的表面上的初始空隙 (如模型 #5), 与表面粗糙度增加带来的气泡成核位点增加, 协同强化气泡成核; 然而, 有利于初始空隙产生的非亲水条件却不利于基底向液相的传热, 形成对气泡成核的对抗性影响, 因而气泡成核随表面亲水性增强而得以强化的现象归因于亲水性增强对气泡成核的强化要强于疏水条件造成的初始空隙对气泡成核的强化.

参考文献

- [1] Shahmardi A, Tammislae O, Chinappi M, Brandt L 2021 *Int. J. Therm. Sci.* **167** 106980
- [2] Yuan H S, Tan S C, Du W A, Ding S H, Guo C 2018 *Int. J. Heat Mass Transfer* **122** 1198
- [3] Hu Y, Gao H T, Yan Y Y 2025 *J. Ind. Eng. Chem.* **143** 123
- [4] Moiz M, Vadlamudi S R G, Srivastava A 2024 *Int. J. Heat Mass Transfer* **233** 126006
- [5] Arunkumar H S, Hitesh N M, Madhwesh N, Hegde A K, Karanth K V 2023 *Sol. Energy* **266** 112161
- [6] Zhang Y L, Lu S L, Li D L, Duan H Y, Duan C W, Zhang J H, Liu S T 2023 *Chin. J. Chem. Eng.* **62** 168
- [7] Zhang Y L, Duan H Y, Chen E J, Li M, Liu S T 2023 *Langmuir* **39** 1629
- [8] Javier R R, Sevilla A, Carlos M B, Gordillo J M 2015 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **47** 405
- [9] Hsiao C T, Choi J K, Singh S, Chahine G L, Hay T A, Ilinskii Y A, Zabolotskaya E A, Hamilton M F, Sankin G, Yuan F, Zhong P 2013 *J. Fluid Mech* **716** 137
- [10] Yuan H B, Wang Q, Yin X S, Li D, Yue X, Yang B 2021 *J. Nanosci. Nanotechnol.* **21** 1315
- [11] Alder J B, Wainwright E T 1959 *J. Chem. Phys.* **31** 459
- [12] Frenkel D, Smit B, Ratner M A 1997 *Phys. Today* **50** 66
- [13] Wen R F, Li Q, Wang W, Latour B, Calvin H. L, Li C, Lee Y C, Yang R G 2017 *Nano Energy* **38** 59
- [14] Miao S S, Xia G D 2024 *J. Mol. Liq.* **400** 124457
- [15] Liu H Q, Qin X Y, Ahmad S, Tong Q, Zhao J Y 2019 *Int. J. Heat Mass Transfer* **145** 118799
- [16] Zhang S W, Hao F, Chen H M, Yuan W, Tang Y, Chen X 2017 *Appl. Therm. Eng.* **113** 208
- [17] Wang W R, Huang S H, Luo X S 2016 *Int. J. Heat Mass Transfer* **100** 276
- [18] Zhang L Y, Xu J L, Liu G L, Lei J P 2020 *Int. J. Therm. Sci.* **152** 106325
- [19] 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]
- [20] Bai P 2022 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: North China Electric Power University) (in Chinese) [白璞 2022 博士学位论文 (北京: 华北电力大学)]
- [21] Yang H C, Jiang H Y, Cheng Y L, Xing Y W, Cao Y J, Gui X H 2024 *J. Mol. Liq.* **411** 125758
- [22] Shahid M, Ho-Young H 2023 *J. Korean Phys. Soc.* **82** 375
- [23] Zhou W J, Zhang Y H, Wei J J 2022 *Langmuir* **38** 1223
- [24] Liu H Q, Deng W, Ding P, Zhao J Y 2021 *Nucl. Eng. Des.* **382** 111400
- [25] Zhang X S, Fan Z Z, Tong Q L, Fu Y F 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 204701 (in Chinese) [张雪松, 范振忠, 仝其雷, 付沅峰 2024 物理学报 **73** 204701]
- [26] Vladislav A Y, Guillaume A, Molinari J F 2014 *Tribol. Lett.* **56** 171
- [27] Deng W, Ma S H, Li W M, Liu H Q, Zhao J Y 2022 *Int. J. Heat Mass Transfer* **191** 122856
- [28] Berendsen H J C, Grigera J R, Straatsma T P 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 6269
- [29] Peter G K, Igor M S 1994 *Science* **265** 1219
- [30] Ryckaert J P, Ciccotti G, Berendsen H J C 1977 *J. Comput. Phys.* **23** 327
- [31] Hockney R W, Eastwood J W 1988 *Computer Simulation Using Particles* (1st Ed.) (Boca Raton: CRC Press) pp267-269
- [32] Guo C, Ji C, Kong Y L, Liu Z G, Guo L, Yang Y Y 2023 *Materials* **16** 1984
- [33] Schneider T, Stoll E 1978 *Phys. Rev. B* **17** 1302
- [34] Steve P 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [35] Stukowski A 2010 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [36] Humphrey W, Dalke A, Schulten K 1996 *J. Mol. Graphics* **14** 33
- [37] Tang Y Z, Wu L F, Ma L X, Feng S Y, He Y 2022 *Int. J. Therm. Sci.* **171** 107212
- [38] Chen Y J, Yu B, Zou Y, Chen B N, Tao W Q 2020 *Int. J. Heat Mass Transfer* **158** 119850
- [39] Chen Y L, Guo L, Sun W C, Cai N N, Yan Y Y 2023 *Int. J. Multiphase Flow* **169** 104613
- [40] 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]
- [41] Cao Q, Li Z R, Cui Z 2023 *Langmuir* **39** 12754
- [42] Fan X Y, Zhang Z W, Wang Y H, Liu Y S 2022 *Chem. Eng. Mach.* **49** 920 (in Chinese) [樊翔宇, 张周卫, 汪雅红, 刘要森 2022 化工机械 **49** 920]
- [43] Ge S, Chen M 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 110204 (in Chinese) [葛宋, 陈民 2013 物理学报 **62** 110204]
- [44] Liu Z Y, Liu Z Y, Liu R K 2023 *Int. J. Therm. Sci.* **192** 108424

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

YU Mian¹⁾ LI Bingheng¹⁾ MENG Xiangwen¹⁾ WU Lianfeng²⁾
 MA Lianxiang¹⁾ TANG Yuanzheng^{1)†}

1) (*College of Electromechanical Engineering, Qingdao University of Science and Technology, Qingdao 266061, China*)

2) (*State Key Lab of Marine Coatings, Marine Chemical Research Institute Co., Ltd., Qingdao 266072, China*)

(Received 4 June 2025; revised manuscript received 3 September 2025)

Abstract

Bubble nucleation plays a pivotal role in microscale heat conduction, boiling heat transfer, and liquid-vapor phase change processes, because it not only governs heat transfer efficiency but also strongly regulates bubble dynamics. The nucleation processes are highly sensitive to the surface morphology and wettability of solid substrates. However, due to the inherent limitations of traditional experiments in terms of spatial resolution and observation times, revealing the microscopic mechanisms of bubble nucleation on a nanoscale remains a significant challenge—particularly under conditions involving complex surface structures and different wettability states. In this study, molecular dynamics simulations are employed to systematically investigate the mechanisms by which surface roughness and wettability influence bubble nucleation behavior on nanostructured surfaces on an atomic scale. Five copper substrates featuring sinusoidal protrusions are designed to represent different degrees of surface roughness. The sinusoidal profile, characterized by mathematical continuity and smoothness, not only facilitates the observation of bubble coalescence and contact angle evolution but also ensures comparability among models by maintaining identical protrusion height and overall width, thereby keeping the protrusion volume constant. This design allows for direct comparison of bubble growth rates and other physical quantities between different models. In addition, three different wettability conditions, namely hydrophobic, neutral, and hydrophilic, are achieved by modifying the interaction potential between oxygen and copper atoms. During the simulations, a constant heat flux is applied to the bottom copper substrate to trigger off spontaneous bubble nucleation, and local low-density regions are identified using density distribution analysis to track bubble nucleation sites; a piston-like pressure control mechanism is introduced through the top copper plate, and the displacement of this plate with time is used to quantify bubble growth rates under varying roughness and wettability. Additionally, the Kapitza resistance between solid and liquid phases is calculated to evaluate interfacial heat transfer efficiency. The results demonstrate that increasing surface roughness significantly promotes the formation of local low-density cavities, thereby accelerating the bubble nucleation and subsequent growth. As the surface wettability transitions from hydrophobic to hydrophilic, the solid-liquid interfacial thermal resistance decreases, leading to earlier bubble nucleation. Moreover, under hydrophilic conditions, the contact angle of the bubbles increases significantly, indicating enhanced detachment and growth behavior. Overall, the findings of this work advance the fundamental understanding of the microscopic mechanisms of bubble nucleation and provide theoretical guidance and technical references for designing high-efficiency heat transfer structures and tunable fluid-solid interfaces on a nanoscale.

Keywords: molecular dynamics, bubble, roughness, wetting condition

PACS: 47.11.Mn, 47.55.dd, 68.35.Ct, 61.30.Hn

DOI: [10.7498/aps.74.20250717](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250717)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250717](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250717)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52176077).

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



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

余绵 李丙衡 孟祥文 吴连锋 马连湘 唐元政

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

YU Mian LI Bingheng MENG Xiangwen WU Lianfeng MA Lianxiang TANG Yuanzheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 204701 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250717

CSTR: 32037.14.aps.74.20250717

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250717>

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

计入粗糙峰的微纳结构表面水润滑流体动力学仿真

Fluid dynamics simulation on water lubricating performance of micro-/nano-textured surfaces considering roughness structures

物理学报. 2024, 73(11): 114601 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240333>

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>

大规模、量子精度的分子动力学模拟: 以极端条件液态铁为例

Large scale and quantum accurate molecular dynamics simulation: Liquid iron under extreme condition

物理学报. 2023, 72(18): 187102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231258>

冲击波诱导水中纳米气泡塌陷的分子动力学分析

Molecular dynamics analysis of shock wave-induced nanobubble collapse in water

物理学报. 2021, 70(13): 134702 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210058>

光滑及粗糙表面纳米气泡成核与生长动力学行为

Nucleation and growth dynamics of nanobubbles on smooth and rough surfaces

物理学报. 2025, 74(2): 024702 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241487>

分子动力学中的几何相位

Geometric phase in molecular dynamics

物理学报. 2025, 74(15): 150201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250388>