

纳米尺度势能与空化效应协同作用下 汽-液相变的机理研究*

刘仁杰 李玉秀[†] 陈颖 丁瑜

(广东工业大学材料与能源学院, 广州 510006)

(2025 年 7 月 13 日收到; 2025 年 8 月 14 日收到修改稿)

纳米尺度下液体的蒸发因微观效应的影响而显著增强, 其速率甚至超过经典赫兹-克努森方程的预测上限. 这一特性使纳米液体蒸发在太阳能界面蒸发、电子散热及微流控等领域展现出重要应用价值. 然而, 现有研究多聚焦于单一微观效应的影响, 对多种效应协同作用机制的认识仍显不足. 为了准确地描述纳米尺度下液体的相变行为, 本研究以液氩为对象, 系统探讨了纳米尺度下液氩的势能与空化效应协同作用对液氩蒸发的影响机制. 采用分子动力学模拟研究在不同固-液相互作用强度的纳米通道内液氩的蒸发, 结果表明固-液相互作用强度增大使液氩势能减小, 蒸发能垒增大理论上抑制其蒸发. 但由此所形成的毛细压力诱导液氩内部负压而形成的空化效应增大了液氩的蒸发面积, 进而促进液氩的蒸发, 并且还伴随着蒸发模式的转变. 结果表明, 在 $\epsilon_{sl} = 0.5\epsilon_{ll}$, $\epsilon_{sl} = \epsilon_{ll}$, $\epsilon_{sl} = 2\epsilon_{ll}$, $\epsilon_{sl} = 4\epsilon_{ll}$ 四种不同固-液相互作用强度的通道中, 液氩的蒸发速率依次为 3.95×10^{-14} , 3.49×10^{-14} , 3.02×10^{-14} , 2.44×10^{-14} kg/s, 可得出在中等固-液相互作用强度 $\epsilon_{sl} = \epsilon_{ll}$ 下, 二者达到最佳的协同效果, 蒸发速率达到最大值.

关键词: 分子动力学, 纳尺度蒸发, 液氩势能, 空化效应, 协同作用

PACS: 47.11.Mn, 74.78.Na, 68.03.Fg, 68.05.-n

DOI: 10.7498/aps.74.20250930

CSTR: 32037.14.aps.74.20250930

1 引言

研究在纳米尺度下液体的蒸发行为具有重要的科学意义与应用价值. 随着纳米科技的快速发展, 纳米尺度下液体相变过程已成为在环境、电子以及能源等跨学科领域的前沿课题. 纳米尺度下液体的蒸发在太阳能蒸汽产生过程中扮演着至关重要的角色^[1-3], 研究显示, 在纳米尺度下液体的蒸发速率明显高于宏观尺度下的蒸发速率^[4-6]. 利用太阳能界面蒸发技术制取淡水, 可有效缓解因人口增长、环境污染和气候变化导致的全球水资源短缺问题^[7-9]. 该方法绿色可持续, 是未来解决水资源危机

最具潜力的清洁方案之一^[10-13]. 纳米尺度下液体的蒸发对于电子设备热管理的高效热质传递也起着重要的作用, 在很大程度上影响着先进功率器件和电子系统如计算机芯片等的性能^[14-17]. 在现代电子设备的热管理中, 蒸发是一种有效的冷却方式, 通过研究纳米孔隙中液体的蒸发过程可以为基于纳米多孔膜的冷却装置的设计提供新的思路.

已有研究表明, 在纳米尺度下液体的蒸发通量出现了高于 Hertz-Knudsen 模型预测的蒸发极限值. Li 等^[18]采用基于“测试加参考”的混合纳米通道测量方法研究了单个纳米通道中动力学限制的纳米尺度蒸发. 结果表明当液体被限制在纳米通道 (16—67 nm) 内时, 其蒸发通量超过了用 Hertz-

* 国家自然科学基金 (批准号: 52436003) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: Yuxiu.Li@hotmail.com

Knudsen 模型预测的蒸发极限值, 并且随着通道尺寸的减小, 这种效果越明显. 为了解释这种现象, 研究者们从自由能差、毛细压力、空化现象、界面滑移、分离压力以及热力学状态的变化等方面展开了讨论. Fan 等^[19]通过分子动力学模拟的方法研究了纳米通道中液体的蒸发和流动, 发现通道壁面与液体界面处的液体的势能高于通道内部, 导致驱动液-汽相变的吉布斯自由能差更小, 从而使得液体的蒸发通量变大. Maroo 和 Chung^[20]通过分子动力学模拟方法探究在两个充满液体的纳米通道之间形成的弯液面薄膜中所产生的毛细压力与分离压力, 发现在这两种力的共同作用下使得液体内部产生显著的负压, 并且薄膜越薄这种现象越明显. Sharma 和 Debenedetti^[21]研究了在两个非极性疏水表面之间液体蒸发过程的自由能差、表面间距以及液体分子数的关系, 发现通道管径小于 0.8 nm 时蒸发过程会自发产生, 并且蒸发过程中的自由能垒随表面间距的增大而增大. Pati 等^[22]发现在分离压力及固-液界面滑移的作用下, 纳米孔隙中液体蒸发弯液面的薄膜区被延长, 从而导致单位孔隙面积的净蒸发速率增大. Duan 等^[23]通过实验观察到液体在 58 nm 的通道中由于弯液面的表面张力以及钉扎效应, 导致弯液面曲率增大而产生的毛细压力, 使得通道内出现空化现象, 并且发现通道内液体的蒸发速率比空化现象消失后的蒸发速率要大得多. 液体在纳米尺度的限制作用下由于热力学不平衡态其物理性质发生变化, Barati Farimani 和 Aluru^[24]等通过分子动力学模拟研究了碳纳米管中受限水的结构状态, 发现纳米尺度的强限域效

应导致水分子呈现出汽、液、固三相共存的新型物态, 这种独特的相行为促进了蒸汽相的形成.

纳米尺度下液体蒸发行为的研究在微纳流体和芯片散热等领域展现出重要潜力. 然而, 其在计算机等应用中仍面临显著挑战. 现有的理论模型在纳米限域条件下适用性受限, 难以准确描述纳米尺度下液体蒸发动力学行为^[25]. 综上所述, 当液体被限制在纳米尺度时, 存在的各种微观效应会影响液体的蒸发, 但目前的大多数研究还局限在研究纳米尺度下单一微观效应对液体蒸发的影响, 导致不能很好地解释在其应用领域中所遇到的机理性问题. 针对目前研究所存在的不足, 本研究将采用分子动力学模拟方法, 建立纳米通道内液氩蒸发模型, 通过设置不同的固-液相互作用强度, 以研究液氩势能与由于毛细力引起的负压而产生的空化效应的变化规律、两者协同作用对液氩蒸发的影响机制以及在何种情况下两者达到最佳协同状态.

2 模拟方法

本研究采用分子动力学模拟方法^[26], 建立三维的几何模型以研究由上下两个平行的金属铂壁面所构成的纳米通道内液氩的蒸发, 并对原子结构以及运动过程进行可视化以观察液氩的蒸发过程. 模拟系统的物理模型如图 1(a), (b) 所示, 模拟盒子整体尺寸为 3.92 nm(x) \times 62.7 nm(y) \times 5.49 nm(z), 构成纳米通道的固体壁面由 4 层铂原子组成, 其厚度为 0.58 nm、长度为 31.3 nm、宽度为 3.92 nm, 金属铂壁面间的间距, 即纳米通道高度为 4.3 nm.

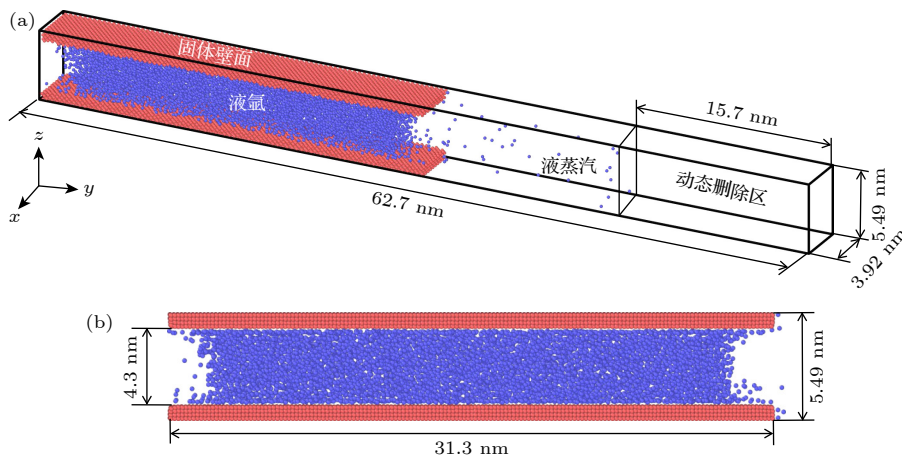


图 1 物理模型结构示意图 (a) 立体视图; (b) 侧视图

Fig. 1. Schematic diagram of the physical model structure: (a) 3D view; (b) side view.

所有铂原子结构均按照面心立方结构 (FCC) 排列, 晶格常数为 0.392 nm. 液氙原子在纳米通道内随机分布, 反映了液氙的热力学行为, 纳米通道和液氙所包含的原子数量分别是 12720 和 7000. 在 x 和 z 方向上应用周期性边界条件, y 方向上应用固定边界条件, 并且在 y 方向的两端边界处设置反射墙从而保证液氙只在纳米通道的右端出口处蒸发. 如图 1(a) 所示, 在模拟盒子的后段区域还设置了动态删除区域, 其尺寸为 3.92 nm(x) \times 15.7 nm(y) \times 5.49 nm(z). 当氙蒸汽原子进入该区域后将被动态删除, 用以模拟蒸汽扩散到外部环境中. 通过统计在蒸发过程中通道内液氙原子剩余的数量来统计氙原子的蒸发数量, 从而计算液氙的蒸发速率.

本研究使用嵌入原子法 (EAM) 描述了纳米通道铂原子之间的相互作用^[27]:

$$E_s = F_a \left(\sum_{i \neq j} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi_{\alpha\beta}(r_{ij}), \quad (1)$$

其中 F_a 为嵌入能, 是原子电子密度 ρ 的函数; φ 是对势相互作用, α 和 β 分别是原子 i 和 j 的元素类型.

固-液以及液-液之间的相互作用采用 12-6 Lennard-Jones 势函数模型:

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2)$$

其中 ε_{ij} 和 σ_{ij} 分别代表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.

本研究中氙原子之间的势能参数分别为 $\varepsilon_{11} = 0.01042$ eV 和 $\sigma_{11} = 0.34$ nm^[28], 该值被广泛地应用于研究液氙的分子动力学模拟当中. 氙原子和铂原子之间的距离参数 $\sigma_{ij} = 0.3085$ nm, 通过设置氙原子与铂原子之间的势能参数为 $\varepsilon_{s1} = 0.5\varepsilon_{11}$, $\varepsilon_{s1} = \varepsilon_{11}$, $\varepsilon_{s1} = 2\varepsilon_{11}$, $\varepsilon_{s1} = 4\varepsilon_{11}$ 以形成不同的固-液相互作用强度, 截断半径 $r_c = 3\sigma_{ij}$.

当模拟系统建立完成后, 利用共轭梯度法使系统能量最小化, 然后对其施加 NVT 系综进行弛豫过程, 使液氙和通道壁面除最外层固定原子以外的区域的温度达到 110 K, 设置时间步长为 5 fs. 在模拟过程中为了避免纳米通道发生变形, 将壁面的最外层铂原子的速度设置为零, 并且不让其振动使其固定在同一位置^[29]. 弛豫进行 100 ps 后, 系统的温度、压力以及能量等参数保持稳定代表弛豫过程结束, 系统达到平衡. 然后, 应用 Nose-Hoover 恒

温器让系统温度保持在 110 K, 使通道内的液氙蒸发, 设置时间步长为 5 fs, 模拟时间为 5 ns, 这段时间内的数据包括液氙的数量、势能分布、密度分布、压力分布等将被输出并用以分析.

3 结果与讨论

本节通过模拟计算揭示了固-液相互作用强度对纳米通道内液氙蒸发行为的影响机制, 发现液氙的蒸发速率受液体势能大小与由于表面张力和曲率共同作用诱导的液氙内部负压而产生的空化效应的协同作用影响. 具体而言, 固-液相互作用强度通过改变液氙的势能大小进而改变吉布斯自由能垒影响蒸发过程, 而空化效应则通过负压场诱导的空化气泡增大了蒸发面积从而促进蒸发, 当固-液相互作用强度为 $\varepsilon_{s1} = \varepsilon_{11}$ 时两者达到最佳协同状态, 此时蒸发速率最大.

在机理研究方面, 计算了 4 种不同固-液相互作用强度下液氙势能的大小变化及其分布特征. 基于经典热力学理论, 结合吉布斯自由能垒模型, 分析了液氙势能变化对蒸发过程的影响机制. 并系统考察了不同固-液相互作用强度条件下, 由毛细压力引起的液氙内部负压及空化效应, 分析了负压分布特征、空化气泡的时间演化规律, 以及气泡位置与局部负压峰值区域的对应关系. 通过配位数分析量化了空化气泡溃灭前包含的蒸汽原子数量, 证实空化效应对蒸发的促进作用. 最后, 我们提出了液氙势能与空化效应的协同作用及其对液氙蒸发的影响机制.

3.1 蒸发速率的对比

本研究通过统计蒸发过程中纳米通道内液氙原子剩余数量来计算液氙的蒸发速率. 图 2 所示为 4 种不同固-液相互作用强度条件下, 纳米通道内液氙原子数量在 2.5 ns 蒸发过程中的动态变化. 之所以选取 2.5 ns 作为蒸发过程分析的时间长度, 主要基于两方面的考量. 首先, 在不同固-液相互作用势能条件下, 液氙中产生的空化气泡的存在时间均小于 2.5 ns. 其次, 为深入探究液体势能与空化效应的协同作用对液氙蒸发的影响机制, 必须将分析时段限定在空化气泡存续期间. 通过分析 2.5 ns 的蒸发过程后不同固-液相互作用强度条件下通道内剩余的液氙原子数量, 计算得到了相应的蒸发

量, 进而计算出不同固-液相互作用强度下液氩的蒸发速率, 相关结果如图 3 所示.

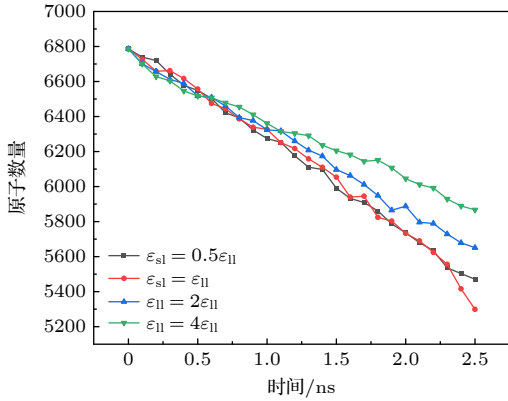


图 2 不同的固-液相互作用强度下液氩原子数量随时间变化

Fig. 2. Time-dependent variation in the number of argon atoms under different solid-liquid interaction strengths.

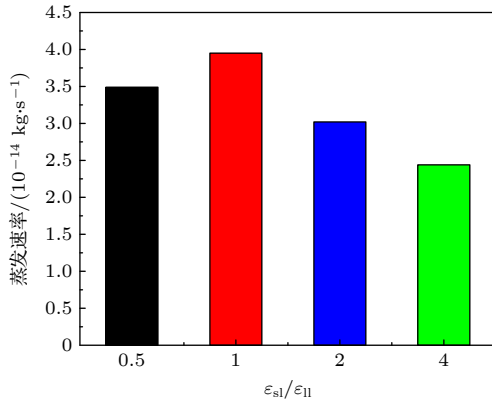


图 3 不同的固-液相互作用强度下液氩的蒸发速率

Fig. 3. Evaporation rate of liquid argon under different solid-liquid interaction strengths.

在图 2 中, 液氩原子数量随时间的变化并非呈现出线性递减趋势, 而是伴随小幅波动. 这种波动现象表明, 液氩的蒸发过程实际上是一个蒸发与冷凝同时存在的动态双向过程. 虽然液氩原子总体数量呈现递减趋势, 但由于气相原子可能重新凝结返回液相, 导致原子数量在局部时间尺度上出现涨落. 同时, 从图 3 可以看出, 当固-液相互作用强度 $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{ll}$ 时, 蒸发速率达到最大值, 然后依次是固-液相互作用强度 $\varepsilon_{sl} = 0.5\varepsilon_{ll}$, $\varepsilon_{sl} = 2\varepsilon_{ll}$ 以及 $\varepsilon_{sl} = 4\varepsilon_{ll}$, 其蒸发速率分别为 3.95×10^{-14} , 3.49×10^{-14} , 3.02×10^{-14} , 2.44×10^{-14} kg/s. 这一变化规律表明, 随着固-液相互作用强度的增大, 液氩的蒸发速率并非单调变化, 而是在中等固-液相互作用强度 $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{ll}$ 下达到最大值. 为深入研究这一现象, 将在 3.2 节

和 3.3 节中从液氩的势能和空化效应这两个角度出发对图 2 和图 3 中的结果进行进一步分析.

3.2 液氩势能对蒸发的影响

为了探究不同的固-液相互作用强度对液氩势能和密度的大小以及分布的影响, 在模拟中采用如图 4 所示的计算方法.

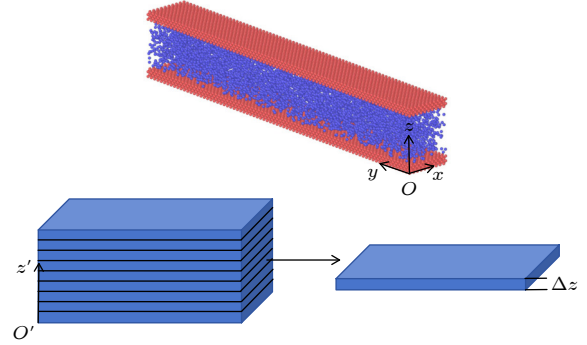


图 4 纳米通道内液氩势能与密度分布的计算原理图

Fig. 4. Schematic diagram of the computational methodology for potential energy and density distributions of liquid argon in nanochannels.

将纳米通道内的液氩区域沿着通道高度 z 方向离散为独立的单元格, 再计算每一个单元格内氩原子的平均势能以及液氩的平均密度, 计算公式分别如下:

$$U = \frac{1}{\Delta N} \sum_{i=1}^N U_i, \quad (3)$$

$$\rho(z) = m\Delta N/V, \quad (4)$$

(3) 式中, U_i 为单元格中第 i 个氩原子的势能, ΔN 为单元格中氩原子的数量; (4) 式中, m 为氩原子的质量, V 为单元格的体积.

在模拟液氩的蒸发过程中, 将通道内的液氩沿着通道高度方向划分成厚度 Δz 为 $\sigma_{ll}/7$ 的单元格, 并且在 2.5 ns 的蒸发过程中采集 50000 个独立样本的液氩原子势能和液氩密度来计算时间平均值. 最后, 将模拟计算得出的每一个单元格内液氩原子的平均势能以及液氩的平均密度整合后, 即得到液氩原子和液氩沿通道高度方向势能和密度的一维分布如图 5 和图 6 所示.

为了更直观地展示不同固-液相互作用强度对液氩原子势能的空间分布影响, 还通过可视化获得了沿通道高度方向的液氩原子势能分布云图如图 7 所示.

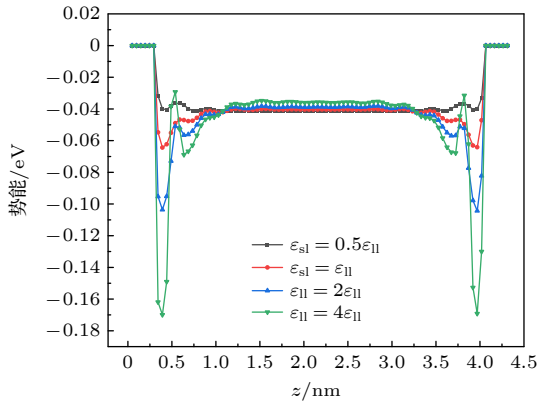


图 5 液氩原子沿通道高度方向的势能分布

Fig. 5. Potential energy profile of argon atoms along the channel height direction.

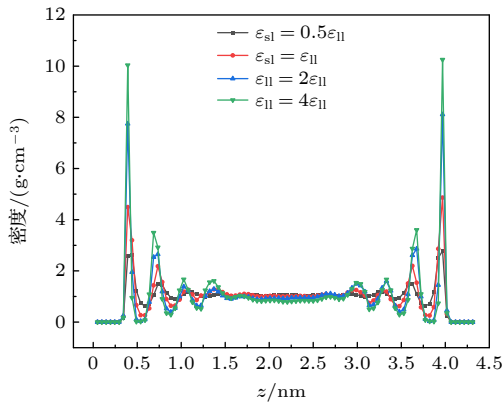


图 6 液氩沿通道高度方向的密度分布

Fig. 6. Density profile of liquid argon along the channel height direction.

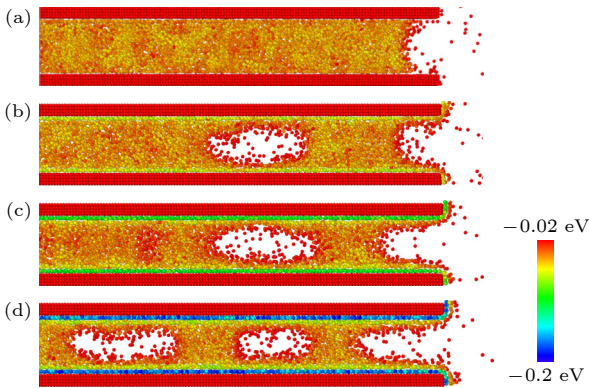


图 7 液氩原子沿通道高度方向的势能分布云图 (a) $\varepsilon_{sl} = 0.5\varepsilon_{11}$; (b) $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{11}$; (c) $\varepsilon_{sl} = 2\varepsilon_{11}$; (d) $\varepsilon_{sl} = 4\varepsilon_{11}$

Fig. 7. Contour plots of liquid argon atomic potential energy distribution along the channel height direction: (a) $\varepsilon_{sl} = 0.5\varepsilon_{11}$; (b) $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{11}$; (c) $\varepsilon_{sl} = 2\varepsilon_{11}$; (d) $\varepsilon_{sl} = 4\varepsilon_{11}$.

通过观察如图 5 所示的液氩原子沿通道高度方向的势能分布可以得出, 液氩原子势能的大小在壁面附近 1 nm 的范围内呈现出显著波动, 且波动

幅度随着与壁面距离的增大而减小, 最终在通道中心 2.33 nm 区域内趋于稳定. 值得注意的是, 随着固-液相互作用强度的增大, 壁面附近区域液氩原子的势能波动变得更为剧烈, 同时势能的大小显著降低. 这一结果与图 6 所展示的液氩的密度分布具有高度相关性, 两者均在壁面附近 1 nm 的范围内呈现出明显的波动, 且波动幅度和密度的值均随着固-液相互作用强度的增大而增大; 而在通道中心区域, 两者均呈现出稳定的分布特征.

这种分布规律主要源于壁面铂原子与氩原子间的范德瓦耳斯作用力. 在模拟计算中所设置的作用力范围 $r_c = 3\sigma_{11}$ 为 1 nm, 在近壁面区域, 较强的范德瓦耳斯作用力导致液氩原子排列地更为致密, 原子间的间距减小, 从而形成了较高的局部密度. 其具体表现为在近壁面 1 nm 区域内由于受固-液相互作用强度影响明显, 液氩的密度显著增大, 势能显著减小, 并且出现强烈波动; 而在通道中心区域 2.33 nm 区域内由于受壁面的影响较小, 液氩的密度分布均匀, 势能分布平稳.

根据分子动力学理论, 汽-液界面始终存在着动态的双向质量交换过程. 其中, 蒸发过程是指液相中的原子或分子通过获得足够多的能量用以克服表面势垒而跃迁至汽相, 与之对应的逆向过程则称为冷凝. 从热力学的角度来分析, 这一相变过程的阻力源于两相之间的吉布斯自由能差 ΔG , 其具体关系可表述为

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S = \Delta(U + PV) - T\Delta S, \quad (5)$$

式中, ΔH 为汽-液相之间的焓差, T 为液相的温度, ΔS 为汽-液相之间的熵差, ΔU 为汽-液相之间的内能差, P 为压力, V 为体积.

在液体蒸发过程中, 系统的吉布斯自由能差 ΔG 直接决定了相变过程的难易程度. 当蒸发过程中汽-液两相的吉布斯自由能差 ΔG 越大时, 液体原子脱离液相所需克服的能量势垒相应越大, 蒸发过程中液体原子逃逸难度越大. 从图 5 和图 7 中液氩原子沿通道高度方向的势能分布可以看出, 随着固-液相互作用强度的增大, 液氩原子在壁面附近约 1 nm 范围内的势能显著降低; 而在通道中心区域约 2.33 nm 范围内, 势能的大小相差无几. 这一结果表明, 固-液相互作用强度的增强会导致通道内液氩原子的平均势能整体呈下降趋势. 而液氩原子势能的降低会增大汽-液两相的内能差 ΔU , 进

而导致相变过程中的吉布斯自由能差 ΔG 增大, 这意味着液氩原子需要克服更高的能量势垒才能从液相蒸发, 理论上会使蒸发过程更加困难. 然而, 图 3 的结果显示, 随着固-液相互作用强度的增强, 液氩的蒸发速率并未呈现出单调递减趋势, 而是在中等固-液相互作用强度 $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{ll}$ 下出现最大值. 为了阐明这一现象的机制, 3.3 节将从纳米通道内液氩弯液面的表面张力以及曲率引发的毛细负压出发, 系统分析由此导致的液氩内部空化效应及其对蒸发的影响机制.

3.3 空化效应及其对蒸发的影响

与宏观状态下的体相液体不同, 在纳米限域尺度下, 液体因弯液面表面张力和曲率共同作用产生的毛细压力而受到显著的拉伸应力, 使得在液体内部形成负压状态. 根据经典毛细压力理论, 毛细压力 P_c 由弯液面的曲率 K 以及表面张力 γ 所决定. 与此同时, 液体内部的压力 P_l 等于蒸汽压力 P_v 与毛细压力 P_c 的差值, 其数学表达式如下:

$$P_c = \gamma K, \quad K = 1/R, \quad (6)$$

$$P_l = P_v - P_c, \quad (7)$$

式中 R 为弯液面的曲率半径.

当液体内部压力持续降低至其理论拉伸强度极限, 则在液体内部将产生空化效应^[30]. Doebele 等^[31] 通过实验直接观察到纳米多孔材料中液体的均质空化成核现象, 而在本研究中则探讨了不同强度条件下空化效应的发生以及空化效应对液体蒸发速率的影响. 通过模拟计算考察了 4 种不同固-液相互作用强度条件下, 液氩在纳米通道内沿通道

长度方向的压力分布特征, 通过计算各单元格内原子应力张量分量之和除以单元格体积在时间和空间上的平均值来确定压力分布, 其计算公式如下:

$$P_{\text{bin}} = -\frac{\sum_{n=1}^{N_{\text{bin}}} (S_{xx} + S_{yy} + S_{zz})}{3V_{\text{bin}}}, \quad (8)$$

式中 S_{xx} , S_{yy} 和 S_{zz} 为单个氩原子在 x , y 和 z 三个方向上的正应力张量; V_{bin} 为单元格的体积, N_{bin} 为单元格中氩原子的个数.

计算结果如图 8—图 11 所示, 分别展示了固-液相互作用强度为 $\varepsilon_{sl} = 0.5\varepsilon_{ll}$, $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{ll}$, $\varepsilon_{sl} = 2\varepsilon_{ll}$, $\varepsilon_{sl} = 4\varepsilon_{ll}$ 条件下, 液氩在纳米通道内对应时刻所产生空化气泡的形态以及沿通道长度方向的压力分布.

图 8(a), (b) 所示为固-液相互作用强度为 $\varepsilon_{sl} = 0.5\varepsilon_{ll}$ 条件下, 通道内液氩在 0, 1500, 3000 ps 三个时刻均未出现空化现象, 且汽-液界面保持近似平面状态. 此外, 沿通道长度方向液氩内部的压力分布波动幅度极小, 整体趋于均匀, 其数值为 4 bar (1 bar = 10^5 Pa) 左右. 这是因为在固-液相互作用强度较低的情况下通道壁面对液氩的吸附作用小, 蒸发过程中固-液界面发生滑移, 汽-液界面逐渐向通道内部收缩, 使得通道内液氩所形成的汽-液界面曲率极小, 可近似视为平面. 这种几何特性使得界面所产生的毛细压力几乎可以忽略不计, 导致液氩内部压力与外部蒸汽压力基本相等, 因此不会产生空化现象. 相比之下, 如图 9(a) 所示, 当固-液相互作用强度为 $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{ll}$ 时, 壁面的润湿性增加, 在出口处可观察到具有吸附层, 弯液面发生钉扎效应^[32],

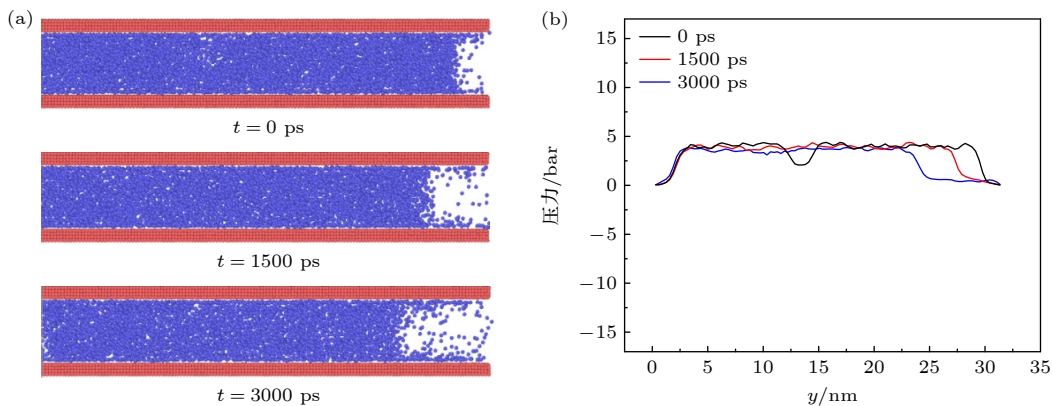


图 8 固-液相互作用强度为 $\varepsilon_{sl} = 0.5\varepsilon_{ll}$ 时, 对应时刻 (a) 通道内液氩的状态, 以及 (b) 通道内液氩压力沿通道长度方向的分布
Fig. 8. (a) Snapshots of liquid argon configuration within the channel and (b) corresponding pressure profile along the channel's longitudinal (y) axis under solid-liquid interaction $\varepsilon_{sl} = 0.5\varepsilon_{ll}$.

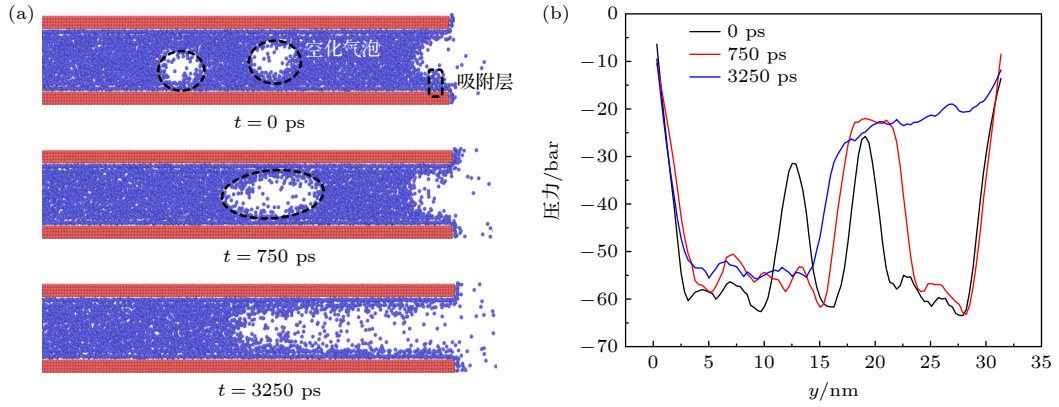


图 9 固-液相互作用强度为 $\epsilon_{sl} = \epsilon_{ll}$ 时, 对应时刻 (a) 通道内液氩的状态, 以及 (b) 通道内液氩压力沿通道长度方向的分布
 Fig. 9. (a) Snapshots of liquid argon configuration within the channel and (b) corresponding pressure profile along the channel's longitudinal (y) axis under solid-liquid interaction $\epsilon_{sl} = \epsilon_{ll}$.

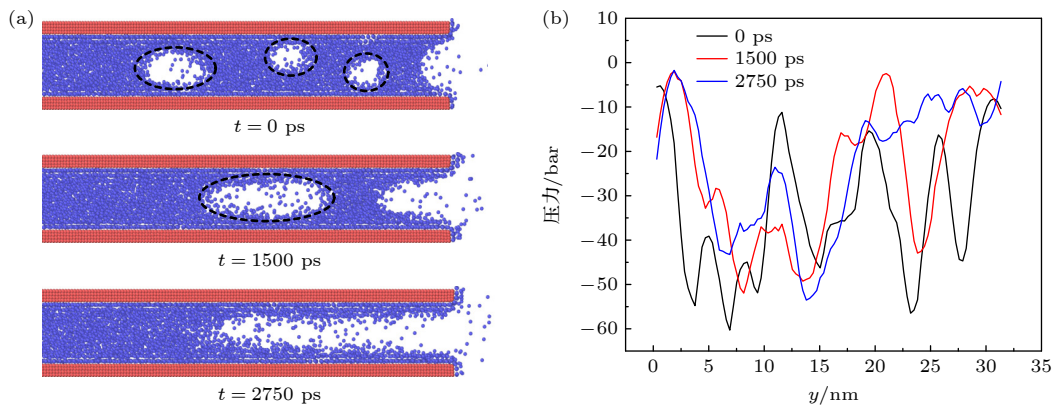


图 10 固-液相互作用强度为 $\epsilon_{sl} = 2\epsilon_{ll}$ 时, 对应时刻 (a) 通道内液氩的形态, 以及 (b) 通道内液氩压力沿通道长度方向的分布
 Fig. 10. (a) Snapshots of liquid argon configuration within the channel and (b) corresponding pressure profile along the channel's longitudinal (y) axis under solid-liquid interaction $\epsilon_{sl} = 2\epsilon_{ll}$.

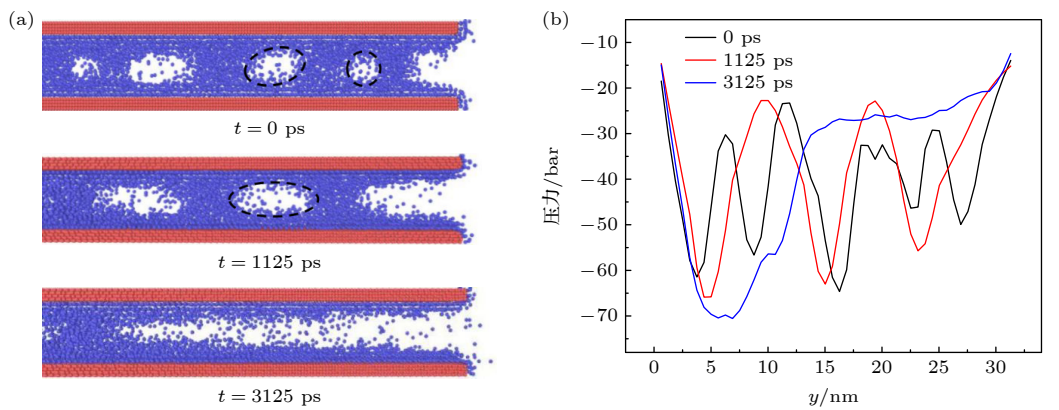


图 11 固-液相互作用强度为 $\epsilon_{sl} = 4\epsilon_{ll}$ 时, 对应时刻 (a) 通道内液氩的形态, 以及 (b) 通道内液氩压力沿通道长度方向的分布
 Fig. 11. (a) Snapshots of liquid argon configuration within the channel and (b) corresponding pressure profile along the channel's longitudinal (y) axis under solid-liquid interaction $\epsilon_{sl} = 4\epsilon_{ll}$.

通道内液氩所形成的汽-液界面出现了明显的弯曲, 并且在 0 ps 时发生气泡成核. 随着蒸发过程进行至 750 ps 时, 这两个空化气泡逐渐合并形成一个更大的气泡. 此后, 该气泡持续增长, 最终与弯液

面接触并融合, 标志着空化现象的消失. 图 9(b) 显示, 液氩内部出现了显著的负压区域, 最大负压值达到了 -66 bar, 这一结果也证实了液氩内部空化现象的产生. 并且从压力分布曲线可以看出, 在

0 ps 时曲线呈现出两个波峰, 在 750 ps 时有一个波峰, 而在 3250 ps 空化现象消失后波峰消失, 压力分布趋于均匀. 这些压力波峰的位置对应于空化气泡的生成区域, 而波谷则与弯液面以及空化气泡周围的高张力区相关.

关于液氩压力峰值与谷值所对应的空间位置, 成因在于空化气泡表面与弯液面具有相似的力学行为, 表面张力与曲率共同作用诱导的毛细压力, 导致气泡周围形成局部负压. 当固-液相互作用强度为 $\epsilon_{sl} = 2\epsilon_{ll}$ 和 $\epsilon_{sl} = 4\epsilon_{ll}$ 时, 其变化规律与上述情况一致. 如图 10(a), (b) 所示, 在给定的固-液相互作用强度条件下, 通道内的液氩呈现出明显的弯液面特征. 在 0 ps 时液氩内部气泡成核. 随着蒸发过程的持续进行, 这些空化气泡逐渐发生合并, 并最终与弯液面融合. 压力分布图显示, 在液氩内部出现的最大负压值达到 -61 bar, 且压力波峰位置与空化气泡的空间分布具有明确的对应关系.

当液体内部发生空化现象时, 产生的空化气泡会在液体内部形成大量新的汽-液界面, 从而显著增大液体的有效蒸发面积, 这一过程使得更多液氩原子能够同时参与相变过程, 进而促进液氩的蒸发. 为定量表征空化气泡对液氩蒸发过程的促进作用, 采用配位数分析法来判断氩原子的相态. 通过设定临界配位数阈值, 将配位数低于该阈值的氩原子识别为蒸汽相原子并标记出来. 基于上述方法, 观察不同固-液相互作用强度条件下空化气泡溃灭前内部蒸汽相氩原子数量, 实现了对空化效应促进液氩蒸发的定量表征, 模拟结果如图 12 所示.

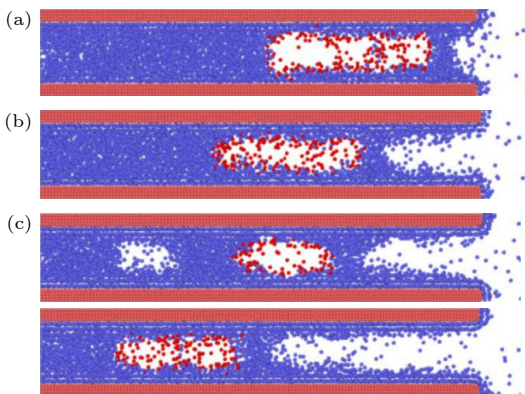


图 12 不同固-液相互作用强度条件下空化气泡溃灭前气泡内的蒸汽原子 (a) $\epsilon_{sl} = \epsilon_{ll}$; (b) $\epsilon_{sl} = 2\epsilon_{ll}$; (c) $\epsilon_{sl} = 4\epsilon_{ll}$
Fig. 12. Vapor atoms within cavitation bubbles immediately before collapse under different solid-liquid interaction strengths: (a) $\epsilon_{sl} = \epsilon_{ll}$; (b) $\epsilon_{sl} = 2\epsilon_{ll}$; (c) $\epsilon_{sl} = 4\epsilon_{ll}$.

图 12(a)–(c) 中的红色原子分别代表固-液相互作用强度为 $\epsilon_{sl} = \epsilon_{ll}$, $\epsilon_{sl} = 2\epsilon_{ll}$, $\epsilon_{sl} = 4\epsilon_{ll}$ 条件下空化气泡溃灭前气泡内部所包含的氩蒸汽原子, 统计结果表明其数量依次为 230 个、205 个和 244 个. 不同固-液相互作用强度下空化效应促进液氩蒸发差异的原因可解释如下: 当固-液相互作用强度为 $\epsilon_{sl} = 4\epsilon_{ll}$ 时, 由于强烈的固-液相互作用导致空化气泡未发生相互合并, 而是各自独立与弯液面结合后破裂. 气泡维持最大单体表面积, 气液界面面积总和最大, 因此空化效应对液氩蒸发的促进最显著. 当固-液相互作用强度为 $\epsilon_{sl} = \epsilon_{ll}$ 和 $\epsilon_{sl} = 2\epsilon_{ll}$ 时, 在相对较弱的固-液相互作用下空化气泡先发生合并, 而后再破裂, 因此两者所产生的空化气泡的面积相当, 但由于固-液相互作用强度为 $\epsilon_{sl} = \epsilon_{ll}$ 时液氩的平均势能较大, 因此其空化气泡内氩原子的蒸发数量大于固-液相互作用强度为 $\epsilon_{sl} = 2\epsilon_{ll}$ 时, 对蒸发的促进作用更明显.

基于上述对几种不同固-液相互作用强度条件下, 纳米通道中液氩内部所产生的空化效应对蒸发数量促进的定量计算, 结合图 2 中 4 种不同固-液相互作用强度条件下液氩的总蒸发数量, 通过计算可得出不同固-液相互作用强度条件下纳米通道中液氩在弯液面处的蒸发数量, 以及弯液面处和空化气泡的蒸发数量占总蒸发数量的比值, 结果如图 13 和图 14 所示.

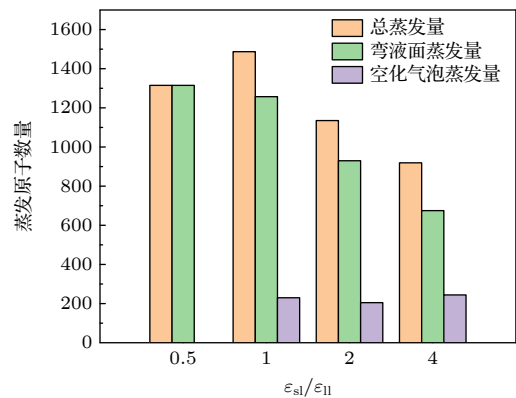


图 13 不同固-液相互作用强度条件下各部分的蒸发数量
Fig. 13. Evaporation quantities of different components under various solid-liquid interaction strengths.

由图 13 可知, 随着固-液相互作用强度的增大, 空化气泡的蒸发量首先经历了从有到无的过程, 随后变化不大; 而由于液氩原子的平均势能减小, 导致弯液面处的蒸发数量逐渐减小, 所以在固-

液相互作用强度为 $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{ll}$ 时蒸发量最大. 图 14 的数据则揭示了蒸发模式转变过程. 随着固-液相互作用强度的增大, 可以观察到两个显著的相反趋势. 一方面, 弯液面处蒸发数量的占比呈现单调递减; 另一方面, 空化气泡蒸发数量的占比则持续上升. 这种此消彼长的关系清晰地表明, 随着固-液相互作用强度的增大, 液氩的蒸发模式发生了转变, 由弯液面主导的蒸发模式逐渐削弱, 而空化气泡对蒸发的作用变得愈加明显.

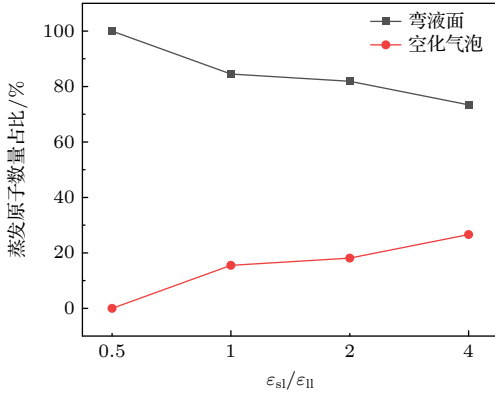


图 14 不同固-液相互作用强度条件下弯液面与空化气泡蒸发数量占比

Fig. 14. Proportion of evaporation quantities at meniscus and cavitation bubbles under various solid-liquid interaction strengths.

考虑空化效应对液氩蒸发的促进作用, 并结合液体势能的影响, 我们讨论 4 种不同固-液相互作用强度条件下液氩的蒸发速率变化规律. 当固-液相互作用强度增大时, 固体壁面对液氩原子的束缚作用增强, 导致液氩的势能降低, 蒸发所需克服的能垒随之升高, 液氩原子从液相逃逸的难度增大. 然而, 当固-液相互作用强度增大到一定程度时, 弯液面的曲率显著增大, 产生足够大的毛细压力使液氩内部形成局部负压, 从而诱导空化现象的发生. 空化气泡的生成不仅改变了液氩的局部压力分布, 还增大了液氩的有效蒸发面积, 使得更多的液氩能够同时参与蒸发过程. 因此, 尽管固-液相互作用强度增大抑制了液氩原子的逃逸, 但空化效应通过增大蒸发面积, 对液氩蒸发起到了一定的促进作用. 这也解释了图 3 中不同固-液相互作用强度条件下液氩蒸发速率的变化趋势. 尽管当固-液相互作用强度为 $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{ll}$ 时液氩的势能较小, 理论上会抑制其蒸发, 但由于固-液相互作用强度的增大诱导的空化效应增大了蒸发面积, 使得 $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{ll}$ 条件下的蒸

发速率反而超过了 $\varepsilon_{sl} = 0.5\varepsilon_{ll}$ 条件下的蒸发速率. 而随着固-液相互作用强度进一步增大至 $\varepsilon_{sl} = 2\varepsilon_{ll}$ 和 $\varepsilon_{sl} = 4\varepsilon_{ll}$ 时, 液氩的势能显著降低, 导致蒸发过程需要克服的能垒过大. 此时, 虽然空化气泡仍能提供一定的蒸发促进作用, 但其效应已无法抵消液体势能降低带来的抑制作用, 因此整体蒸发速率呈现下降趋势. 结合以上分析可知, 当固-液相互作用强度为 $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{ll}$ 时, 液氩势能与空化效应达到最佳协同状态, 此时蒸发速率达到最大值.

3.4 空化效应的理论验证

为了验证上述模拟得到的液氩内部负压值的合理性, 采用密度截止法确定弯液面的空间位置与几何轮廓^[33]. 基于获得的弯液面形貌特征, 首先计算其表面张力与曲率半径, 随后通过 (6) 式 Young-Laplace 方程求解对应的毛细压力, 最终推导出液氩内部的理论负压值. 这一理论计算结果将与分子动力学模拟结果进行对比分析, 从而实现模拟数据的可靠性验证. 其计算的原理如下图 15 所示.

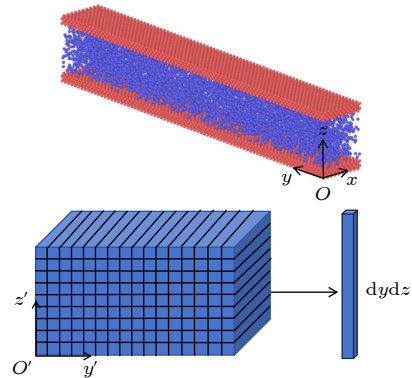


图 15 确定液氩弯液面几何轮廓的计算原理图

Fig. 15. Schematic diagram of the computational methodology for determining the geometric profile of the liquid argon meniscus.

沿通道长度方向 y 轴和高度方向 z 轴将通道内的液氩区域离散为 $0.2 \text{ nm} \times 0.2 \text{ nm}$ 的正方形网格. 通过统计蒸发过程中各网格内液氩密度的时间平均值, 采用密度截止值法确定汽-液界面位置, 当网格内液氩的密度低于液氩体相密度的 50% 时, 即判定该网格处于汽-液界面位置, 并通过曲线拟合得到弯液面轮廓. 如图 16(a)—(c) 所示, 对应的固-液相互作用强度分别为 $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{ll}$, $\varepsilon_{sl} = 2\varepsilon_{ll}$ 和 $\varepsilon_{sl} = 4\varepsilon_{ll}$. 基于拟合结果, 进一步计算了弯液面的曲率半径.

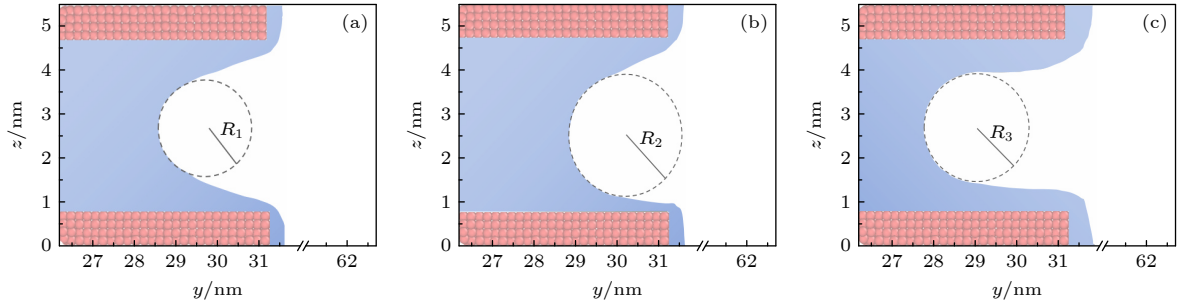

 图 16 不同固-液相互作用强度下弯液面的几何轮廓及其曲率半径 (a) $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{II}$; (b) $\varepsilon_{sl} = 2\varepsilon_{II}$; (c) $\varepsilon_{sl} = 4\varepsilon_{II}$

Fig. 16. Geometric profile of the meniscus and its radius of curvature under different solid-liquid interaction strengths: (a) $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{II}$; (b) $\varepsilon_{sl} = 2\varepsilon_{II}$; (c) $\varepsilon_{sl} = 4\varepsilon_{II}$.

此外, 还计算了弯液面处的表面张力. 如(9)式—(11)式所示, 基于 x , y 和 z 三个方向的正应力张量, 并除以网格单元的体积, 从而分别求得 3 个方向上的正应力:

$$P_{xx} = -\frac{S_{xx}}{V_{bin}}, \quad (9)$$

$$P_{yy} = -\frac{S_{yy}}{V_{bin}}, \quad (10)$$

$$P_{zz} = -\frac{S_{zz}}{V_{bin}}. \quad (11)$$

垂直于液面方向的法向应力 $P_N = P_{yy}$, 液面上的切向应力 P_T 通过平均 x 和 z 两个方向上的正应力 P_{xx} 和 P_{zz} 获得, 即 $P_T = (P_{xx} + P_{zz})/2$. 然后通过法向应力与切向应力的差值 $P_N - P_T$ 对通道长度方向 y 进行积分求得弯液面的表面张力, 计算公式为

$$\gamma = \int_{y_{min}}^{y_{max}} [P_N(y) - P_T(y)] dy. \quad (12)$$

表 1 所列上述计算结果, 包括不同固-液相互作用强度条件下弯液面的曲率半径、表面张力、毛细压力以及相应的蒸汽压力和液体负压.

表 1 不同固-液相互作用强度下液氩的理论物理性质
Table 1. Theoretical physical properties of liquid argon under different solid-liquid interaction intensities.

固-液势能 强度 ε_{sl}	R/nm	$\gamma/(\text{mN}\cdot\text{m}^{-1})$	P_c/bar	P_v/bar	P_l/bar
ε_{II}	1.25	9.15	73.20	3.22	-69.98
$2\varepsilon_{II}$	1.23	9.3	75.61	2.82	-72.79
$4\varepsilon_{II}$	1.24	9.24	74.52	2.99	-71.53

对比表 1 中 3 种固-液相互作用强度条件下液氩内部压力 P_l 的理论值与模拟计算得出的负压值, 可以看出两者的吻合度较好, 证明了模拟计算所得出的通道中液氩内部负压值的可靠性.

4 结 论

本研究采用分子动力学模拟方法, 系统探究了纳米受限空间内液氩的蒸发动力学行为. 通过调控固-液相互作用势能强度, 分析了固-液相互作用强度变化导致的液氩势能变化与空化效应发生的内在关联, 揭示了二者协同作用对液氩相变过程的影响机制, 主要结论总结如下:

1) 通道壁面对液氩原子的吸附作用较强, 随着固-液相互作用的增强, 壁面附近的液氩原子聚集程度提高, 原子间距减小, 密度显著增大; 而通道中间区域受壁面作用的影响较弱, 液氩密度大小一致且均匀分布. 在壁面附近, 固-液相互作用增强不仅直接降低了液氩原子的势能, 同时因原子间距缩小, 液氩原子间的相互作用增强, 进一步促使该区域的势能下降, 因此液氩的平均势能会减小, 蒸发过程中所需克服的自由能垒增大.

2) 随着固-液相互作用强度的增大, 通道内液氩弯液面的曲率逐渐增大, 由表面张力与曲率共同作用产生的毛细压力诱导液氩内部形成负压, 进而引发空化效应. 空化气泡在生长过程中会增大汽-液接触面积, 使更多的液氩同时参与蒸发, 有效促进了蒸发过程. 并且弯液面蒸发占比持续降低, 而空化气泡蒸发占比明显升高, 呈现此消彼长的变化趋势. 这一转变表明液氩蒸发模式的弯液面主导效应持续弱化, 而空化气泡对蒸发的贡献增大.

3) 得出液氩势能与空化效应的协同作用机制, 即固-液相互作用强度增大会导致液氩势能减小, 从而使得液氩原子从液相逃逸的难度增大. 但同时会使液氩弯液面的曲率增大, 由此引起的毛细压力增大诱导液氩内部产生负压从而形成空化效应. 空化气泡的成核与生长有效增大了蒸发面积, 对蒸发

起到一定的促进作用. 因此随着固-液相互作用强度的增大, 液氩蒸发速率并非呈现出递减的规律, 而是在固-液相互作用强度为 $\varepsilon_{sl} = \varepsilon_{ll}$ 条件下蒸发速率最大, 这也表示在此固-液相互作用强度下两种效应达到最佳协同状态.

参考文献

- [1] Cheng H F, Hu Y A, Zhao J F 2009 *Environ. Sci. Technol.* **43** 240
- [2] Lu W Q, Xie S H, Zhou W S, Zhang S H, Liu A L 2008 *Open Environ. Sci.* **2** 1
- [3] Huang J C, Zhang Y J, Bing H J, Peng J, Dong F F, Gao J F, Arhonditsis G B 2021 *Water Res.* **201** 117309
- [4] Tao P, Ni G, Song C Y, Shang W, Wu J B, Zhu J, Deng T 2018 *Nat. Energy* **3** 1031
- [5] Vélez-Cordero J R, Hernandez-Cordero J 2015 *Int. J. Therm. Sci.* **96** 12
- [6] Kashyap V, Ghasemi H 2020 *J. Mater. Chem. A* **8** 7035
- [7] Ni G, Li G, Boriskina S V, Li H X, Yang W L, Zhang T J, Chen G 2016 *Nat. Energy* **1** 16126
- [8] Ghasemi H, Ni G, Marconnet A M, Loomis J, Yerci S, Miljkovic N, Chen G 2014 *Nat. Commun.* **5** 4449
- [9] Neumann O, Urban A S, Day J, Lal S, Nordlander P, Halas N J 2013 *ACS nano* **7** 42
- [10] Dai X, Yang F, Yang R, Lee Y C, Li C 2013 *Int. J. Heat Mass Transf.* **64** 1101
- [11] Dai X M, Yang F H, Yang R G, Huang X Y, Rigdon W A, Li X D, Li C 2014 *Appl. Phys. Lett.* **105** 191611
- [12] Huang Z, Chen B, Mo X B, Yang X L, Yu L Y, Hu X J, Liu K 2021 *Adv. Mater. Interfaces* **8** 2100660
- [13] Lee W C, Ronghe A, Villalobos L F, Huang S, Dakhchoune M, Mensi M, Agrawal K V 2022 *ACS Nano* **16** 15382
- [14] Lee P S, Garimella S V 2008 *Int. J. Heat Mass Transf.* **51** 789
- [15] Steinke M E, Kandlikar S G 2004 *J. Heat Transf.* **126** 518
- [16] Bar-Cohen A, Sheehan J R, Rahim E 2012 *Microgravity Sci. Technol.* **24** 1
- [17] Lee J, Mudawar I 2005 *Int. J. Heat Mass Transf.* **48** 941
- [18] Li Y X, Alibakhshi M A, Zhao Y H, Duan C H 2017 *Nano Lett.* **17** 4813
- [19] Fan J C, Wu H A, Wang F C 2020 *Phys. Fluids* **32** 12001
- [20] Maroo S C, Chung J N 2011 *Nanoscale Res. Lett.* **6** 72
- [21] Sharma S, Debenedetti P G 2012 *J. Phys. Chem. B* **116** 13282
- [22] Pati S, Som S K, Chakraborty S 2013 *Int. J. Heat Mass Transf.* **64** 304
- [23] Duan C H, Karnik R, Lu M C, Majumdar A 2012 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **109** 3688
- [24] Barati Farimani A, Aluru N R 2016 *J. Phys. Chem. C* **120** 23763
- [25] Chandra A, Keblinski P 2020 *J. Chem. Phys.* **153** 124505
- [26] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [27] Foiles S M, Baskes M I, Daw M S 1986 *Phys. Rev. B* **33** 7983
- [28] Ohtomo N, Tanaka Y 1987 *J. Phys. Soc. Jpn.* **56** 2801
- [29] Mei T, Chen Z X, Yang L, Zhu H M, Miao R C 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 224701 (in Chinese) [梅涛, 陈占秀, 杨历, 朱洪漫, 苗瑞灿 2020 物理学报 **69** 224701]
- [30] Xie H, Xu Y Q, Zhong C 2022 *Chin. Phys. B* **31** 114701
- [31] Doebele V, Benoit-Gonin A, Souris F 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 255701
- [32] Ye X M, Zhang X S, Li M L, Li C X 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 114702 (in Chinese) [叶学民, 张湘珊, 李明兰, 李春曦 2018 物理学报 **67** 114702]
- [33] Maroo S C, Chung J N 2010 *Int. J. Heat Mass Transf.* **53** 3335

Mechanism of vapor-liquid phase transition under synergistic action of nanoscale potential energy and cavitation*

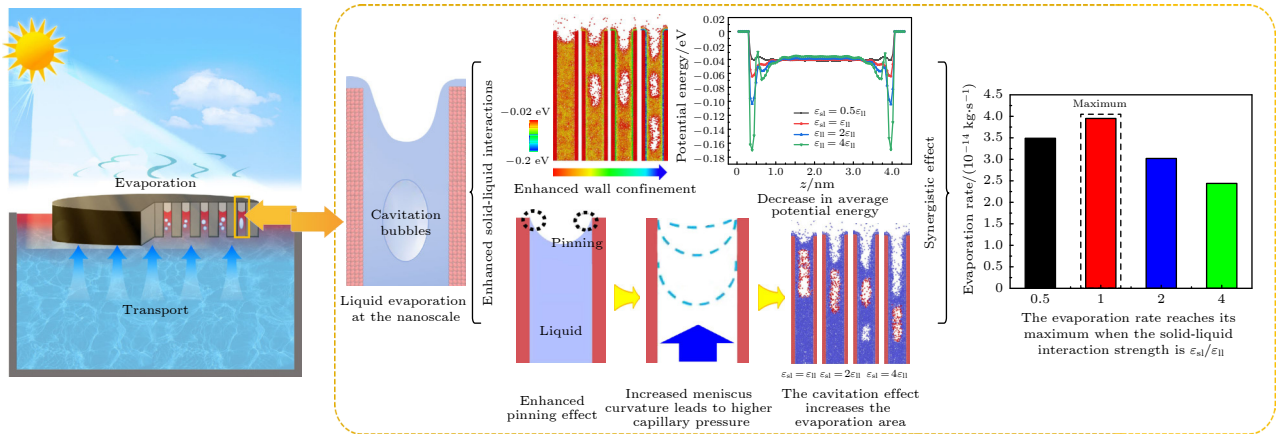
 LIU Renjie LI Yuxiu[†] CHEN Ying DING Yu

(School of Materials and Energy, Guangdong University of Technology, Guangzhou 510006, China)

(Received 13 July 2025; revised manuscript received 14 August 2025)

Abstract

Liquid evaporation on a nanoscale is significantly strengthened by microscopic effects, with its rate even exceeding the predicted upper limit of the classical Hertz-Knudsen equation. This property makes nanoscale liquid evaporation highly valuable for applications in solar-driven interfacial evaporation, electronics cooling, and microfluidics. However, existing research predominantly focuses on the influence of individual microscopic effects, leaving the synergistic mechanisms of multiple effects to be poorly understood. To deeply reveal the microscopic mechanism of liquid phase change on a nanoscale, this study employs liquid argon as a model system to systematically investigate the synergistic effect of potential energy and cavitation on its evaporation. Using molecular dynamics simulations, we study the evaporation process of liquid argon within nanochannels characterized by different solid-liquid interaction strengths under identical temperature and time frame. The results indicate that an increase in the solid-liquid interaction strength reduces the average potential energy of liquid argon and increases the evaporation energy barrier, which theoretically should suppress the evaporation. Nevertheless, the capillary pressure induced by the increased meniscus curvature leads to negative pressure within the liquid argon, triggering a cavitation effect. This cavitation generates bubbles inside the liquid argon, which significantly increases the evaporation surface area and consequently promotes evaporation. Furthermore, the meniscus-dominated evaporation mode is gradually weakened, while the contribution from cavitation bubbles becomes increasingly pronounced. This study demonstrates that the evaporation rates of liquid argon in the four nanochannels with different interaction strengths are 3.49×10^{-14} , 3.95×10^{-14} , 3.02×10^{-14} , and 2.44×10^{-14} kg/s, respectively. Therefore, it can be concluded that the evaporation rate does not vary linearly with the increase of solid-liquid interaction strength. On the contrary, under moderate interaction intensity, the optimal synergistic state between potential energy and the cavitation effect is achieved, thereby obtaining a maximum evaporation rate.



Keywords: molecular dynamics, nanoscale evaporation, liquid argon potential energy, cavitation effect, synergistic interaction

PACS: 47.11.Mn, 74.78.Na, 68.03.Fg, 68.05.-n

DOI: 10.7498/aps.74.20250930

CSTR: 32037.14.aps.74.20250930

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52436003).

[†] Corresponding author. E-mail: Yuxiu.Li@hotmail.com

纳米尺度势能与空化效应协同作用下汽-液相变的机理研究

刘仁杰 李玉秀 陈颖 丁瑜

Mechanism of vapor-liquid phase transition under synergistic action of nanoscale potential energy and cavitation

LIU Renjie LI Yuxiu CHEN Ying DING Yu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 214701 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250930

CSTR: 32037.14.aps.74.20250930

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250930>

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

超声溶栓中多气泡协同空蚀效应的数值分析

Numerical analysis of synergistic cavitation effect of multiple bubbles in ultrasound thrombolysis

物理学报. 2025, 74(14): 144303 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250430>

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>

气体-表面相互作用中动量和能量分量间转化机制的分子动力学研究

Molecular dynamics study on the conversion mechanism between momentum and energy components in gas-surface interaction

物理学报. 2021, 70(2): 024702 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201192>

基于深度学习势函数的[EMIm]⁺Cl+AlCl₃离子液体扩散动力学性质的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of diffusion dynamic behavior in [EMIm]⁺Cl+AlCl₃ ionic liquid based on deep learning potential function

物理学报. 2025, 74(19): 198201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250818>

纳米液滴撞击高温平板壁的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of nanodroplet impacting on high-temperature plate wall

物理学报. 2024, 73(10): 103106 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240034>

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>