

## 液滴在梯度微结构表面上的铺展动力学分析\*

林林<sup>1)†</sup> 袁儒强<sup>1)</sup> 张欣欣<sup>1)</sup> 王晓东<sup>2)</sup>

1) (北京科技大学机械工程学院热能工程系, 北京 100083)

2) (华北电力大学新能源电力系统国家重点实验室, 北京 102206)

(2015年4月13日收到; 2015年5月13日收到修改稿)

本文通过改变肋柱宽度和间距, 构造了二级和多级梯度微结构表面, 采用格子-Boltzmann方法对液滴在两种梯度表面上的铺展过程进行了研究, 探析液滴运动的机理和调控方法. 结果表明, 在改变肋柱间距的二级梯度表面上, 当液滴处于Cassie态时, 接触角滞后大小与粗糙度梯度成正比关系; 当液滴从Cassie态转换为Wenzel态或介于两者之间的不稳定态时, 这一正比关系不再遵循. 在改变肋柱宽度的二级梯度表面上, 接触角滞后大小与粗糙度梯度始终成正比关系. 在多级梯度表面上, 随液滴初始半径增大, 接触角滞后减小, 但液滴平衡位置相较于初始位置偏离增大. 对梯度微结构表面上液滴运动和接触角滞后的定量分析, 可为实现梯度微结构表面液滴运动调控提供理论依据.

关键词: 液滴, 微结构, 铺展, 接触角

PACS: 47.11.-j, 68.08.Bc, 47.61.-k

DOI: 10.7498/aps.64.154705

## 1 引言

动态浸润是指固体表面上一种流体替代另外一种流体的过程, 一般情况下被替代的流体是空气. 在日常生活中, 浸润十分常见: 露水在荷叶上流动、墨水浸润纸张、雨水湿润土壤等等; 在工业生产中, 浸润与喷墨打印、农作物处理、矿物浮选等也有着极为密切的关系<sup>[1]</sup>. 随着近年来微流动系统等研究领域的兴起, 由于在微尺度下表面张力的影响更为显著, 湿润动力学也有了更广阔的应用需求<sup>[2]</sup>, 例如可以通过对纳米流体液滴运动的精确控制, 实现高精度的二维纳米高精度组装<sup>[3]</sup>; 利用电浸润技术, 通过改变透镜表面液滴形态, 实现透镜的变焦<sup>[4]</sup>.

实现人为对固体表面液滴运动方向和速度的调控, 无疑对工业生产有着重要意义. 调控方法可分为被动调控和主动调控两类. 前者通过引入复杂外场作用, 例如热场<sup>[5]</sup>、电场<sup>[6]</sup>、磁场<sup>[7]</sup>、光场<sup>[8]</sup>等,

改变流体表面张力等物性来调控其动态湿润特性, 从而实现液滴驱动; 后者则是通过改变流体物性或固体表面特性来改变动态湿润特性, 实现液滴驱动的控制. 流体改性包括添加表面活性剂、纳米颗粒或特殊功能添加剂等<sup>[9]</sup>, 固体表面改性包括镀膜涂层技术和微结构表面技术等. 相比镀膜涂层技术, 微结构表面技术具有加工简单、更易调控和不易失效等优点, 因此更具应用前景.

近些年来, 微结构表面上液滴的超疏水特性已被广泛研究和报道, 但通过加工具有梯度粗糙度的微结构实现液滴自驱动的报道非常缺乏, 相关机理也尚不明晰. 在缺乏相关理论指导的情况下, 数值模拟研究是揭示梯度微结构表面上液滴自驱动的最有效手段之一. 由于要考虑微结构及微观接触线对宏观液滴运动的影响, 基于介观尺度的格子 Boltzmann 方法是研究此类问题的有效的方法<sup>[10-15]</sup>. 基于以上现状, 本文采用格子 Boltzmann 方法构建液滴在微结构表面动态湿润的数值模型, 通过对微结构表面几何参数的设计, 构造二

\* 国家自然科学基金(批准号: 51176010)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: linlin@ustb.edu.cn

级和多级梯度微结构表面, 实现对液滴运动的控制. 通过对接触角滞后与液滴运动进行定量分析, 揭示梯度微结构表面上液滴自驱动的机理, 为实现梯度微结构表面液滴运动调控提供理论依据.

## 2 二级及多级梯度微结构表面

在均匀微结构表面上, 不同微结构形状和尺寸可使液滴平衡时产生不同的平衡接触角. 梯度微结构表面上沿着某方向存在粗糙度梯度, 当液滴置于其上时, 沿接触线液滴位于不同粗糙度的表面上, 因此接触线上将形成不同的接触角, 导致液滴受力不平衡, 产生驱动力.

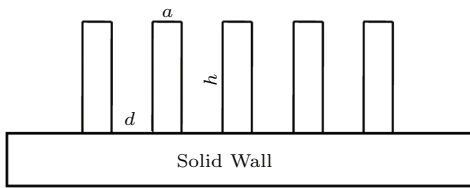


图1 (网刊彩色) 均匀微结构表面及其几何参数  
Fig. 1. (color online) Uniform micro-structured surface and its geometric parameters.

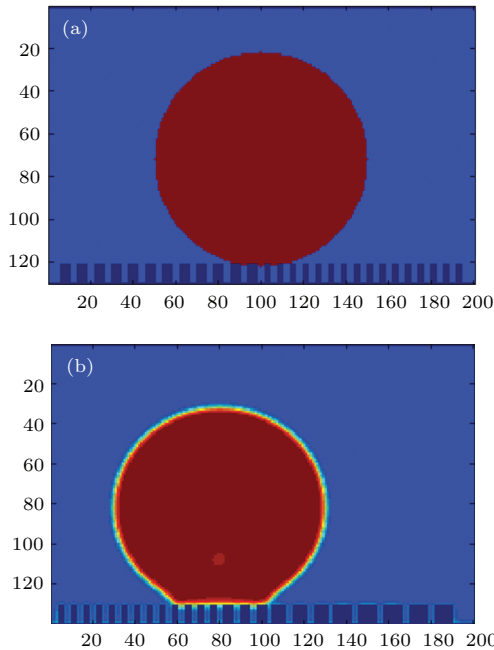


图2 (网刊彩色) 梯度微结构表面 (a) 二级梯度表面; (b) 多级梯度表面  
Fig. 2. (color online) Gradient micro-structured surfaces: (a) two-stage micro-structured surface; (b) multi-stage micro-structured surface.

本文采用柱状微结构,  $a$  为肋柱宽度,  $h$  为肋柱高度,  $d$  为肋柱间距, 对于均匀微结构,  $a$ ,  $h$  和  $d$  保

持恒定, 如图1所示. 设计二级和多级梯度微结构表面. 二级梯度表面由两块粗糙度不同的均匀微结构表面拼接而成, 左侧表面的微结构参数为  $a_1$ ,  $h_1$  和  $d_1$ , 而右侧表面的微结构参数为  $a_2$ ,  $h_2$  和  $d_2$ , 如图2(a)所示. 类似的, 多级梯度表面由多块粗糙度不同的均匀微结构表面拼接而成, 其中第  $i$  块微结构参数为  $a_i$ ,  $h_i$  和  $d_i$ , 如图2(b)所示.

## 3 计算模型

假设初始液滴为半径  $r_0 = 50$  lu (lu 表示格子单位) 的无限长圆柱, 其周围充满蒸气. 模型可简化为二维, 计算区域尺寸为  $130 \text{ lu} \times 200 \text{ lu}$ , 上边界及左右边界为周期性边界条件. 为保证液滴在初始时刻即可受到梯度表面的作用, 液滴初始置于不同粗糙度区域交界处, 并与表面发生轻微接触, 如图2(a)所示.

### 3.1 多相格子 Boltzmann 模型

动态湿润过程涉及固体、液体和气体三相之间的相互作用, 因此采用多相格子 Boltzmann 方法模拟气液两相在微结构表面的相互替换过程, 模型考虑了固-气、固-液、液-液、液-气和气-气之间的相互作用. 模型采用的格子 Boltzmann 方程是 Boltzmann 方程在时间、空间和速度上的离散形式, 碰撞项采用 Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) 近似, 其形式为

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_f} [f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)], \quad (1)$$

(1) 式等号左侧为迁移项, 右侧为碰撞项,  $f_\alpha(\mathbf{x}, t)$  为  $\alpha$  方向上  $\mathbf{x}$  处在  $t$  时刻的密度分布函数,  $f_\alpha^{\text{eq}}$  是平衡分布函数,  $\tau_f$  是碰撞松弛时间,  $\mathbf{e}_\alpha$  是格子速度单位向量, 在 D2Q9 模型中, 其形式如下:

$$\mathbf{e}_\alpha = [(0, 0), (1, 0), (0, 1), (-1, 0), (0, -1), (1, 1), (-1, 1), (-1, -1), (1, -1)]. \quad (2)$$

平衡密度分布函数为

$$f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = w_\alpha \rho \left[ 1 + 3 \frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c^2} + 9 \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c^4} - 3 \frac{(\mathbf{u})^2}{2c^2} \right], \quad (3)$$

式中,  $\mathbf{u}$  是用来计算  $f_\alpha$  的宏观速度,  $\rho$  是流体密度,  $w_\alpha$  是权重系数, 其中  $\alpha = 0$  时  $w_\alpha = 4/9$ ,  $\alpha = 1, 2$ ,

3, 4时  $w_\alpha = 1/9$ ,  $\alpha = 5, 6, 7, 8$ 时  $w_\alpha = 1/36$ ,  $c$  是流体声速.

借助各格点上的密度分布函数, 可采用如下关系计算系统宏观参数:

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^8 f_\alpha, \quad (4a)$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha=0}^8 f_\alpha \mathbf{e}_\alpha. \quad (4b)$$

流体运动黏度可表示为

$$\nu = \frac{1}{3} c_2 \left( \tau_f - \frac{1}{2} \right). \quad (5)$$

为模拟动态多相流体系统 (液体和气体) 的液-液、气-气和液-气相互作用, 在“粒子”间引入一个长程力, 即

$$F(\mathbf{x}, t) = -G\psi(\mathbf{x}, t) \sum_{\alpha=1}^8 w_\alpha \psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t) \mathbf{e}_\alpha, \quad (6)$$

式中,  $G$  是流体间的相互作用强度,  $\psi$  为相互作用势能函数, 可表示为

$$\psi(\rho) = \psi_0 \exp\left(\frac{-\rho_0}{\rho}\right), \quad (7)$$

式中,  $\psi_0$  和  $\rho_0$  是常数, 本文取为 4 和 200. 如果相邻格子为同一相流体, 则 (7) 式可描述气-气和液-液间的内聚功, 如果相邻格子为不同相态, 则其可描述不同相间流体的黏附功.

流体在固体表面上的动态湿润主要由流体和固体之间的黏附力所控制, 即

$$F_{\text{ads}}(\mathbf{x}, t) = -G_{\text{ads}}\psi(\mathbf{x}, t) \sum_{\alpha=1}^8 w_\alpha s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t) \mathbf{e}_\alpha, \quad (8)$$

式中,  $G_{\text{ads}}$  是黏附系数,  $s$  为开关参数, 当取值为 1 时表示相邻格子为固体, 取值为 0 时表明相邻格子为流体.

流体-流体以及固体-流体间的相互作用力 (7) 和 (8) 式用来修正 (3) 式中的宏观速度, 用以更新密度分布函数, 即

$$\mathbf{u}_{\text{eq}} = \mathbf{u} + \frac{\tau_f F}{\rho}. \quad (9)$$

对 Shan-Chen 模型而言, 经过长程修正后, 流体的状态方程可表示为

$$p = \rho RT - \frac{RTG\psi^2}{2}, \quad (10)$$

式中,  $p$  为压力,  $T$  为温度,  $R$  是理想气体常数.

### 3.2 多相格子 Boltzmann 模型的表面张力及平衡接触角

Shan-Chen 模型中并没有给出流体的表面张力和其在固体表面上的接触角与相互作用势能函数间的显式表达式. 为确定流体表面张力, 需借助 Young-Laplace 方程计算, 即

$$\Delta p = \frac{\gamma}{r}, \quad (11)$$

式中,  $\gamma$  是表面张力,  $r$  是气泡或液滴的半径. 通过计算不同半径的气泡或液滴的内外压差, 对  $\Delta p-1/r$  曲线进行线性拟合, 即可得到流体表面张力. 图 3 给出了  $G = -120$  时的  $\Delta p-1/r$  拟合曲线, 得出流体表面张力为  $14.32 \text{ mu}\cdot\text{ls}^{-2}$ , 拟合方差为  $R^2 = 0.997$ . 类似的, 采用该方法得到:  $G = -130$  和  $G = -140$  时, 表面张力分别为  $\gamma = 15.81$  和  $17.62 \text{ mu}\cdot\text{ls}^{-2}$ .

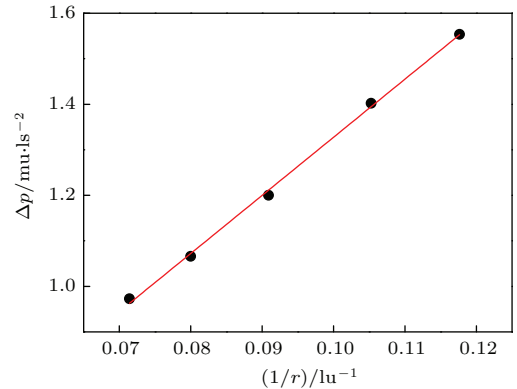


图 3 (网刊彩色) 流体表面张力的计算

Fig. 3. (color online) Calculation of the surface tension of the fluid.

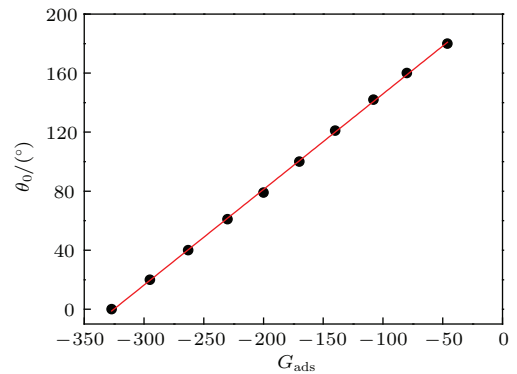


图 4 (网刊彩色) 平衡接触角与黏附系数的关系

Fig. 4. (color online) The relationship between the equilibrium contact angle and adhesion coefficient.

通过改变  $G_{\text{ads}}$  的取值, 模拟液滴在不同理想表面上的平衡接触角  $\theta_0$ , 如图 4 所示, 可得  $\theta_0$  和  $G_{\text{ads}}$  之间满足下面关系:

$$\theta_0 = 210.75 + 0.647G_{\text{ads}}. \quad (12)$$

以下计算中, 取  $G = -120$  和  $G_{\text{ads}} = -171.17$ .

## 4 结果与讨论

### 4.1 二级梯度微结构表面

在研究肋柱间距的影响时, 二级梯度微结构表面如图 2(a) 所示.  $h_1 = 10 \text{ lu}$ ,  $a_1 = 5 \text{ lu}$ ,  $d_1 = 3 \text{ lu}$ ; 右侧微结构具有:  $h_2 = 10 \text{ lu}$ ,  $a_2 = 3 \text{ lu}$ , 而其  $d_2$  分

别取 3, 4, 5 和 6 lu. 微结构表面的粗糙度系数  $\zeta$  可定义为

$$\zeta = \frac{(a+d)^2 + 4ah}{(a+d)^2}. \quad (13)$$

由 (13) 式可知,  $\zeta_1 = 4.125$ , 而  $\zeta_2$  分别为  $4.33(d_2 = 3 \text{ lu})$ ,  $3.45(d_2 = 4 \text{ lu})$ ,  $2.875(d_2 = 5 \text{ lu})$  和  $2.48(d_2 = 6 \text{ lu})$ . 在均匀微结构表面上, 当肋柱间距  $d > 7 \text{ lu}$  时, 表面处于 Wenzel 状态. Wenzel 状态较为稳定, 会阻碍液滴定向运动. 在设定左右两块微结构参数时, 为避免 Wenzel 状态出现,  $d$  最大取 6 lu.

图 5 和图 6 给出了液滴在二级微结构表面上的铺展过程. 液滴总是趋向于从粗糙度低的表面向粗糙度更高的表面发生定向移动. 对比图 5 和图 6 可

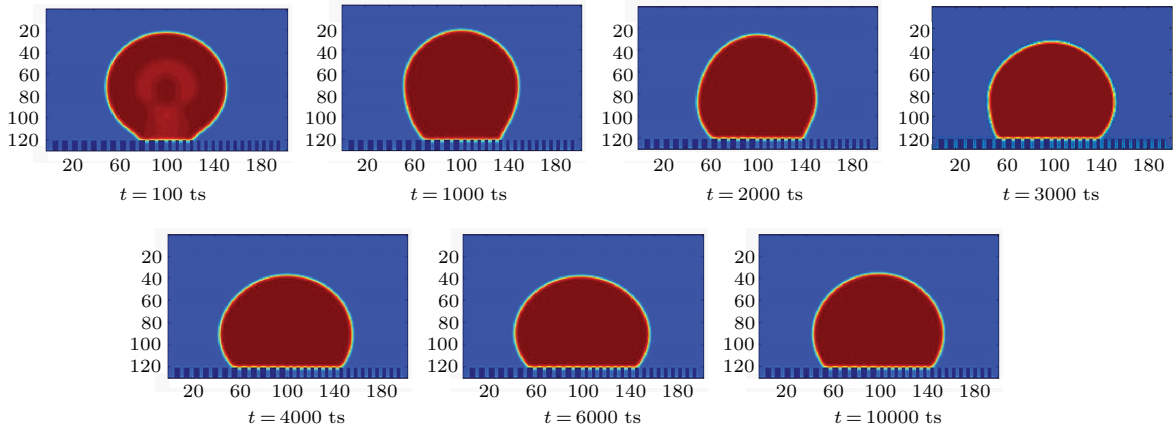


图 5 (网刊彩色) 液滴二级梯度表面上动态湿润过程 (左侧微结构:  $h_1 = 10 \text{ lu}$ ,  $a_1 = 5 \text{ lu}$ ,  $d_1 = 3 \text{ lu}$ ; 右侧微结构:  $h_2 = 10 \text{ lu}$ ,  $a_2 = 3 \text{ lu}$ , 而其  $d_2 = 3 \text{ lu}$ )

Fig. 5. (color online) The dynamic wetting of droplet on the two-stage micro-structured surface. (The left micro-structure:  $h_1 = 10 \text{ lu}$ ,  $a_1 = 5 \text{ lu}$ ,  $d_1 = 3 \text{ lu}$ ; the right micro-structure:  $h_2 = 10 \text{ lu}$ ,  $a_2 = 3 \text{ lu}$ ,  $d_2 = 3 \text{ lu}$ ).

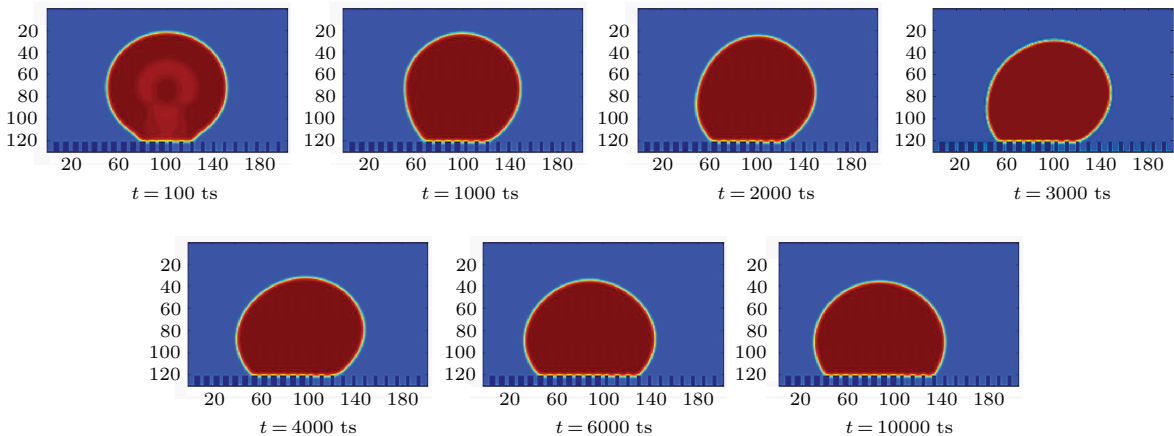


图 6 (网刊彩色) 液滴二级梯度表面上动态湿润过程 (左侧微结构:  $h_1 = 10 \text{ lu}$ ,  $a_1 = 5 \text{ lu}$ ,  $d_1 = 3 \text{ lu}$ ; 右侧微结构:  $h_2 = 10 \text{ lu}$ ,  $a_2 = 3 \text{ lu}$ , 而其  $d_2 = 6 \text{ lu}$ )

Fig. 6. (color online) The dynamic wetting of droplet on the two-stage micro-structured surface. (The left micro-structure:  $h_1 = 10 \text{ lu}$ ,  $a_1 = 5 \text{ lu}$ ,  $d_1 = 3 \text{ lu}$ ; the right micro-structure:  $h_2 = 10 \text{ lu}$ ,  $a_2 = 3 \text{ lu}$ ,  $d_2 = 6 \text{ lu}$ ).



知,粗糙度系数之比 $\zeta$ 值越大,液滴的定向运动越剧烈,运动过程中液滴形变更大,中心偏移更为显著.液滴在梯度微结构表面铺展时,由于表面粗糙度不同,表面能存在差异,液滴从开始时刻即受到不均匀的作用力,由此产生自启动效应.液滴的定向运动会使其两侧分别出现前进接触角 $\theta_a$ 与后退接触角 $\theta_r$ ,液滴重心向粗糙度低的一侧偏移(图6,  $t = 2000$  ts);随着接触线移动到达接触角平衡位置后,由于惯性作用液滴重心又向粗糙度高的一侧移动(图6,  $t = 6000$  ts),在此过程中,前进接触角变大,后退接触角变小,前进接触角与后退接触角差距逐渐变小;随后,液滴出现微小的震荡现象,直至达到最终的平衡状态.由于液滴两侧的表面粗糙度不同,平衡时液滴两侧接触角并不相等.

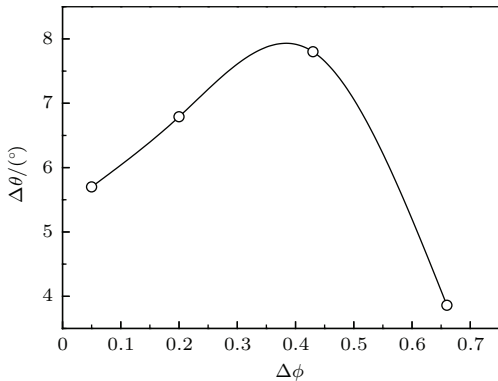


图7 (网刊彩色) 肋柱间距对  $\Delta\theta$ - $\Delta\phi$  关系的影响  
Fig. 7. (color online) The influence of pillar gaps on  $\Delta\theta$ - $\Delta\phi$ .

接触角滞后通常表示为<sup>[16]</sup>  $\Delta\theta = |\theta_a - \theta_r|$ . 定义二级微结构的粗糙度系数之比为  $\phi = \zeta_1/\zeta_2$ . 显然,对于均匀微结构表面,有  $\phi = 1$ . 定义  $\Delta\phi = |\phi - 1|$ , 其表示梯度微结构表面偏离均匀微结构表面的程度.  $\Delta\phi$  与  $\Delta\theta$  的关系如图7所示. 从图中可知,对于  $\Delta\phi = 0.05, 0.20$  和  $0.43$  时,  $\Delta\theta$  随着  $\Delta\phi$  的增大而增大;然而,当  $\Delta\phi = 0.66$  时,  $\Delta\theta$  突然减小,这是因为  $d = 6$  lu 时,液体部分进入肋柱间隙,液滴处于 Wenzel 状态 and Cassie 状态的过渡区,改变了后退接触角,又因为液体本身具有黏性,影响前进接触角,由此造成接触角滞后变小.

在研究肋柱宽度的影响时,二级梯度表面的左侧微结构参数固定:  $h_1 = 10$  lu,  $a_1 = 5$  lu,  $d_1 = 3$  lu; 右侧微结构具有:  $h_2 = 10$  lu,  $d_2 = 3$  lu, 而其肋柱宽度  $a_2$  分别取 4, 6, 7 和 8 lu, 对应的粗糙度系数  $\zeta$  分别为  $4.265(a_2 = 4$  lu),  $4.96(a_2 = 6$  lu),

$3.80(a_2 = 7$  lu) 和  $3.645(a_2 = 8$  lu). 二级梯度表面的粗糙度系数之比  $\phi$  分别为:  $0.97(a_2 = 4$  lu),  $0.832(a_2 = 6$  lu),  $1.086(a_2 = 7$  lu) 和  $1.132(a_2 = 8$  lu).

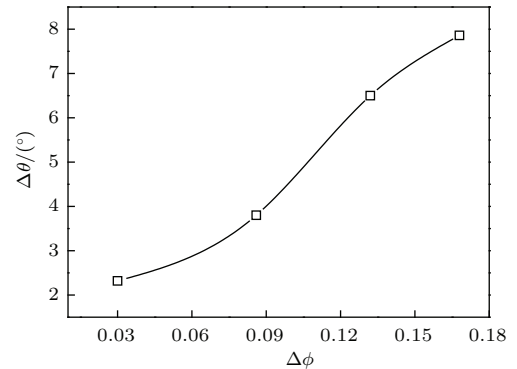


图8 (网刊彩色) 肋柱宽度对  $\Delta\theta$ - $\Delta\phi$  关系的影响  
Fig. 8. (color online) The influence of pillar width on  $\Delta\theta$ - $\Delta\phi$ .

图8给出了  $\Delta\theta$  随  $\Delta\phi$  的变化关系. 随液滴两侧微结构表面差异的增大,接触角滞后更为显著,并且随着  $\Delta\phi$  的增大,  $\Delta\theta$  几乎成线性增长. 其原因是随着肋柱宽度增大,  $\Delta f$  也相应增大,液滴底部两侧微结构表面不平衡性增强,造成接触角滞后更显著.

## 4.2 多级梯度微结构表面

固定微结构肋柱高度  $h$  和间距  $d$ , 通过连续改变肋柱宽度  $a$  可获多级梯度微结构表面. 本文计算中,设计了一个四级梯度粗糙度表面,  $h = 10$  lu,  $d = 3$  lu, 沿  $x$  轴方向肋柱变宽度分别为  $a_1 = 3$  lu,  $a_2 = 5$  lu,  $a_3 = 7$  lu, 和  $a_4 = 9$  lu, 对应的粗糙度系数为  $\zeta_1 = 4.3, \zeta_2 = 4.125, \zeta_3 = 3.8,$  和  $\zeta_4 = 3.5$ .

图9给出了  $R_0 = 50$  lu 时,液滴在多级梯度微结构表面的动态湿润过程. 在液滴铺展及前进过程中,每跨越一个不同粗糙度的微结构表面时,液滴都会发生剧烈形变,无法维持其光滑的球形界面;此后,接触线不再移动;然而由于惯性作用,液滴冠部仍会来回摇摆,重心偏移,前进接触角和后退接触角依旧发生变化,直至最终达到平衡状态,前进接触角及后退接触角不再发生变化.

为考察液滴初始尺寸的影响,还模拟了  $R_0 = 40, 45, 55, 60, 65$  和  $70$  lu 的液滴在多级微结构表面上的铺展过程,计算结果如表1所示,其中  $L$  为液滴平衡时接触线距初始时刻液滴底面圆心的距离.

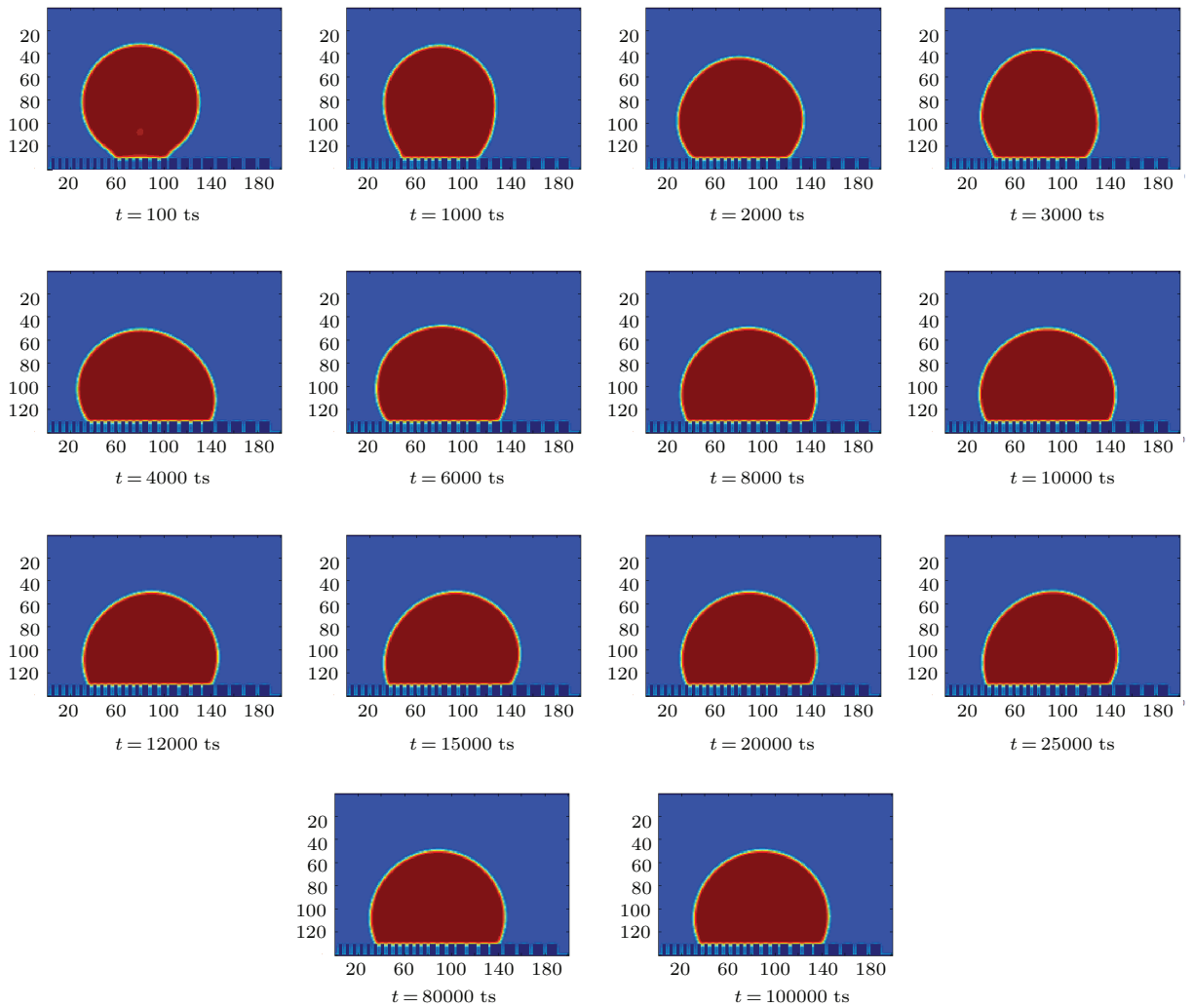


图9 (网刊彩色)  $r = 50$  lu 时, 液滴在多级梯度表面的动态润湿过程

Fig. 9. (color online) The dynamic wetting of droplet on the multi-stage micro-structured surface when  $R_0 = 50$  lu.

表1 不同  $R_0$  的液滴在多级微结构表面上运动的结果  
Table 1. The motion of droplets on multi-order surface of gradient roughness micro-structural.

$R_0/\text{lu}$	$L/\text{lu}$	$\theta_a/(\text{°})$	$\theta_r/(\text{°})$	$\Delta\theta/(\text{°})$
40	55.36	137.49	123.7	13.79
45	60.91	140.19	135.0	5.19
50	64.29	132.09	120.26	11.83
55	67.56	131.19	125.87	5.32
60	71.12	130.36	128.66	1.7
65	75.20	135.01	132.88	2.12
70	80.01	131.19	130.60	0.59

结果显示, 随  $R_0$  增大,  $L$  也增大. 这表明随着液滴尺寸的增大, 液滴接触线的运动更为剧烈, 然而接触角滞后  $\Delta\theta$  反而变小, 这是因为大液滴具有更大

的惯性, 同样的微结构表面对其影响变小, 从而导致更小的接触角滞后.

## 5 结 论

通过改变微结构肋柱的宽度和间距, 设计了两种二级梯度微结构表面以及一种多级梯度微结构表面, 采用格子 Boltzmann 方法, 对液滴在这些表面上的动态铺展过程进行数值模拟, 揭示了接触角滞后和梯度微结构表面之间的定量关系, 主要结论如下:

1) 在通过改变肋柱间距获得的二级梯度微结构表面上, 当液滴处于 Cassie 状态时, 接触角滞后随表面粗糙度梯度增大呈线性增长; 但当液滴处于 Cassie 状态和 Wenzel 状态转变的过渡区时, 这一线性关系不再遵循. 通过改变肋柱宽度获得的二级

微结构表面上, 接触角滞后与粗糙度梯度始终保持正比关系.

2) 液滴在多级微结构表面上铺展时, 每当液滴跨越不同粗糙度微结构表面时, 都会发生剧烈形变; 随液滴初始半径增大, 液滴平衡时的接触角滞后降低, 但液滴平衡态位置相对于其初始位置的偏离增大.

## 参考文献

- [1] de Gennes P G 1985 *Rev. Mod. Phys.* **57** 827
- [2] Liang Z P, Wang X D, Duan Y Y, Min Q 2012 *Colloids Surf. A* **403** 155
- [3] Martin C P, Blunt M O, Pauliac-Vaujour E, Stannard A, Moriarty P, Vancea I, Thiele U 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 116103
- [4] Vancauwenberghe V, Marco P D, Brutin D 2013 *Colloids Surf. A* **432** 50
- [5] Pratap V, Moumen N, Subramanian R S 2008 *Langmuir* **24** 5185
- [6] Kakade B, Mehta R, Durge A, Kulkarni S, Pillai V 2008 *Nano Lett.* **8** 2693
- [7] Hong X, Gao X, Jiang L 2007 *J. Am. Chem. Soc.* **129** 147
- [8] Ichimura K, Oh S K, Nakagawa M 2000 *Science* **288** 1624
- [9] Lu G 2014 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Tsinghua University) (in Chinese) [陆规 2014 博士学位论文(北京: 清华大学)]
- [10] Erbil H Y, Demirel A L, Avci Y, Mert O 2003 *Science* **299** 1377
- [11] Zu Y Q, Yan, Y Y, Li, J Q, Han Z W 2010 *Journal of Bionic Engineering* **7** 191
- [12] Raiskinmaki P, Kopenen A, Merikoski J, Timonen J 2000 *Comput. Mater. Sci* **18** 7
- [13] Lu G, Wang X D, Duan Y Y 2013 *Colloids Surf. A* **433** 95
- [14] Varnik F, Gross M, Moradi N, Zikos G, Uhlmann P, Müller-Buschbaum P, Magerl D, Raabe D, Steinbach I, Stamm M 2011 *Journal of Physics: Condens. Matter* **23** 184112
- [15] Li H B, Fang H P 2012 *J. Adhes. Sci. Technol.* **26** 1873
- [16] Wang X D, Peng X F, Wang B X 2004 *Chin. J. Chem. Eng.* **12** 615

# Spreading dynamics of liquid droplet on gradient micro-structured surfaces\*

Lin Lin<sup>1)†</sup> Yuan Ru-Qiang<sup>1)</sup> Zhang Xin-Xin<sup>1)</sup> Wang Xiao-Dong<sup>2)</sup>

1) (*Department of Thermal Engineering, School of Mechanical Engineering, University of Science and Technology, Beijing 100083, China*)

2) (*State Key Laboratory of Alternative Electrical Power System with Renewable Energy Sources, North China Electric Power University, Beijing 102206, China*)

( Received 13 April 2015; revised manuscript received 13 May 2015 )

## Abstract

Designed microtextured surfaces have shown promising applications in tuning the wettability of a liquid droplet on the surfaces and attracted great attention over the past decade; unfortunately, the effect of surface geometry on wetting properties is still poorly understood. In this work, two- and multi-stage pillar microtextures are designed to construct gradient surfaces by altering pillar width and spacing. Then, the multi-phase lattice-Boltzmann method (LBM) is used to investigate the wetting dynamics of a liquid droplet on the gradient surface. Results show that for the two-stage gradient surface with variable pillar spacing, the contact angle hysteresis is found to be proportional to the roughness gradient when droplet/surface system is in the Cassie-Baxter state. However, this proportional relation is no longer correct when the system is in the transition state between the Wenzel and Cassie-Baxter states. For the two-stage gradient surface with variable pillar spacing, the contact angle hysteresis always increases linearly with increasing roughness gradient. Results also show that when a larger droplet is placed on the multi-stage gradient surface, stronger droplet motion is observed due to the smaller contact angle hysteresis. The present LBM simulations provide a guideline for the design and manufacture of the microtextured surfaces to tune the droplet wettability and motion.

**Keywords:** liquid droplet, micro-structural surface, spreading, contact angle

**PACS:** 47.11.-j, 68.08.Bc, 47.61.-k

**DOI:** [10.7498/aps.64.154705](https://doi.org/10.7498/aps.64.154705)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51176010).

† Corresponding author. E-mail: [linlin@ustb.edu.cn](mailto:linlin@ustb.edu.cn)