



冲击波诱导水中纳米气泡塌陷的分子动力学分析

王小峰 陶钢 徐宁 王鹏 李召 闻鹏

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

Wang Xiao-Feng Tao Gang Xu Ning Wang Peng Li Zhao Wen Peng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 134702 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210058

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210058>

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

单晶Ce冲击相变的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of shock-induced isostructural phase transition in single crystal Ce
物理学报. 2020, 69(11): 116202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200323>

石墨烯碳纳米管复合结构渗透特性的分子动力学研究

Molecular dynamics study on permeability of water in graphene-carbon nanotube hybrid structure
物理学报. 2018, 67(5): 056102 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172424>

纳米多孔银力学性能表征分子动力学模拟

Characterization of nanoporous silver mechanical properties by molecular dynamics simulation
物理学报. 2018, 67(5): 056101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172193>

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>

纳米尺度下Si/Ge界面应力释放机制的分子动力学研究

Molecular dynamics study of release mechanism of stress at Si/Ge interface on a nanoscale
物理学报. 2019, 68(2): 026801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181530>

基于分子动力学的石墨炔纳米带空位缺陷的导热特性

Based on the molecular dynamics characteristic research of heat conduction of graphyne nanoribbons with vacancy defects
物理学报. 2017, 66(13): 136801 <https://doi.org/10.7498/aps.66.136801>

冲击波诱导水中纳米气泡塌陷的分子动力学分析*

王小峰¹⁾ 陶钢^{1)†} 徐宁²⁾ 王鹏²⁾ 李召³⁾ 闻鹏¹⁾

1) (南京理工大学能源与动力工程学院, 南京 210094)

2) (中国人民解放军 32381 部队, 北京 100072)

3) (中国人民解放军 63961 部队, 北京 100012)

(2021 年 1 月 10 日收到; 2021 年 1 月 31 日收到修改稿)

人体中含有的纳米气泡受冲击波诱导塌陷后产生的强冲击高速纳米射流会对人体组织产生创伤. 本文运用分子动力学方法, 分析了冲击波引起的水中纳米气泡的塌陷行为, 纳米气泡分为三种: 真空、含二氧化碳和氧气纳米气泡. 同时探讨了不同气体分子数、纳米气泡的直径和冲击波的冲量等因素对水中纳米气泡塌陷行为的影响. 研究发现在真空纳米气泡中加入气体分子后并没有影响冲击波的传播, 但在纳米气泡完全塌陷前, 与真空和含 1368 个二氧化碳分子 (或含 1409 个氧气分子) 的纳米气泡相比, 含 718 个二氧化碳分子 (或含 733 个氧气分子) 的纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度较大. 在气泡完全塌陷后气体分子致使纳米射流的速度衰减, 最终含气体分子的纳米射流的最大速度小于真空的. 此外, 还发现在大冲量时, 纳米气泡的塌陷时间短, 同一时刻冲击波经过时的密度、压力更大, 气泡塌陷后纳米射流的最大速度较大, 冲击力比小冲量增强很多. 较大直径的纳米气泡塌陷时间长, 同一时刻冲击波经过时的密度、压力较小, 冲击波传播较慢, 但纳米射流的最大速度较大, 纳米射流冲击力更强. 纳米射流的最大速度越大, 含气纳米气泡的气体分子在冲击方向分散的距离更远, 凹陷深度更深.

关键词: 冲击波, 纳米气泡, 塌陷, 纳米射流, 分子动力学**PACS:** 47.55.dd, 47.11.Mn, 47.40.-x**DOI:** 10.7498/aps.70.20210058

1 引言

在军事战争中由爆炸波引起的创伤问题^[1,2], 直接关系到每个士兵的人身安全. 比如, 研究人员对从伊拉克返回的美军士兵调查后发现, 一个重要的医学问题是轻度创伤性脑损伤或脑震荡^[3]. 大家主要关注的是创伤性脑损伤 (traumatic brain injury, TBI)^[4-7] 和爆炸肺创伤问题^[8-11]. 人体中含有的纳米气泡受冲击波诱导塌陷后产生的强冲击高速纳米射流会对人体组织产生创伤^[12]. 气泡的塌陷还可应用于生物医疗方面, 比如当内爆的纳米气泡靠近细胞表面时, 可增加细胞膜的通透性,

用于输送药物和基因进入细胞内^[13].

纳米气泡是溶解在液体中的气体的纳米域. 在 1994 年, 为了解释疏水表面之间的长程相互作用, Parker 等^[14] 提出这种相互作用是由于存在吸附在表面的纳米气泡所致. 2000 年, Ishida 等^[15] 和 Lou 等^[16] 通过原子力显微镜实验观察到了纳米气泡的存在. 近年来, 研究者发现在疏水表面以及含氯化钠 (NaCl) 的溶液中纳米气泡可以稳定存在一段时间, 包括一些含气纳米气泡 (气体有 N_2 , CH_4 和 Ar)^[17-19]. 此外, Pan 等^[20] 发现在亲水性硅藻土颗粒表面氧气 (O_2) 纳米气泡是稳定存在的. 纳米气泡的存在及其稳定性在生物过程中起重要作用.

关于冲击波与气泡相互作用的研究, 主要通过

* 中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: 30919011239) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: taogang@njust.edu.cn

实验和模拟等研究方法. 在实验方面, 主要集中在尺度较大的气泡, 如毫米级和微米级, 研究者观察了在冲击波作用下, 气泡塌陷且形成纳米射流的过程, 探讨了多个气泡存在时(气泡云)的情况, 还考虑了不同边界条件等因素^[21]. 还有较多研究者通过数值模拟的方法探讨了冲击波与毫米级、微米级尺度气泡的相互作用^[22,23]. 受实验条件限制, 冲击波与纳米气泡相互作用的研究集中在分子动力学模拟方面. Vedadi 等^[24]和 Choubey 等^[25]运用全原子分子动力学研究了不同粒子速度的冲击波引起的水中不同直径的真空纳米气泡的塌陷, 观察了塌陷时间及粒子速度分布等, 发现气泡塌陷形成的纳米射流会在生物膜上形成孔洞, 造成膜创伤. Santo 和 Berkowitz^[26,27]建立了粗粒化模型, 观察了由冲击波引起的真空纳米气泡塌陷在膜上形成的孔洞和冲击后膜的恢复, 还研究了多个真空纳米气泡存在时对生物膜的创伤. 国外还有好多学者探讨了冲击波诱导真空纳米气泡塌陷对生物膜及其他组织的损伤^[28–32]. Vedadi 和 Haas^[33]研究了冲击波诱导含二氧化碳分子(CO₂)纳米气泡的塌陷, 主要关注了高粒子速度下水分子和二氧化碳分子发生的化学反应. 国内有部分学者也对冲击波和真空纳米气泡相互作用进行了探讨. 东南大学的孙丹丹等^[34]探讨了脂质纳米气泡受冲击波作用塌陷后对生物膜的创伤, 发现与纳米气泡相比, 脂质纳米气泡减弱了纳米射流的强度以及对生物膜的损伤. 苏州大学的研究团队^[35]模拟了借助冲击波诱导真空纳米气泡塌陷过程中抗肿瘤药物紫杉醇(Paclitaxel)的跨膜运输. 上海大学的研究团队^[36]运用粗粒化分子动力学研究了冲击波诱导真空纳米气泡形成的纳米射流撞击生物膜时的气泡空化问题.

尽管上述很多研究涉及运用分子动力学模拟冲击波与纳米气泡的相互作用, 但气泡基本都是真

空纳米气泡, 目前为止, 只有 Vedadi 和 Haas^[33]涉及到了含 CO₂ 纳米气泡, 不过主要关注了高粒子速度 ($u_p = 3 \text{ km/s}$). 本文将探讨不同冲量的冲击波诱导不同类型不同直径的纳米气泡的塌陷过程, 纳米气泡除了真空, 还含有二氧化碳和氧气等.

2 模拟方法

图 1 给出了计算模型示意图, 包含水和纳米气泡, 纳米气泡分为真空和含气纳米气泡, 含有的气体分别为二氧化碳(CO₂)和氧气(O₂). 模拟采用 GR-OMACS-5.0.2 程序包^[37–39]和 GROMOS 力场^[40], 水分子使用 SPC 模型^[41,42], CO₂ 使用 Cygan 等^[43]新拓展的模型参数, O₂ 通过 ATB 网站得到力场参数^[44–46], CO₂ 及 O₂ 力场参数如表 1 和表 2 所列. 表中 q 表示原子的电荷量, ϵ 和 σ 为分子间相互作用的参数, r_0 为键长, θ 为键角, k 为相对应的键或角参数.

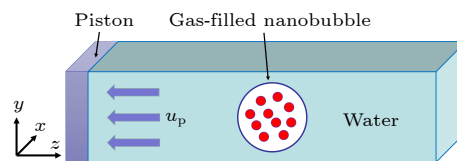


图 1 包含水和纳米气泡的计算模型示意图

Fig. 1. Schematic diagram of calculation model including water and nanobubble.

首先含有水分子的长方体盒子被建立, x , y 与 z 方向的长度分别是 20.0, 20.0 和 60.0 nm, 总共含有 797902 个水分子. 首先采用最速下降法能量最小化, 接着在温度为 300 K 的 NVT 系综中平衡 1 ns, 温度耦合采用 Berendsen 方法, 然后在压力 1 bar、温度 300 K 的 NPT 系综中平衡 1 ns, 温度耦合采用 Nosé-Hoover 方法, 时间常数 (time constant) 为 0.5 ps, 压力耦合使用 Parrinello-Rahman

表 1 二氧化碳的力场参数

Table 1. Force field parameters of carbon dioxide.

q_C	q_O	$\epsilon_C/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$\epsilon_O/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$\sigma_C/\text{\AA}$	$\sigma_O/\text{\AA}$	$k_{CO}/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{\AA}^2)$	$r_{CO}/\text{\AA}$	$k_{OCO}/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{rad}^2)$	θ_{OCO}
+0.6512 e	-0.3256 e	0.2340	0.6683	2.800	3.028	8443	1.162	451.9	180.0°

表 2 氧气的力场参数

Table 2. Force field parameters of oxygen.

q_O	$\epsilon_O/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$\sigma_O/\text{\AA}$	$k/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{nm}^4)$	$r_0/\text{\AA}$
0.0 e	0.4997	3.400	2.2843 e+07	1.22

方法, 时间常数为 5 ps, 可压缩性为 $4.5 \times 10^{-5} \text{ bar}^{-1}$. 时间步长为 2 fs, x , y 和 z 方向均采用周期性边界条件, 平衡过程中对所有的氢键使用 LINCX 约束算法. 平衡后 x , y 与 z 方向的长度分别是 20.12447, 20.12447 和 60.37341 nm.

接着含有不同二氧化碳分子数的立方体盒子被建立, 盒子在每个方向的长度均为 20 nm, 分别含有 5000 和 10000 个二氧化碳分子. 首先采用最速下降法能量最小化, 接着在温度为 300 K 的 NVT 系综中平衡 1 ns, 温度耦合采用 Nose-Hoover 方法, 时间步长为 2 fs, x , y 和 z 方向均采用周期性边界条件. 在平衡后的二氧化碳模型的中心位置分别挖取半径为 4.5 和 6.5 nm 的球形模型 (球心位置在 x , y 和 z 方向分别为 10, 10 和 10 nm), 其中从含有 5000 个二氧化碳分子的模型中挖取的半径为 4.5 nm 的球形模型中含有 223 个二氧化碳分子, 从含有 5000 和 10000 个二氧化碳分子的模型中挖取的半径为 6.5 nm 的球形模型中分别含有 718 和 1368 个二氧化碳分子. 在平衡后的水模型中分别删除半径为 5.0 和 7.0 nm 的球形区域内的水分子 (球心位置在 x , y 和 z 方向分别为 10, 10 和 25 nm), 然后将前面从二氧化碳模型中挖取的球形模型嵌入至水模型的真空纳米气泡中得到不同直径大小的含不同二氧化碳分子数的纳米气泡. 含氧气纳米气泡亦如此得到, 具体氧气分子数见表 3.

动量镜法被用来产生冲击波^[24,25]. 为了避免镜子与水初始时不良相互作用, 镜子与水之间插入 2 nm 真空层, 然后给所有的粒子朝着 $z = 0$ 处的

镜子一个 $-z$ 方向的速度 u_p , 当粒子撞击到镜子时, 速度将会反转. 这一过程实际上相当于有一个无限大的活塞以速度 u_p 向 $+z$ 方向移动并反射所有与之接触的粒子, 从而产生一个沿 $+z$ 方向运动的冲击波. 冲击时时间步长为 1 fs, 库仑与 LJ 势截断半径为 1.4 nm, 邻域截断半径为 2.0 nm, 邻域每 5 步更新一次. 冲击过程中采用 NVE 系综, 只在 x , y 方向采用周期性边界条件. 非周期系统中用反应场来处理静电相互作用, 以保证能量守恒^[47], 当粒子速度较大时水模型可能会出现化学键断裂与形成, 反应力场 (reactive force fields, ReaxFF) 可以准确描述化学键的断裂、形成以及化学反应^[24]. 冲击时粒子速度为 1.0 km/s, 通过在不同时间停止活塞, 可以得到不同冲量的冲击波^[28]. 活塞运动时间分别取 3 和 5 ps. 活塞运动时间越长冲击波冲量越大. 当冲击波到达盒子的另一端时停止计算. 为了使表达更简洁, 后面用名称代替某次模拟, 如 `ult5_CO2(223)_10 nm` 的模拟条件为: 粒子速度 u_p 为 1.0 km/s, 活塞运动时间 τ_s 为 5 ps, 含有 223 个二氧化碳分子 (CO_2) 的直径为 10 nm 的纳米气泡. 具体模拟细节见表 3.

为了证明 GROMOS 力场和 SPC 水模型在冲击条件下的可行性, 对纯水进行了冲击模拟, 发现计算结果与实验数据一致, 在笔者以前发表的文章中讨论过此问题^[48], 在此不再赘述.

所有的模拟可视化利用 VMD 软件^[49], 压力计算使用后处理软件 GROMACS 4.5.5-LS package^[50-52].

表 3 冲击过程模拟细节
Table 3. Simulation details of impact process.

序号	名称	纳米气泡直径/nm	粒子速度/(km·s ⁻¹)	活塞停止时间/ps	所含气体及气体分子数
1	ult5_vacuum_10 nm	10	1.0	5	真空
2	ult5_CO ₂ (223)_10 nm	10	1.0	5	二氧化碳/223
3	ult5_O ₂ (232)_10 nm	10	1.0	5	氧气/232
4	ult3 t_vacuum_14 nm	14	1.0	3	真空
5	ult3_CO ₂ (1368)_14 nm	14	1.0	3	二氧化碳/1368
6	ult3_O ₂ (1409)_14 nm	14	1.0	3	氧气/1409
7	ult5_vacuum_14 nm	14	1.0	5	真空
8	ult5_CO ₂ (718)_14 nm	14	1.0	5	二氧化碳/718
9	ult5_CO ₂ (1368)_14 nm	14	1.0	5	二氧化碳/1368
10	ult5_O ₂ (733)_14 nm	14	1.0	5	氧气/733
11	ult5_O ₂ (1409)_14 nm	14	1.0	5	氧气/1409

3 结果与讨论

3.1 纳米气泡的塌陷过程

图 2 给出了 u1t5(粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 $\tau_s = 5$ ps) 条件下不同时刻真空纳米气泡的塌陷过程. 纳米气泡的直径为 14 nm. 其中在 x 方向的中心区域截取的厚度为 4 nm, z 方向位于 16—34 nm 之间, 图 2 中的分子均为水分子. 3 ps 时 (图 2(a)) 冲击波还未诱导真空纳米气泡塌陷, 此时纳米气泡的截面呈圆形, 气泡中心位于 $z = 25$ nm 处. 6 ps (图 2(b)) 时, 纳米气泡已经塌陷至一半. 8 ps (图 2(c)) 时, 纳米气泡塌陷形成的纳米射流继续向纳米气泡远端高速运动. 9 ps (图 2(d)) 时纳米射流到达纳米气泡远端, 真空纳米气泡完全塌陷.

由于含有气体分子, 含气纳米气泡的塌陷过程与真空纳米气泡有所区别, 图 3 为含二氧化碳纳米气泡 (718 个二氧化碳分子) 完全塌陷前后的形态变化, 突出显示的呈红蓝色的分子为二氧化碳分子, 周围均为水分子, 其中二氧化碳分子全部显示, 水分子在 x 方向截取的厚度为 1 nm. 纳米气泡的直径为 14 nm, 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 $\tau_s = 5$ ps. 0 ps 时, 718 个二氧化碳分子均匀散布在纳米气泡里, 呈球形分布, 此时气泡中心位于 $z = 25$ nm. 随着冲击波抵达纳米气泡, 纳米气泡近端的二氧化碳分子被挤压, 二氧化碳分子整体呈半球形分布, 如图 3 所示 6 ps 时的情况. 9 ps 时, 纳米气泡完全塌陷, 二氧化碳分子被挤压聚集至纳米气泡远端, 此时二氧化碳分子整体的排列如球面的一部分. 接着, 二氧化碳分子随着纳米射流继续向 $+z$ 方向运动, 二氧化碳分子组成的整体

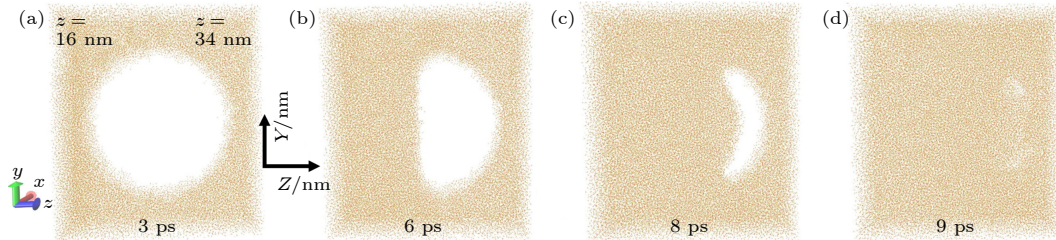


图 2 u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下不同时刻真空纳米气泡的塌陷过程. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 2. The collapse process of vacuum nanobubble at different moments under the condition of u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

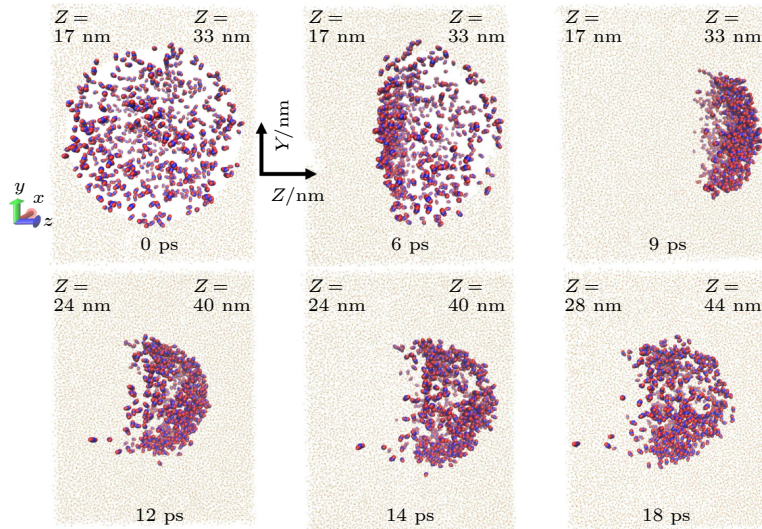


图 3 u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下含二氧化碳纳米气泡 (718 个二氧化碳分子) 完全塌陷前后的形态变化过程. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 3. The morphological change process of carbon dioxide-containing nanobubbles (718 carbon dioxide molecules) before and after the complete collapse under the condition of u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

的中间区域发生凹陷, 12 ps 时二氧化碳分子位于 $z \approx 30\text{--}35\text{ nm}$ 之间. 18 ps 时冲击波到达盒子另一端, 二氧化碳分子组成的整体的内部凹陷更严重, 此时二氧化碳分子位于 $z \approx 35\text{--}40\text{ nm}$ 之间.

为了更直观地显示纳米气泡完全塌陷后气体分子的内部凹陷, 将图 3 中 12 和 18 ps 的气体分子取截面, 在 x 方向截取的厚度为 4 nm, 如图 4 所示. 凹陷深度定义为: 在气体分子截面上, z 方向坐标最小的分子到内圆弧顶点的距离, 如图 4 中双箭头所示. 12 ps 时凹陷深度为 5.5 nm, 然后随着纳米射流的作用, 气体分子沿 $+z$ 方向运动, 内部凹陷深度加深, 18 ps 时凹陷深度为 8 nm.

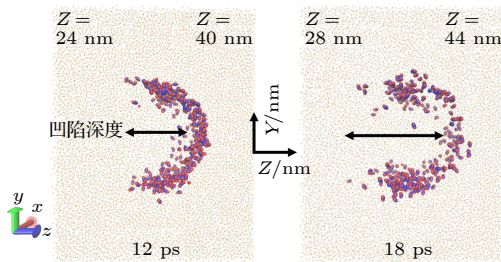


图 4 u1t5 ($u_p = 1\text{ km/s}$, $\tau_s = 5\text{ ps}$) 条件下含二氧化碳纳米气泡 (718 个二氧化碳分子) 完全塌陷后的内部凹陷. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 4. Internal depression of carbon dioxide-containing nanobubble (718 carbon dioxide molecules) after the complete collapse under the condition of u1t5 ($u_p = 1\text{ km/s}$, $\tau_s = 5\text{ ps}$). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

3.2 一维密度分布

冲击波诱导纳米气泡的塌陷过程需要定量评估. u1t5 (粒子速度 $u_p = 1\text{ km/s}$ 、活塞运动时间 $\tau_s = 5\text{ ps}$) 条件下, 直径为 14 nm 的真空纳米气泡在不同时刻完全塌陷前后沿 z 轴 (在 xy 平面内平均) 的一维密度分布如图 5 所示. 0 ps 时刻是从活塞停止运动开始的, 可以发现, 由于前面活塞运动已形成冲击波, 此时在 $z \approx 10\text{ nm}$ 处存在密度峰值, 在冲击波经过后的区域密度大约为 1390 kg/m^3 , $z = 25\text{ nm}$ 处的低密度区域是由于存在纳米气泡造成的. 3 ps 时冲击波传播至纳米气泡近端, 纳米气泡开始塌陷, 此时密度峰值为 1358 kg/m^3 , 密度峰值发生了衰减. 8 ps 时, 由于纳米气泡的存在和在传播过程中冲击波能量的耗散, 一维密度峰值迅速减小, 此时密度峰值为 1100 kg/m^3 . 结合图 2 可知, 9 ps 时纳米气泡完全塌陷, 塌陷时间为 6 ps, 此刻密度峰值为 1105 kg/m^3 . 然后冲击波继续向 $+z$ 方

向传播, 塌陷后的一维密度峰值比塌陷时增大, 且密度峰值衰减较慢.

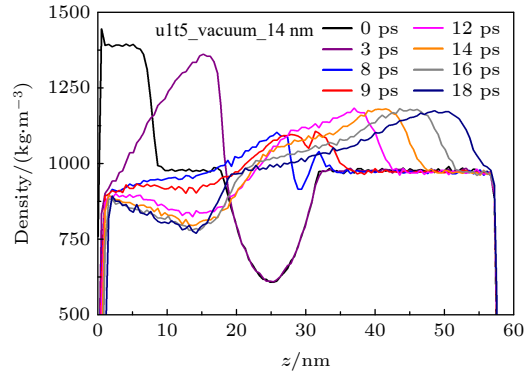


图 5 u1t5 ($u_p = 1\text{ km/s}$, $\tau_s = 5\text{ ps}$) 条件下不同时刻真空纳米气泡完全塌陷前后的一维密度分布. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 5. The one-dimensional density distribution before and after the complete collapse of vacuum nanobubble at different moments under the condition of u1t5 ($u_p = 1\text{ km/s}$, $\tau_s = 5\text{ ps}$). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

当真空纳米气泡中加入气体后, 可能会影响冲击波的传播. u1t5 (粒子速度 $u_p = 1\text{ km/s}$ 、活塞运动时间 $\tau_s = 5\text{ ps}$) 条件下含二氧化碳纳米气泡 (分别含 718 个和 1368 个二氧化碳分子) 与真空纳米气泡在不同时刻完全塌陷前后的一维密度分布, 如图 6 所示. 纳米气泡的直径均为 14 nm. 由于含气纳米气泡中含有二氧化碳分子, 0 ps 时气泡处的一维密度存在差别, 含二氧化碳分子数越多, 密度越大. 7 和 9 ps 时, 在塌陷过程中气泡区域由于二氧化碳分子的存在, 一维密度存在差别, 含二氧化碳分子数越多, 密度越大, 其他区域含气纳米气泡的密度与真空一致, 包括冲击波前沿的密度跃变. 结合图 2 和图 3 可知, 9 ps 时含气纳米气泡与真空纳米气泡均完全塌陷. 14 ps 时, 真空与含二氧化碳纳米气泡的一维密度分布已无差别. 结果表明, 当真空纳米气泡中加入气体分子后, 并没有影响冲击波的传播. 相同条件下, 含氧气 (分别含 733 个和 1409 个氧气分子) 纳米气泡的一维密度分布也出现同样的现象, 这儿不再讨论.

图 7 给出了不同冲量下 (u1t5 条件下冲击波的冲量大于 u1t3 的) 含氧气纳米气泡 (1409 个氧气分子) 完全塌陷前后的一维密度分布, 纳米气泡的直径为 14 nm. 在初始时刻, 由于活塞运动时间不同, 相比 u1t3, 在 u1t5 条件下密度间断面的位置离气泡位置更近. 5 ps 时, u1t3 条件下冲击波开

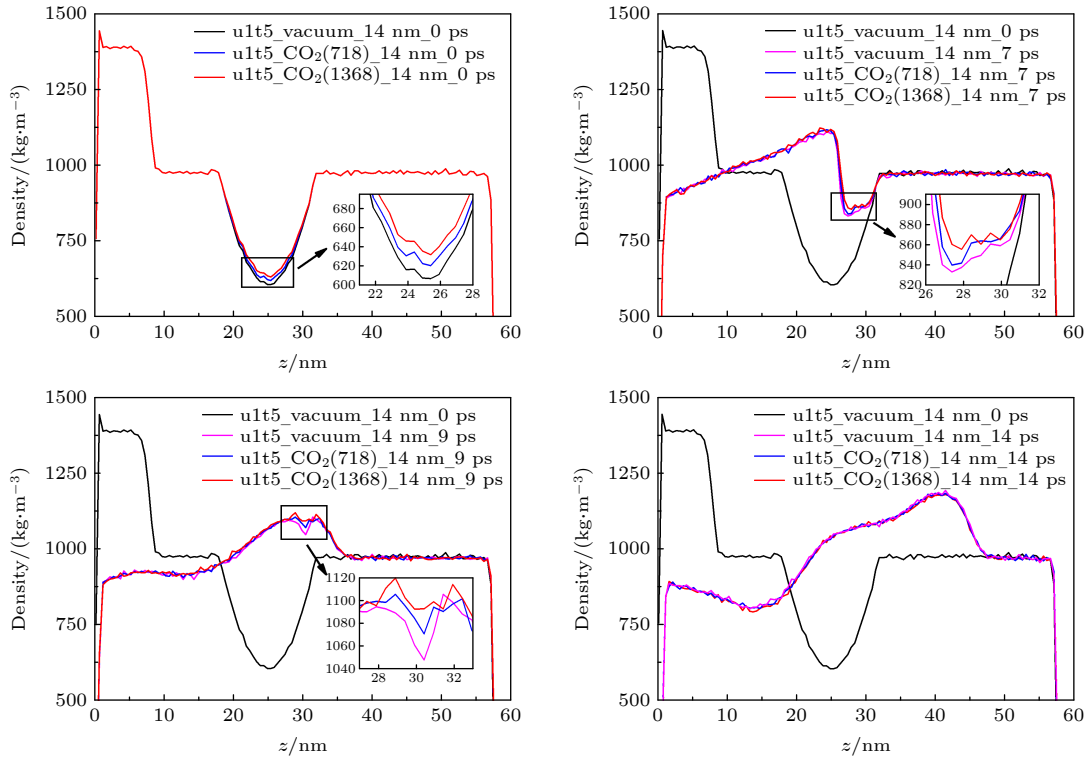


图6 u1t5($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps)条件下不同时刻真空与含气纳米气泡(分别含718个和1368个二氧化碳分子)完全塌陷前后的一维密度分布. 纳米气泡的直径为14 nm

Fig. 6. The one-dimensional density distribution before and after the complete collapse of vacuum and gas-containing nanobubbles (containing 718 and 1368 carbon dioxide molecules, respectively) at different moments under the condition of u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

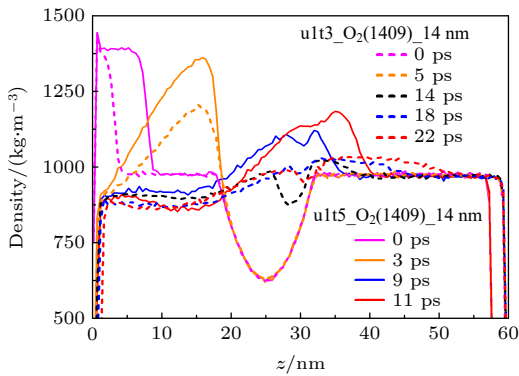


图7 不同冲量下(u1t5和u1t3)含氧气纳米气泡(1409个氧气分子)完全塌陷前后的一维密度分布. 纳米气泡的直径为14 nm

Fig. 7. The one-dimensional density distribution before and after the complete collapse of oxygen-containing nanobubbles(1409 carbon dioxide molecules) under different impulses (u1t5 and u1t3). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

始诱导纳米气泡塌陷, 密度峰值为 1204 kg/m^3 , 相对应地, u1t5条件下冲击波开始诱导纳米气泡塌陷时(3 ps)的密度峰值为 1358 kg/m^3 . 到18 ps时, u1t3条件下纳米气泡完全塌陷, 塌陷时间为

13 ps, 此时密度峰值为 1030 kg/m^3 , 接近水在常态下的密度值. u1t5条件下纳米气泡的塌陷时间为6 ps, 完全塌陷时的密度峰值为 1120 kg/m^3 . 发现当大冲量(u1t5)的冲击波诱导塌陷含氧气纳米气泡时, 气泡完全塌陷时间缩短了7 ps, 冲击波经过时的密度值更大. 真空与含二氧化碳纳米气泡受大小冲量的冲击波塌陷时, 也出现同样情况.

不同直径的含二氧化碳纳米气泡完全塌陷前后的一维密度分布如图8所示, 纳米气泡直径分别为14和10 nm, 14 nm纳米气泡含718个二氧化碳分子, 10 nm纳米气泡含223个二氧化碳分子, 这两者取自同一密度的二氧化碳的气体, 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 $\tau_s = 5$ ps. 3 ps时冲击波到达纳米气泡附近. 8 ps时, 10 nm纳米气泡完全塌陷, 塌陷时间为5 ps, 少于14 nm纳米气泡的塌陷时间(6 ps). 10 nm纳米气泡完全塌陷时的密度峰值为 1223 kg/m^3 , 而14 nm纳米气泡完全塌陷时的密度峰值为 1105 kg/m^3 . 总之, 同一时刻, 10 nm纳米气泡塌陷后的一维密度分布较大. 此外, 10 nm纳米气泡塌陷过程中冲击波传播较快.

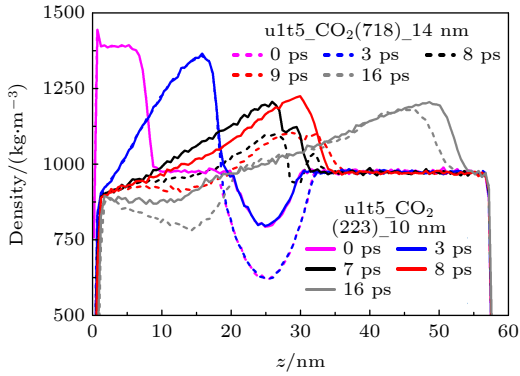


图 8 u1t5 ($u_p = 1 \text{ km/s}$, $\tau_s = 5 \text{ ps}$) 条件下不同直径的 (14 和 10 nm) 含二氧化碳纳米气泡完全塌陷前后的一维密度分布

Fig. 8. The one-dimensional density distribution before and after the complete collapse of carbon dioxide-containing nanobubbles with different diameters (14 and 10 nm) under the condition of u1t5 ($u_p = 1 \text{ km/s}$, $\tau_s = 5 \text{ ps}$).

3.3 压力分布

u1t5 条件下, 含二氧化碳纳米气泡 (718 个二氧化碳分子) 在不同时刻完全塌陷前后沿 z 轴的压力分布如图 9 所示, 纳米气泡的直径为 14 nm. 0 ps (从活塞运动 5 ps 后开始计时) 时 z 轴左端产生冲击波, 压力峰值为 2.0 GPa, 此时中心位于 $z = 25 \text{ nm}$ 处的纳米气泡的压力接近零. 接着冲击波向 $+z$ 方向传播, 压力峰值衰减, 6 ps 时压力峰值为 0.77 GPa, 在纳米气泡从开始塌陷至完全塌陷的这段时间内 (3—9 ps), 压力迅速衰减, 9 ps 时压力峰值为 0.56 GPa, 压力衰减主要由两方面原因

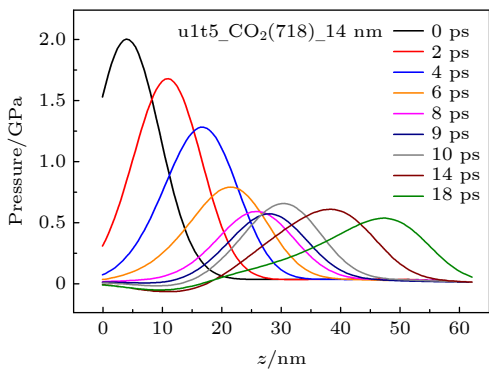


图 9 u1t5 ($u_p = 1 \text{ km/s}$, $\tau_s = 5 \text{ ps}$) 条件下不同时刻含二氧化碳纳米气泡 (718 个二氧化碳分子) 完全塌陷前后沿 z 轴的压力分布. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 9. The pressure distribution along the z -axis before and after the complete collapse of carbon dioxide-containing nanobubble (718 carbon dioxide molecules) at different moments under the condition of u1t5 ($u_p = 1 \text{ km/s}$, $\tau_s = 5 \text{ ps}$). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

导致, 一是冲击波能量的耗散, 二是由于纳米气泡孔洞存在低压区域所致. 当气泡完全塌陷后, 压力峰值增大, 10 ps 时为 0.65 GPa. 10 ps 以后压力峰值衰减较慢, 在 $z < 20 \text{ nm}$ 的区域出现负压.

u1t5 条件下真空与含不同二氧化碳分子数的纳米气泡在不同时刻完全塌陷前后沿 z 轴的压力分布, 分别含 718 个和 1368 个二氧化碳分子, 如图 10 所示, 纳米气泡的直径为 14 nm. 6 ps 时纳米气泡正在塌陷中, 发现含不同二氧化碳分子数的纳米气泡的压力峰值一样大, 且高于真空纳米气泡的. 9 ps 时, 纳米气泡完全塌陷, 含 718 个二氧化碳分子的纳米气泡的压力峰值小于含 1368 个二氧化碳分子纳米气泡的, 而高于真空纳米气泡的, 14 ps 时亦是如此. 18 ps 时含 718 个二氧化碳分子的纳米气泡的压力峰值与真空一样大, 均小于含 1368 个二氧化碳分子纳米气泡的. 因此, 含气体分子数较多的纳米气泡完全塌陷后, 峰值压力稍大些, 其他区域压力一样. 当真空纳米气泡加入二氧化碳分子后, 没有影响冲击波的传播, 这与前面密度分析得到的结果一致.

图 11 给出了不同冲量下 (u1t5 和 u1t3), 含氧纳米气泡 (1409 个氧气分子) 完全塌陷前后沿 z 轴的压力分布, 纳米气泡的直径为 14 nm. 0 ps 时, 小冲量下 (u1t3) 压力峰值为 0.85 GPa, 比 u1t5 条件下压力峰值 (2.0 GPa) 的一半还小, 两种冲击条件下压力峰值在 z 方向相距 2.5 nm. 然后冲击波继续向前传播, 两种冲击条件下压力峰值均发生衰减, 9 ps 时 u1t3 条件下压力峰值为 0.20 GPa, u1t5 条件下压力峰值为 0.59 GPa. 两个压力峰值在 z 方向的距离增大, 18 ps 时压力峰值在 z 方向相距 14.0 nm. 总之, 在冲击波传播过程中, 小冲量下峰值压力比大冲量小很多.

不同直径的 (14 和 10 nm) 含二氧化碳纳米气泡在不同时刻完全塌陷前后沿 z 轴的压力分布如图 12 所示. 两者取自同一密度的二氧化碳气体. 粒子速度 $u_p = 1 \text{ km/s}$ 、活塞运动时间 $\tau_s = 5 \text{ ps}$. 0 ps 时, 由于冲击条件一致, 压力分布一致. 4 ps 时, 14 nm 纳米气泡的峰值压力为 1.28 GPa, 小于 10 nm 纳米气泡的峰值压力 (1.36 GPa), 因为对于 14 nm 纳米气泡来说, 冲击波到达的时间早及孔洞低压区域的面积大. 两者的共同点是: 压力峰值均是在纳米气泡完全塌陷后先增大然后开始衰减. 8 ps 时 10 nm 纳米气泡完全塌陷, 压力峰值

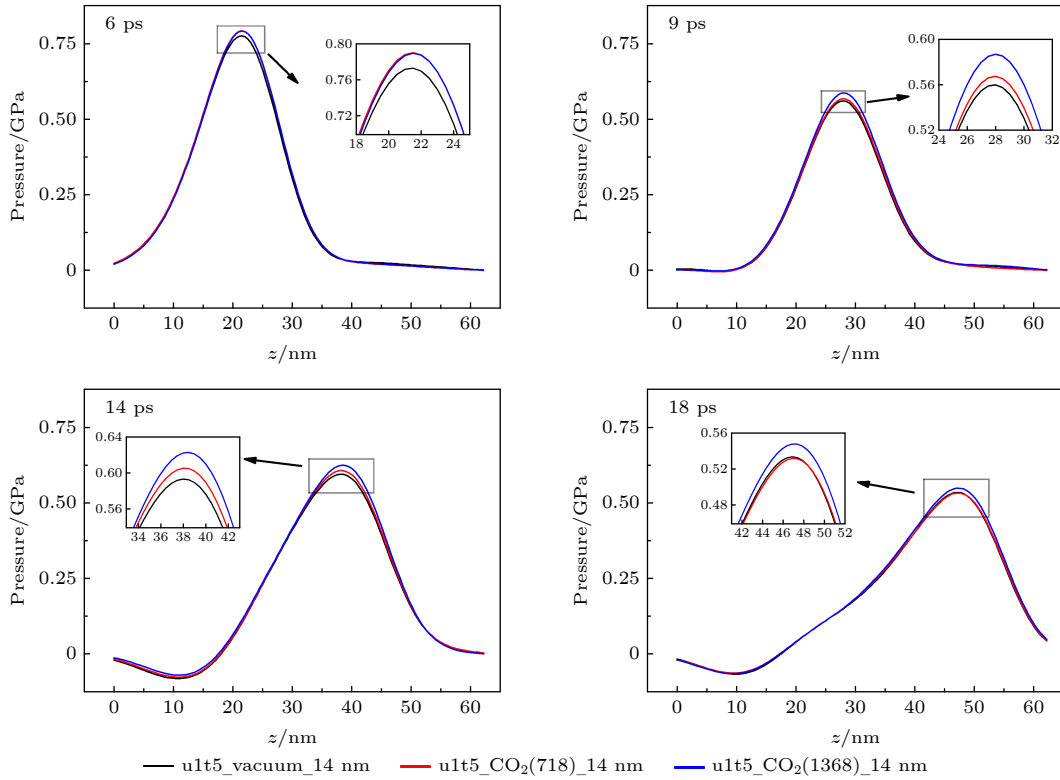


图 10 u1t5($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下不同时刻真空和含二氧化碳纳米气泡完全塌陷前后沿 z 轴的压力分布. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 10. The pressure distribution along the z -axis before and after the complete collapse of vacuum and carbon dioxide-containing nanobubbles at different moments under the condition of u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

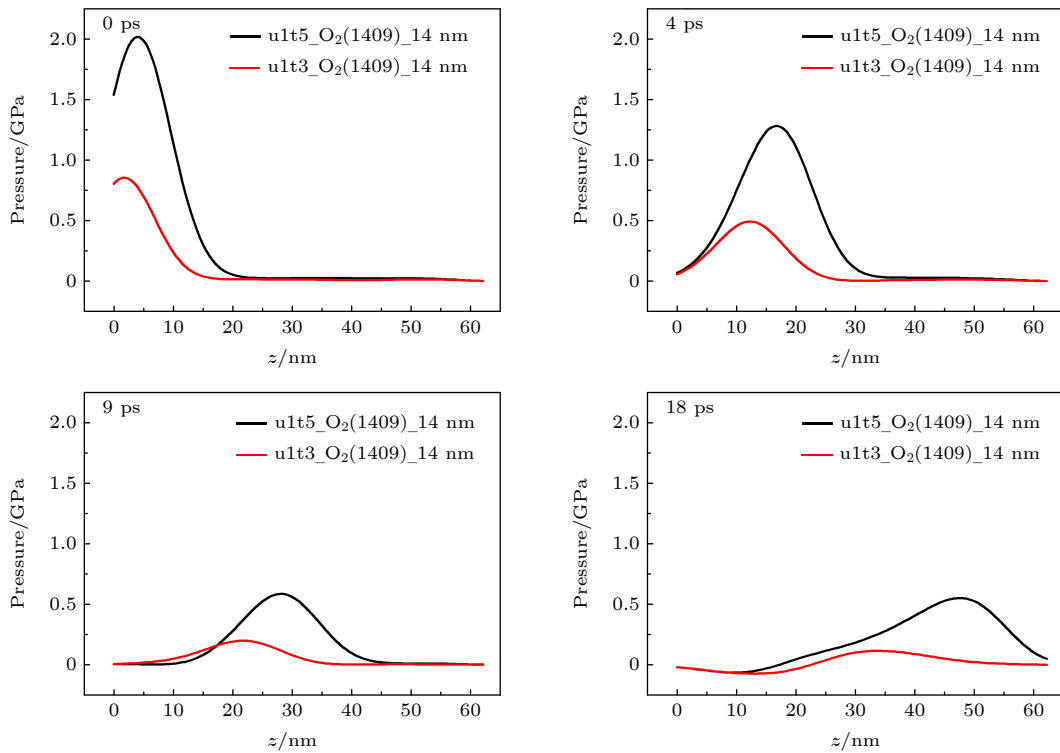


图 11 不同冲量下 (u1t5 和 u1t3) 含氧气纳米气泡 (1409 个氧气分子) 完全塌陷前后沿 z 轴的压力分布. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 11. The pressure distribution along the z -axis before and after the complete collapse of oxygen-containing nanobubbles (1409 carbon dioxide molecules) under different impulses (u1t5 and u1t3). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

为 0.85 GPa, 9 ps 时压力峰值增大至 0.88 GPa, 然后衰减. 9 ps 时 14 nm 纳米气泡完全塌陷, 压力峰值为 0.57 GPa, 10 ps 时压力峰值增大至 0.65 GPa, 然后衰减. 总之, 纳米气泡完全塌陷前后, 10 nm

纳米气泡的压力峰值均高于 14 nm 纳米气泡的.

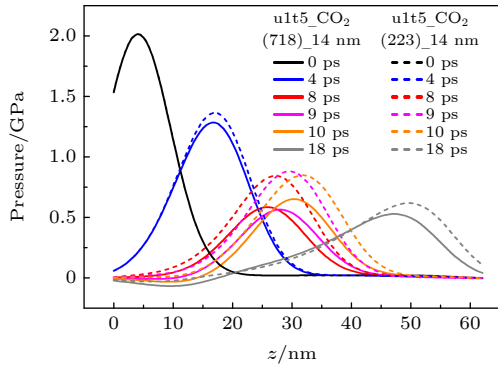


图 12 u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下不同直径的 (14 和 10 nm) 含二氧化碳纳米气泡完全塌陷前后沿 z 轴的压力分布

Fig. 12. The pressure distribution along the z -axis before and after the complete collapse of dioxide-containing nanobubbles with different diameters (14 and 10 nm) under the condition of u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps).

3.4 速度矢量分布

冲击波诱导纳米气泡的塌陷过程伴随着高速的纳米射流, 关于纳米射流的速度矢量分布的探讨很有必要. 含氧气纳米气泡 (733 个氧气分子) 在不同时刻完全塌陷前后, 在 yz 平面内的粒子速度矢量分布如图 13 所示, 图例中速度的单位为 km/s. 纳米气泡的直径为 14 nm, 粒子速度 $u_p = 1$ km/s, 活塞运动时间 $\tau_s = 5$ ps. 该区域取自在 x 方向位于系统中心的 1 nm 厚的窄条, 然后在 y 和 z 方向 $1 \text{ nm} \times 1 \text{ nm}$ 的方格里平均速度, 每个方格里平均有 100 个原子, 因此这儿说的速度矢量不是代表某个原子的速度, 而是在边长为 1 nm 的立方格里所有原子速度的平均, 从侧面反映了纳米射流冲击力的强弱. 3 ps (图 13(a)) 时冲击波到达含氧气纳米气泡的近端, 粒子朝着 $+z$ 方向移动. 由图 13(b) (5 ps) 可知, 当冲击波传播至纳米气泡时, 粒子速度迅速增大, 且朝气泡中心运动, 形成纳米射流,

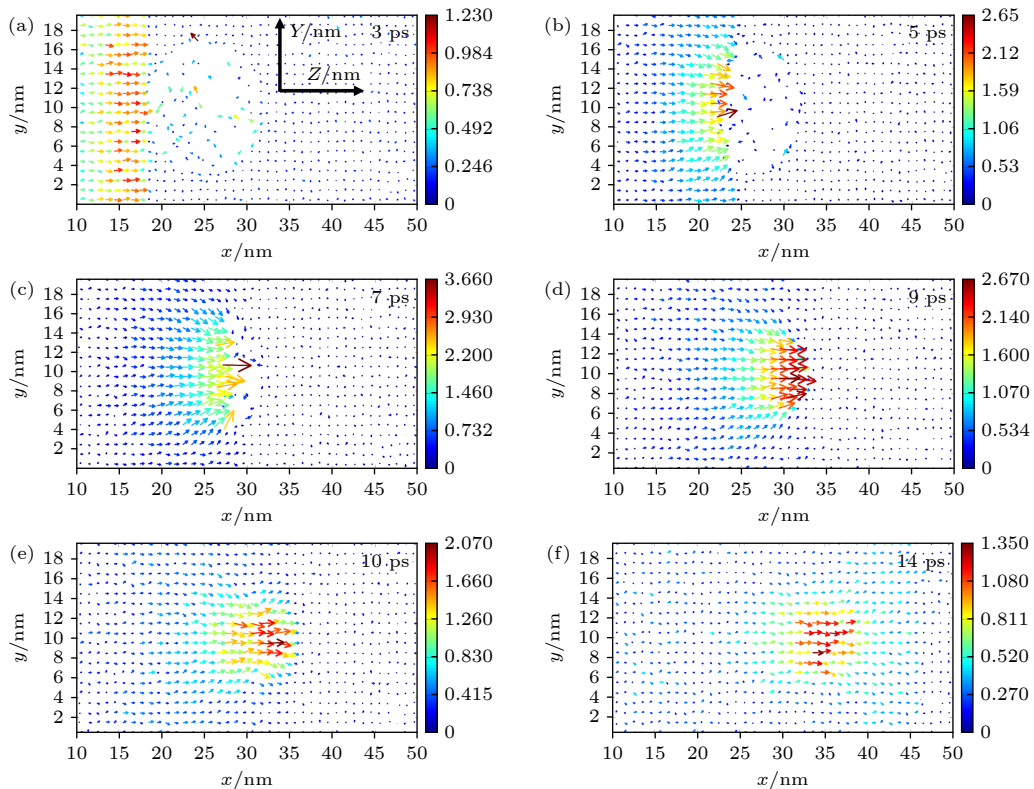


图 13 u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下含氧气纳米气泡 (733 个氧气分子) 完全塌陷前后在 yz 平面内的粒子速度矢量分布. 箭头方向表示速度方向, 箭头长短与颜色表示速度大小. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 13. The particle velocity vector distribution in the yz plane before and after the complete collapse of oxygen-containing nanobubble (733 oxygen molecules) at different moments under the condition of u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps). The direction of arrow indicates the direction of the particle velocity, and the length and color of the arrow indicate the magnitude of the particle velocity. The diameter of the nanobubble is 14 nm.

含氧气纳米气泡发生塌陷. 7 ps(图 13(c)) 时纳米射流速度增大至最大, 为 3.66 km/s, 纳米气泡进一步塌陷. 9 ps (图 13(d)) 时纳米气泡完全塌陷, 此时虽然射流头部最大速度为 2.67 km/s, 比 7 ps 时小, 但射流汇聚集在一起, 有较强的冲击力. 10 ps (图 13(e)) 时可以看到射流由于前方粒子的阻挡, 速度开始下降, 射流头部呈蘑菇头形状, 粒子向四周分散运动. 然后, 射流继续向+z 方向运动, 速度进一步下降, 如 14 ps 时 (图 13(f)) 所示, 纳米射流最大速度为 1.35 km/s, 此时纳米射流速度较大的区域位于 $z \approx 35$ nm 附近, 观察氧气分子分布可知, 聚集的氧气分子也位于 $z \approx 35$ nm 附近, 此处省略氧气分子的微观分布, 后面部分将进行详细讨论.

图 14 给出了不同时刻真空与含氧气纳米气泡 (分别含 733 个和 1409 个氧气分子) 塌陷形成的纳米射流的最大速度, 纳米气泡的直径为 14 nm, 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 $\tau_s = 5$ ps. 当冲击波到达纳米气泡处以后 (3 ps 时到达), 由于形成纳米射流, 纳米射流的最大速度迅速增大. 6 ps 时真空纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度达到最大, 为 3.26 km/s, 含 733 个氧气分子的纳米气泡在 7 ps 时纳米射流最大速度达到最大, 为 3.66 km/s, 含 1409 个氧气分子的纳米气泡在 7 ps 时纳米射流的最大速度达到最大, 为 3.06 km/s. 结果表明, 含有较少氧气分子 (733 个) 的纳米气泡塌陷时, 纳米射流的最大速度最大. 纳米气泡完全塌陷后 (9 ps 左右时纳米气泡完全塌陷), 由于前方水分子的阻挡纳米射流的最大速度下降较快, 虽然

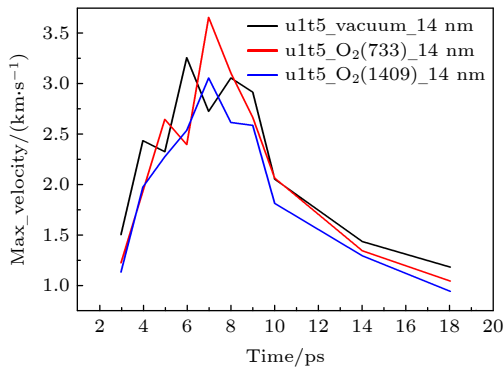


图 14 ult5($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下不同时刻真空、含氧气纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 14. The maximum velocity of the nanojet formed by the collapse of vacuum and oxygen-containing nanobubbles at different moments under ult5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

含 733 个氧气分子的纳米气泡在塌陷时纳米射流的最大速度较大, 但在 10 ps 以后最大速度却较真空纳米气泡小, 具体原因后面分析.

7 ps 时含氧气纳米气泡 (733 个氧气分子) 塌陷后在 yz 平面内的粒子速度矢量分布被分解, 如图 15 所示. 纳米气泡的直径为 14 nm, 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 $\tau_s = 5$ ps. 7 ps 时水分子的最大速度为 3.33 km/s (图 15(b)), 而此刻氧气分子的最大速度为 3.66 km/s (图 15(c)), 与 7 ps 时含氧气纳米气泡塌陷后的最大速度一致 (图 15(a)), 说明 7 ps 时含氧气纳米气泡塌陷后纳米射流的最大速度是由氧气分子造成的. 以上结果说明, 在 7 ps, 当直径为 14 nm 的含有 733 个氧气分子的纳米气泡塌陷至一半时, 氧气分子受到纳米射流的作用, 速度急剧增大, 超过了射流前端水分子的速度.

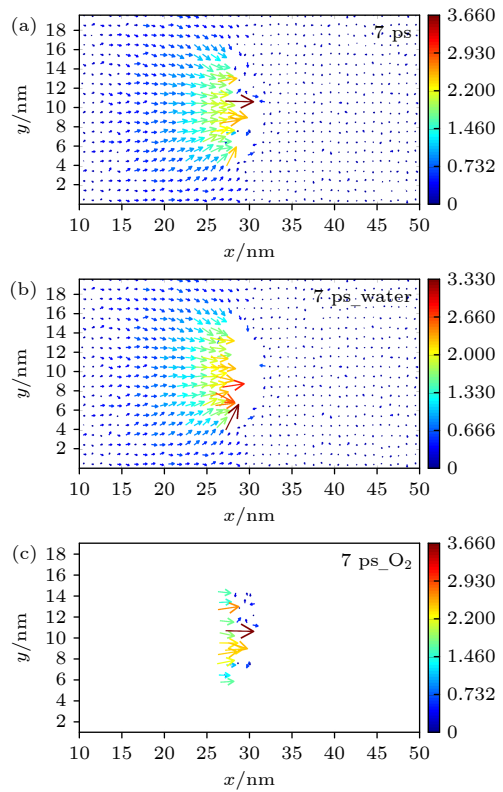


图 15 7 ps 时 ult5($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下含氧气纳米气泡 (733 个氧气分子) 塌陷后在 yz 平面内的粒子速度矢量分布 (a) 水分子和氧气分子; (b) 只有水分子; (c) 只有氧气分子

Fig. 15. The particle velocity vector distribution in the yz plane after the collapse of oxygen-containing nanobubble (733 oxygen molecules) at 7 ps under the condition of ult5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps): (a) Water molecules and oxygen molecules; (b) only water molecules; (c) only oxygen molecules.

当含氧气纳米气泡中的氧气分子由 733 个增多至 1409 个 (数目大约增大一倍), 纳米气泡塌陷后的速度会怎样变化, 也值得去探究. 7 ps 时含氧气纳米气泡 (1409 个氧气分子) 塌陷后在 yz 平面内的粒子速度矢量分布也被分解, 如图 16 所示. 纳米气泡的直径为 14 nm, 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 $\tau_s = 5$ ps. 在 7 ps, 当直径为 14 nm 的含 1409 个氧气分子的纳米气泡塌陷至一半时, 与含 733 个氧气分子的纳米气泡相比, 由于氧气分子增多, 分子变得更密集, 分子间作用力增大, 氧气分子的最大速度由 3.66 km/s 下降为 3.16 km/s (图 16(a)), 低于此刻水分子的最大速度 (3.32 km/s, 图 16(b)), 这也导致了 7 ps 时含氧气纳米气泡 (1409 个氧气分子) 塌陷后的最大速度 (3.06 km/s, 图 16(a)) 低于此刻水分子的最大速度 (3.32 km/s).

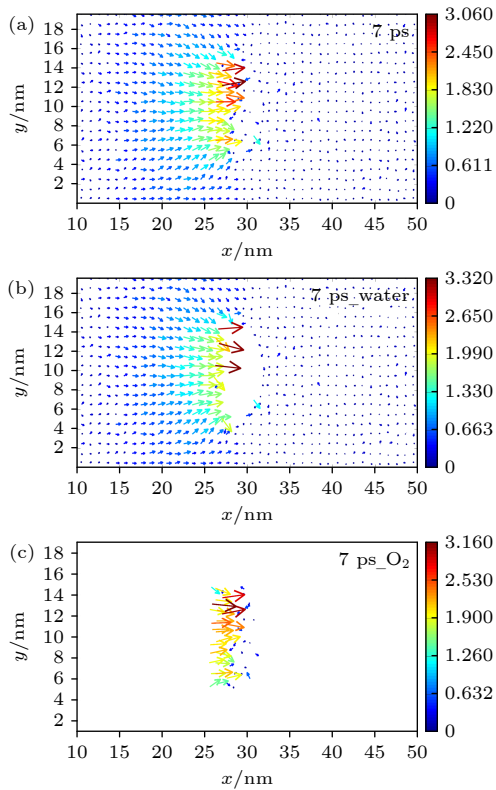


图 16 7 ps 时 $u_{1t5}(u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下含氧气纳米气泡 (1409 个氧气分子) 塌陷后在 yz 平面内的粒子速度矢量分布 (a) 水分子和氧气分子; (b) 只有水分子; (c) 只有氧气分子

Fig. 16. The particle velocity vector distribution in the yz plane after the collapse of oxygen-containing nanobubble (1409 oxygen molecules) at 7 ps under the condition of $u_{1t5}(u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps): (a) Water molecules and oxygen molecules; (b) only water molecules; (c) only oxygen molecules.

$u_{1t5}(u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下, 真空和含氧气纳米气泡 (733 个氧气分子) 在 14 ps 时的速度矢量分布如图 17 所示. 图 17(a) 中被黑色虚线标注的位置为氧气分子所在的位置, 为了方便比较氧气分子对纳米射流的影响, 图 17(b) 中的相同位置也被标注. 纳米气泡的直径为 14 nm. 14 ps 时, 含氧气纳米气泡 (733 个氧气分子) 完全塌陷后的纳米射流的最大速度为 1.35 km/s, 小于真空纳米气泡完全塌陷后的纳米射流的最大速度 (1.44 km/s), 且含氧气纳米气泡 (733 个氧气分子) 完全塌陷后, 位于纳米射流区域的部分方格 (每个方格约含有 100 个原子) 的速度小于真空纳米气泡的. 主要是因为, 在纳米气泡完全塌陷时里面的氧气分子聚集在一处, 随着纳米射流的作用, 位于纳米射流前端的氧气分子既向 $+z$ 方向运动, 内部凹陷也在加深 (此处描述如前面图 3、图 4 中二氧化碳的情况), 消耗了纳米射流的能量, 导致其速度减小.

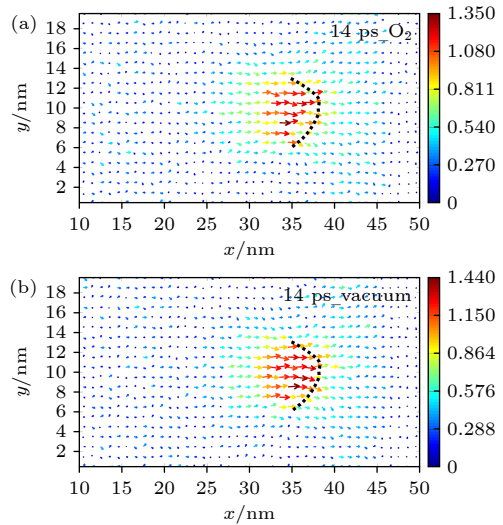


图 17 14 ps 时 $u_{1t5}(u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下真空和含氧气纳米气泡 (733 个氧气分子) 塌陷后在 yz 平面内的粒子速度矢量分布 (a) 含氧气纳米气泡; (b) 真空纳米气泡

Fig. 17. The particle velocity vector distribution in the yz plane after the collapse of vacuum and oxygen-containing nanobubbles (733 oxygen molecules) at 14 ps under the condition of $u_{1t5}(u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps): (a) Oxygen-containing nanobubble; (b) vacuum nanobubble.

真空与含二氧化碳纳米气泡 (分别含 718 个和 1368 个二氧化碳分子) 塌陷形成的纳米射流在不同时刻的最大速度如图 18 所示. 纳米气泡的直径为 14 nm, 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时

间 $\tau_s = 5$ ps. 6 ps 时真空纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度达到最大, 为 3.26 km/s, 含 718 个二氧化碳分子的纳米气泡在 8 ps 时纳米射流最大速度达到最大, 为 3.4 km/s, 含 1368 个二氧化碳分子的纳米气泡在 7 ps 时纳米射流最大速度达到最大, 为 2.77 km/s. 10 ps 以后, 含二氧化碳纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度小于真空的. 结果表明, 含二氧化碳纳米气泡与前面分析的含氧气纳米气泡出现的现象一致.

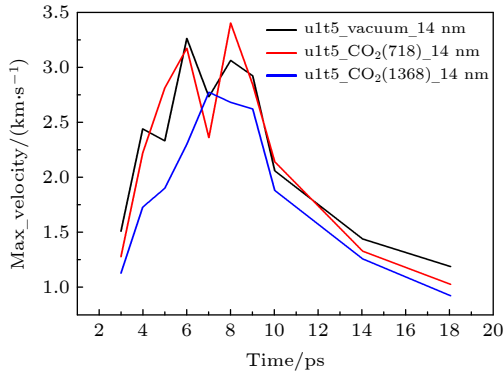


图 18 u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下不同时刻真空和含二氧化碳纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 18. The maximum velocity of the nanojet formed by the collapse of vacuum and carbon dioxide-containing nanobubbles at different moments under u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

活塞运动时间被减少, 即冲击波的冲量下降的情况下 (由 u1t5 变为 u1t3), 真空、含 1409 个氧气分子和 1368 个二氧化碳分子的纳米气泡塌陷形成的纳米射流在不同时刻的最大速度如图 19 所示. 纳米气泡的直径为 14 nm, 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 $\tau_s = 3$ ps. 当冲击波的冲量减小后, 真空与含气体纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度差异更明显, 真空纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度在 11 ps 时达到最大, 为 2.97 km/s, 但分别含 1368 个二氧化碳分子和 1409 个氧气分子的纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度均在 12 ps 时达到最大, 为 1.64 km/s. 以上结果说明, 纳米气泡中含有的气体分子对小冲量冲击波诱导塌陷纳米气泡形成的纳米射流的削弱作用更明显. 由于冲击波冲量较小, 气泡完全塌陷后 (18 ps 以后), 纳米射流的最大速度较小, 约为 0.6 km/s.

不同冲量下 (u1t3 和 u1t5) 真空纳米气泡塌陷

形成的纳米射流的最大速度如图 20 所示. 纳米气泡的直径为 14 nm, 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 τ_s 分别为 3 和 5 ps. 主要在以下两个方面差异明显: 1) 塌陷时间. 图 18 中两条红色虚线所指的时刻分别代表 u1t5 条件下纳米气泡开始塌陷的时刻 (3 ps) 和完全塌陷的时刻 (9 ps), 两条黑色虚线所指的时刻分别代表 u1t3 条件下纳米气泡开始塌陷的时刻 (5 ps) 和完全塌陷的时刻 (18 ps), u1t5 条件下塌陷时间为 6 ps, u1t3 条件下塌陷持续时间较长, 为 13 ps. 2) 纳米射流的最大速度. u1t5 条件下纳米射流最大速度的最大值为 3.26 km/s, 而 u1t3 条件下为 2.97 km/s. 纳米气泡完全塌陷时, u1t5 条件下纳米射流的最大速度为

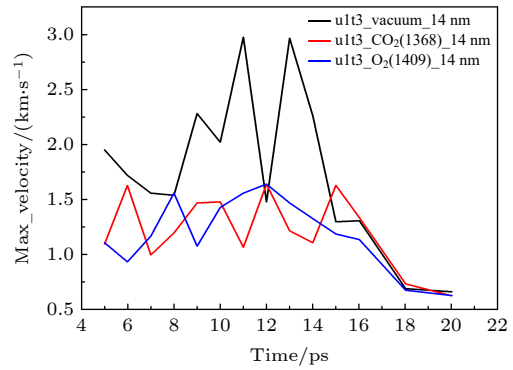


图 19 小冲量条件下 (u1t3) 不同时刻真空、含氧气和二氧化碳纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 19. Under small impulse conditions (u1t3), the maximum velocity of the nanojet formed by the collapse of vacuum, oxygen and carbon dioxide nanobubbles. The diameter of the nanobubble is 14 nm.

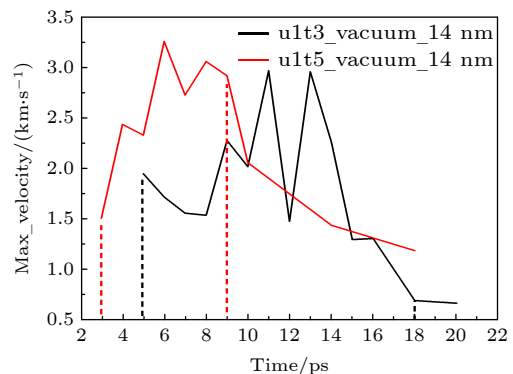


图 20 不同冲量下 (u1t5 和 u1t3) 真空纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 20. The maximum velocity of the nanojet formed by the collapse of vacuum nanobubbles under different impulses (u1t5 and u1t3). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

2.92 km/s, 而 u1t3 条件下为 0.696 km/s, 说明 u1t5 条件下纳米射流的冲击力较 u1t3 条件增强很多. 综上所述, 相对于 u1t5, u1t3 条件下纳米气泡的塌陷时间持续较长, 且塌陷后射流最大速度较小, 小冲量条件下纳米射流的冲击力较大冲量条件下减弱很多.

图 21 给出了不同直径的含气体纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度. 直径分别为 14 和 10 nm, 14 nm 纳米气泡分别含 718 个二氧化碳分子和 733 个氧气分子, 10 nm 纳米气泡分别含 223 个二氧化碳分子和 232 个氧气分子, 二氧化碳分子取自同一密度的二氧化碳气体, 氧气分子同样. 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 $\tau_s = 5$ ps. 直径为 14 nm 的含 718 个二氧化碳分子的纳米气泡在 8 ps 时纳米射流最大速度达到最大, 为 3.4 km/s, 而直径为 10 nm 的含 223 个二氧化碳分子的纳米气泡在 8 ps 时纳米射流最大速度达到最大, 为 2.72 km/s. 同样地, 直径为 14 nm 的含 733 个氧气分子的纳米气泡在 7 ps 时纳米射流最大速度达到最大, 为 3.66 km/s, 而直径为 10 nm 的含 232 个氧气分子的纳米气泡在 7 ps 时纳米射流最大速度达到最大, 为 3.14 km/s. 对于不同直径的含二氧化碳纳米气泡来说, 除了 4 ps 时刻, 其

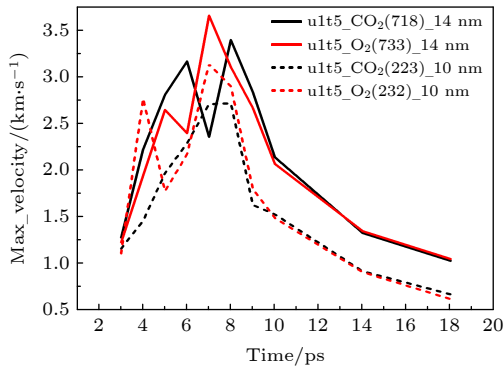


图 21 u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下不同直径的 (14 和 10 nm) 含气体纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度. 14 nm 纳米气泡分别含 718 个二氧化碳分子和 733 个氧气分子, 10 nm 纳米气泡分别含 223 个二氧化碳分子和 232 个氧气分子

Fig. 21. The maximum velocity of the nanojet formed by the collapse of gas-containing nanobubbles with different diameters (14 and 10 nm) under the condition of u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps). Nanobubbles with a diameter of 14 nm contain 718 carbon dioxide molecules and 733 oxygen molecules, respectively, and nanobubbles with a diameter of 10 nm contain 223 carbon dioxide molecules and 232 oxygen molecules, respectively.

余时刻 10 nm 纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度均小于 14 nm 的. 同样, 对于不同直径的含氧气纳米气泡来说, 除了 7 ps 时刻以外, 其余时刻 10 nm 纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度均小于 14 nm 的. 结果表明, 较大直径的纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度较大, 说明其冲击力较强.

3.5 含气纳米气泡塌陷后的形态分布

纳米气泡完全塌陷后, 含气纳米气泡中的气体分子不光随纳米射流向 +z 方向运动, 气体分子整体也会发生内部凹陷. 含不同气体分子数的纳米气泡塌陷后的形态如图 22 所示. 图中截取的时间为 18 ps, 此时冲击波到达盒子另一端. 图 22(a)、图 22(b)、图 22(d) 和图 22(e) 显示全部的气体分子, 图 22(c) 和图 22(f) 在 x 方向截取的厚度为 4 nm. 突出显示的呈红蓝色的为二氧化碳分子 (图 22(a)、图 22(b) 和图 22(c)), 突出显示的呈红

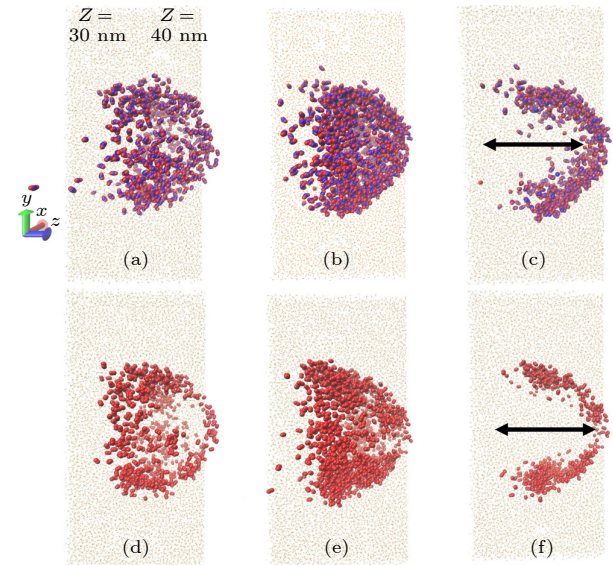


图 22 u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下含不同气体分子数的纳米气泡塌陷后形态比较 (a) 718 个二氧化碳分子; (b) 1368 个二氧化碳分子; (c) 图 (b) 的截面图; (d) 733 个氧气分子; (e) 1409 个氧气分子; (f) 图 (e) 的截面图. 图中水分子截取的范围为 $z = 30-40$ nm 之间. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 22. Under u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps), the shape comparison of nanobubbles with different numbers of gas molecules after collapse: (a) 718 carbon dioxide molecules; (b) 1368 carbon dioxide molecules; (c) the cross-sectional view of Fig. (b); (d) 733 oxygen molecules; (e) 1409 oxygen molecules; (f) the cross-sectional view of Fig. (e). The intercepted range of water molecules in the figure is between $z = 30-40$ nm. The diameter of the nanobubble is 14 nm.

色的为氧气分子 (图 22(d)、图 22(e) 和图 22(f)). 周围均为水分子, 在 x 方向截取的厚度为 1 nm. 18 ps 时, 与含 1368 个二氧化碳分子的纳米气泡相比, 含 718 个二氧化碳分子的纳米气泡在 z 方向运动更远, 超出长度约 0.5 nm, 且前端有较大的孔洞出现. 含 718 个二氧化碳分子的纳米气泡的凹陷深度为 8 nm, 含 1368 个二氧化碳分子的纳米气泡的凹陷深度为 7 nm. 主要是因为, 与含 1368 个二氧化碳分子的纳米气泡相比, 含 718 个二氧化碳分子的纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度较大. 含氧气纳米气泡与含二氧化碳纳米气泡的情况一样.

纳米气泡在不同冲量下 (u1t3 和 u1t5) 塌陷后的形态如图 23 所示. 由于小冲量下气体分子较聚集, 图 23(b) 和图 23(e) 在 x 方向截取的厚度为 2 nm. 图中截取的时刻是冲击波到达盒子另一端时的时间, u1t3 条件下截取的时刻是 28 ps, u1t5 条件下截取的时刻是 18 ps. u1t3 条件下, 二氧化碳分子位于 $z = 26\text{--}35$ nm 之间, 内部凹陷浅, 凹陷深度为 3 nm. u1t5 条件下, 二氧化碳分子位于 $z = 31.5\text{--}40.5$ nm 之间, 凹陷深度为 7 nm. u1t3 条件下, 氧气分子位于 $z = 27\text{--}35$ nm 之间, 凹陷深度为 2 nm. u1t5 条件下, 氧气分子位于 $z = 31\text{--}40.5$ nm 之间, 凹陷深度为 7 nm. 与小冲量条件下相比, 在大冲量条件下, 含一样多分子数的纳米气泡在 z 方向的位置更远, 超出距离约为 5 nm, 气泡内部凹陷更深, 至少深 4 nm. 主要是由大冲量条件下纳米射流的最大速度较大导致的.

图 24 给出了不同直径的含气体纳米气泡完全塌陷前后的形态变化. 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 $\tau_s = 5$ ps. 对于含二氧化碳的纳米气泡, 8 ps 时 10 nm 纳米气泡完全塌陷 (图 24(d)), 此时二氧化碳分子整体的排列如球面的一部分分布, 14 nm 纳米气泡还未完全塌陷 (图 24(a)). 18 ps 时两种直径的纳米气泡 (图 24(b) 和图 24(e)) 中间区域均发生凹陷, 14 nm 纳米气泡的凹陷深度为 8 nm (图 24(c)), 10 nm 纳米气泡的凹陷深度为 6 nm (图 24(f)). 18 ps 时 14 nm 纳米气泡的二氧化碳分子主体位于 $z = 33\text{--}41$ nm 之间 (图 24(b)), 10 nm 纳米气泡的二氧化碳分子主体位于 $z = 32\text{--}39$ nm 之间 (图 24(e)), 14 nm 纳米气泡的气体分子在 z 方向的位置更远, 超出距离约为 2 nm. 主要是由大直径纳米气泡塌陷形成的纳米

射流的最大速度较大导致的. 含氧气分子纳米气泡塌陷时气泡形态变化与二氧化碳一致.

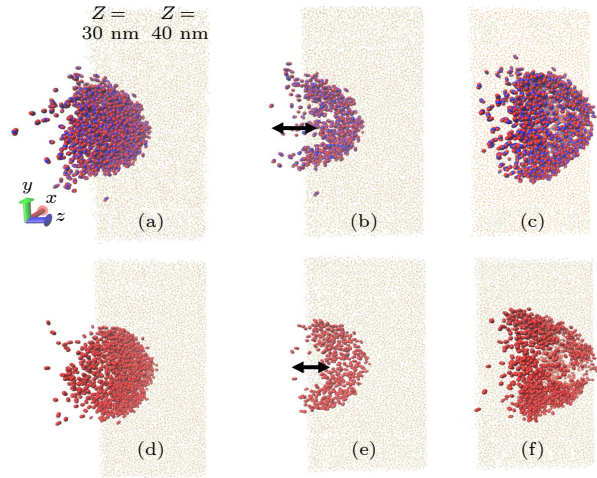


图 23 不同冲量下纳米气泡塌陷后形态比较 (a) u1t3, 1368 个二氧化碳分子; (b) 图 (a) 的截面图; (c) u1t5, 1368 个二氧化碳分子; (d) u1t3, 1409 个氧气分子; (e) 图 (d) 的截面图; (f) u1t5, 1409 个氧气分子. 图中水分子截取的范围为 $z = 30\text{--}40$ nm 之间. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 23. The shape comparison of nanobubbles after crushing under different impulses: (a) u1t3, 1368 carbon dioxide molecules; (b) the cross-sectional view of Fig. (a); (c) u1t5, 1368 carbon dioxide molecules; (d) u1t3, 1409 oxygen molecules; (e) the cross-sectional view of Fig. (d); (f) u1t5, 1409 oxygen molecules. The intercepted range of water molecules in the figure is between $z = 30\text{--}40$ nm. The diameter of the nanobubble is 14 nm.

3.6 二维密度分布

不同时刻含二氧化碳纳米气泡 (1368 个二氧化碳分子) 完全塌陷前后的二维密度分布如图 25 所示. 图例中单位为 g/cc (1 g/cc = 1 g/cm³ = 1000 kg/m³). 纳米气泡的直径为 14 nm, 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 $\tau_s = 5$ ps. 初始时刻 (图 25(a)) 中心位于 $z = 25$ nm 处的蓝色低密度区域为纳米气泡所在位置, 由于图中 y 和 z 轴未等比例显示, 纳米气泡没有呈圆形分布. 当冲击波经过后, 在 $z < 10$ nm 的区域 (图 25(a)) 密度发生跃变, 密度峰值为 1390 kg/m³, 由于活塞已经运动了 5 ps, 故 $z = 60$ nm 附近的区域密度为零. 然后冲击波继续向 $+z$ 方向传播, 3 ps (图 25(b)) 时冲击波前沿到达纳米气泡近端, 此时密度峰值为 1358 kg/m³, 密度峰值在衰减. 6 ps (图 25(c)) 时冲击波已经诱导纳米气泡塌陷至一半, 密度峰值为 1154 kg/m³. 9 ps (图 25(d)) 时纳米气泡完全塌陷,

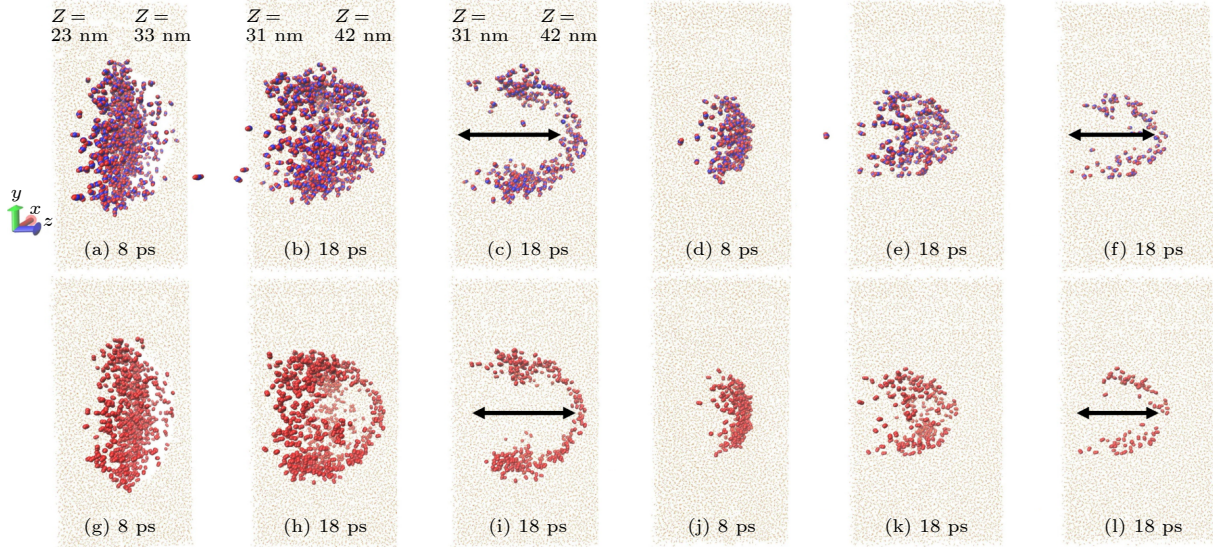


图 24 不同直径的含气纳米气泡完全塌陷前后的形态变化 (a)–(c) 直径为 14 nm 的含 718 个二氧化碳分子的纳米气泡, 其中 (c) 是 (b) 的截面图; (d)–(f) 直径为 10 nm 的含 223 个二氧化碳分子的纳米气泡, 其中 (f) 是 (e) 的截面图; (g)–(i) 直径为 14 nm 的含 733 个氧气分子的纳米气泡, 其中 (i) 是 (h) 的截面图; (j)–(l) 直径为 10 nm 的含 232 个氧气分子的纳米气泡, 其中 (l) 是 (k) 的截面图. 8 ps 时水分子截取的范围为 $z = 23\text{--}33$ nm 之间, 18 ps 时水分子截取的范围为 $z = 31\text{--}42$ nm 之间

Fig. 24. The morphological changes of gas-containing nanobubbles with different diameters before and after they are completely collapsed: (a)–(c) nanobubble with a diameter of 14 nm containing 718 carbon dioxide molecules, where (c) is the cross-sectional view of (b); (d)–(f) nanobubble with a diameter of 10 nm containing 223 carbon dioxide molecules, where (f) is the cross-sectional view of (e); (g)–(i) nanobubble with a diameter of 14 nm containing 733 oxygen molecules, where (i) is the cross-sectional view of (h); (j)–(l) nanobubble with a diameter of 10 nm containing 232 oxygen molecules, where (l) is the cross-sectional view of (k). The intercepted range of water molecules at 8 ps is between $z = 23\text{--}33$ nm, and the intercepted range of water molecules at 18 ps is between $z = 31\text{--}42$ nm.

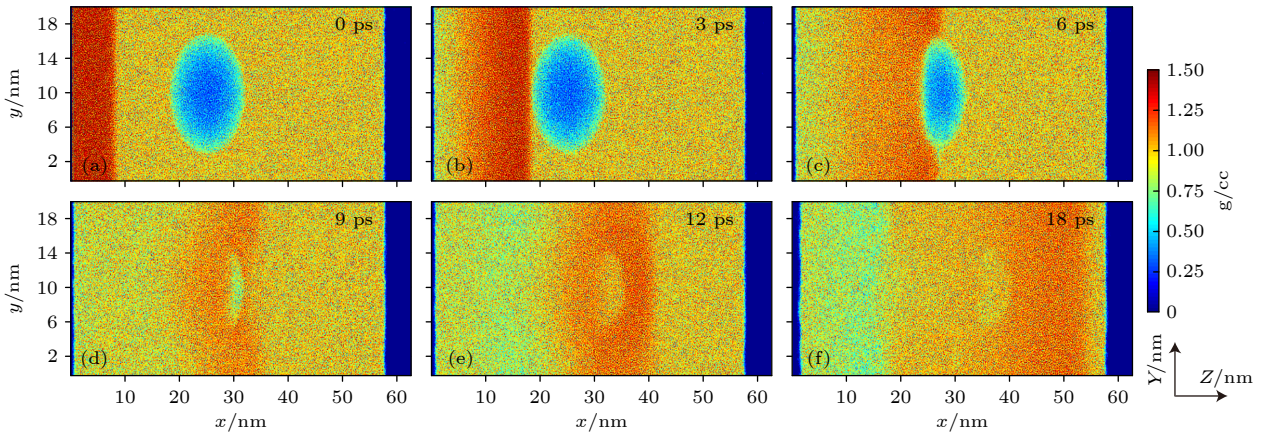


图 25 $u1t5(u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下不同时刻含二氧化碳纳米气泡 (1368 个二氧化碳分子) 完全塌陷前后的二维密度分布. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 25. The two-dimensional density distribution before and after the complete collapse of carbon dioxide-containing nanobubble (1368 carbon dioxide molecules) at different moments under the condition of $u1t5$ ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

密度峰值为 1119 kg/m³, 与 0 ps 时 (1390 kg/m³) 相比, 已经降低很多, 在 $z \approx 30$ nm 处出现小月牙形的低密度区, 结合前面纳米气泡形态变化部分的讨论可知, 当含二氧化碳纳米气泡完全塌陷时, 二氧化碳分子被挤压至纳米气泡远端, 此时二氧化

碳分子整体的排列如球面的一部分, 因此该低密度区域是压缩到一起的二氧化碳分子造成. 接着, 冲击波继续向 $+z$ 方向传播, 低密度区域也向 $+z$ 反向运动 (图 25(e)), 密度峰值有所增大, 12 ps 时密度峰值为 1190 kg/m³. 18 ps (图 25(f)) 时密度衰减至

1175 kg/m³, 冲击波前沿位于 $z \approx 54$ nm 处, 由图 22(b) 可知, 位于 $z \approx 35\text{--}40$ nm 之间的低密度区域是由于位于此处的二氧化碳分子造成.

16 ps 时真空与含二氧化碳纳米气泡 (分别含 718 个和 1368 个二氧化碳分子) 塌陷后的二维密度分布如图 26 所示, 纳米气泡的直径为 14 nm, 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 $\tau_s = 5$ ps. 当纳米气泡中填充了二氧化碳分子后, 除了二氧化碳分子被压缩的区域呈低密度外 (二氧化碳分子数越多, 低密度区域更明显), 红色区域与真空纳米气泡塌陷后分布一致, 再次证明了并未影响冲击波的传播. 相同纳米气泡直径与冲击条件下, 含氧气纳米气泡 (分别含 733 个和 1409 个氧气分子) 塌陷后二维密度分布与之类似.

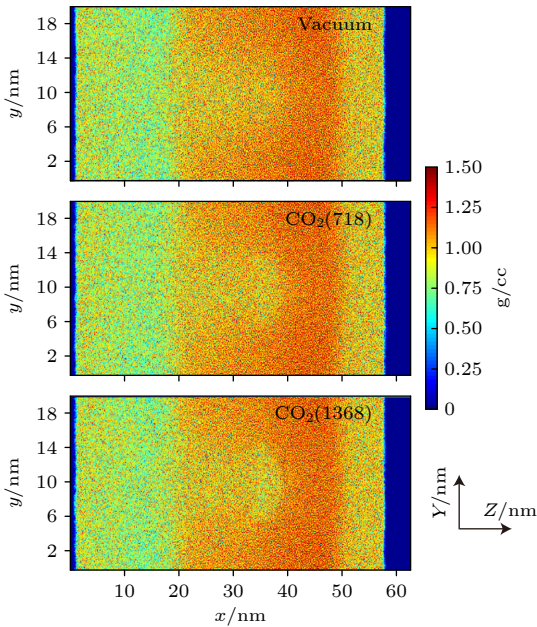


图 26 u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps) 条件下 16 ps 时真空与含二氧化碳纳米气泡完全塌陷后的二维密度分布. 纳米气泡的直径为 14 nm

Fig. 26. The two-dimensional density distribution before and after the complete collapse of vacuum and carbon dioxide-containing nanobubbles at 16 ps under the condition of u1t5 ($u_p = 1$ km/s, $\tau_s = 5$ ps). The diameter of the nanobubble is 14 nm.

图 27 给出了不同冲量下 (u1t5 和 u1t3) 含氧气纳米气泡 (1409 个氧气分子) 完全塌陷后的二维密度分布. 图中选取的时刻为冲击波到达盒子另一端时的时间. u1t5 条件下 (大冲量), 存在明显的密度跃变, 密度峰值为 1178 kg/m³, 而 u1t3 条件下 (小冲量), 密度峰值为 1039 kg/m³, 密度跃变不明显. 与 u1t5 条件相比, u1t3 条件下位于 $z \approx 32$ nm

处 (图 27(a)) 的低密度区域出现蓝色区域, 说明氧气分子更聚集, 图 23(d)—图 23(f) 中的氧气分子的微观结构分布证实了这一点.

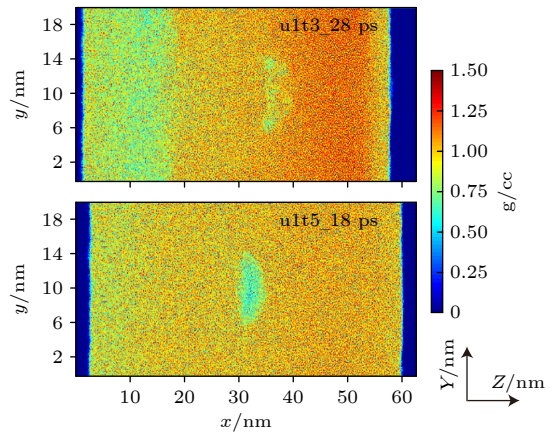


图 27 不同冲量下 (u1t5 和 u1t3) 含氧气纳米气泡 (1409 个氧气分子) 完全塌陷后的二维密度分布. 纳米气泡的直径为 14 nm. u1t5 条件下为 18 ps 时刻, u1t3 条件下为 28 ps 时刻

Fig. 27. The two-dimensional density distribution before and after the complete collapse of oxygen-containing nanobubbles (1409 carbon dioxide molecules) under different impulses (u1t5 and u1t3). The diameter of the nanobubble is 14 nm. It is 18 ps under condition of u1t5 and 28 ps under condition of u1t3.

不同直径的含氧气纳米气泡完全塌陷前后的二维密度分布如图 28 所示, 直径分别为 14 和 10 nm, 14 nm 纳米气泡含 733 个氧气分子, 10 nm 纳米气泡含 232 个氧气分子, 这两者取自同一密度的氧气气体, 粒子速度 $u_p = 1$ km/s、活塞运动时间 $\tau_s = 5$ ps. 5 ps 时 (图 28(a) 和图 28(d)) 不同直径的纳米气泡均在塌陷中. 8 ps 时 (图 28(b) 和图 28(e)) 10 nm 纳米气泡由于直径较小, 已完全塌陷, 密度峰值为 1213 kg/m³, 14 nm 纳米气泡还未完全塌陷, 密度峰值为 1097 kg/m³. 观察图 28(c) 和图 28(f) 后对比发现, 10 nm 纳米气泡塌陷后, 冲击波前沿位置在 +z 方向更远, 冲击波传播较快. 14 nm 纳米气泡由于直径较大, 含氧气分子多, 16 ps 时可看到氧气分子聚集的低密度区域, 在 $z \approx 35\text{--}40$ nm 之间 (图 28(f)), 而 10 nm 纳米气泡由于氧气分子较少, 看不到低密度区域, 图 24(h) (14 nm) 和图 24(k) (10 nm) 氧气分子的微观结构分布证实了这一点. 16 ps 时, 14 nm 纳米气泡的密度峰值为 1185 kg/m³, 10 nm 纳米气泡的密度峰值为 1206 kg/m³.

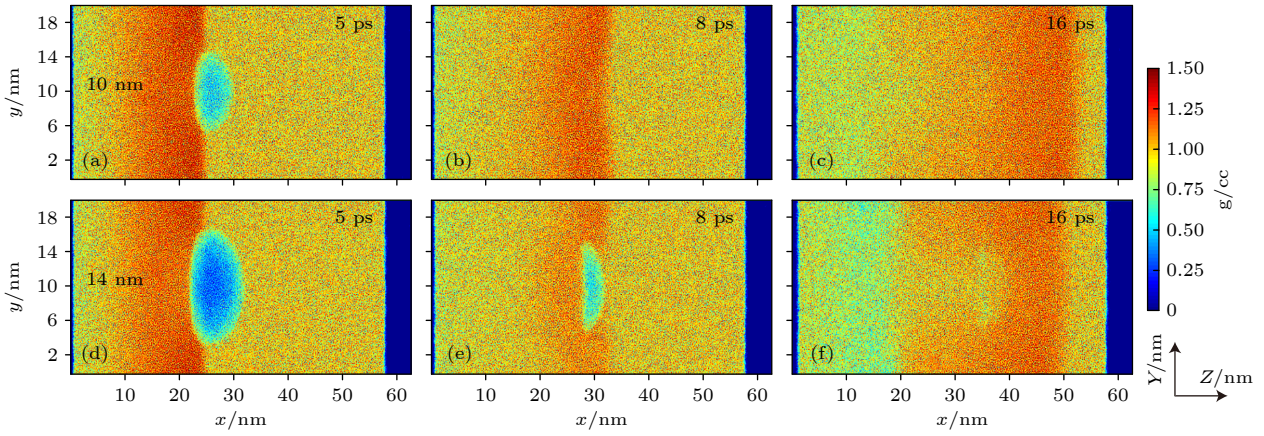


图 28 $u1t5(u_p = 1 \text{ km/s}, \tau_s = 5 \text{ ps})$ 条件下不同直径的 (14 和 10 nm) 含氧气纳米气泡完全塌陷前后的二维密度分布. 14 nm 纳米气泡含 733 个氧气分子, 10 nm 纳米气泡含 232 个氧气分子

Fig. 28. The two-dimensional density distribution before and after the complete collapse of oxygen-containing nanobubbles with different diameters (14 and 10 nm) under the condition of $u1t5 (u_p = 1 \text{ km/s}, \tau_s = 5 \text{ ps})$. A nanobubble with a diameter of 14 nm contains 733 oxygen molecules, and a nanobubble with a diameter of 10 nm contains 232 oxygen molecules.

4 结 论

本文利用分子动力学探讨了冲击波诱导水中真空及含气体分子纳米气泡的塌陷行为, 分析了纳米气泡完全塌陷前后的密度、压力、速度矢量分布及形态变化等. 密度和压力先衰减, 待纳米气泡完全塌陷时, 有所增大, 随后又衰减, 但衰减速度较开始时缓慢. 冲击波诱导纳米气泡塌陷时, 粒子朝气泡中心运动, 且速度迅速增大, 形成纳米射流. 气泡完全塌陷后, 纳米射流继续向 $+z$ 方向运动, 由于前方粒子的阻挡, 速度开始下降, 射流头部呈蘑菇头形状. 含气气泡形态从最初的球形到半球形分布, 再到纳米气泡完全塌陷时呈球面状分布, 待气泡完全塌陷后, 气体分子随射流继续向 $+z$ 方向运动, 气泡中心区域发生凹陷. 不同气体分子数、冲击波的冲量和纳米气泡的直径等因素会对纳米气泡的塌陷行为造成影响.

1) 不同气体分子数. 当真空纳米气泡中加入气体分子后, 除了气泡处的密度分布外, 其他区域及冲击波前沿等的密度均与真空一致, 说明没有影响冲击波的传播, 通过冲击波前沿压力分布也证实了这点. 在纳米气泡完全塌陷前, 与真空和含 1368 个二氧化碳分子 (或含 1409 个氧气分子) 的纳米气泡相比, 含 718 个二氧化碳分子 (或含 733 个氧气分子) 的纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度较大. 在气泡完全塌陷后气体分子致使纳米射流的速度衰减, 最终含气体分子的纳米射流

的最大速度小于真空的. 当冲击波到达盒子另一端时, 相同条件下, 与含 1368 个二氧化碳分子 (或含 1409 个氧气分子) 的纳米气泡相比, 含 718 个二氧化碳分子 (或含 733 个氧气分子) 的纳米气泡在 z 方向运动更远, 超出长度约 0.5 nm, 且前端有较大的孔洞出现, 凹陷深度更深 1 nm.

2) 不同冲量. 相对于 $u1t3$ 条件 (小冲量), $u1t5$ 条件下 (大冲量) 直径为 14 nm 的纳米气泡的塌陷时间由 13 ps ($u1t3$) 缩短为 6 ps, 同一时刻冲击波经过时的密度、压力更大. 直径为 14 nm 的真空纳米气泡完全塌陷时, $u1t5$ 条件下纳米射流的最大速度为 2.92 km/s, 而 $u1t3$ 条件下为 0.696 km/s, 说明大冲量下 ($u1t5$) 纳米射流的冲击力较小冲量 ($u1t3$) 增强很多. 在大冲量条件下 ($u1t5$), 含一样多分子数的纳米气泡在 z 方向的位置更远, 超出距离约为 5 nm, 气泡内部凹陷更深, 至少深 4 nm.

3) 不同直径. $u1t5$ 条件下, 与直径为 10 nm 纳米气泡相比, 直径为 14 nm 的纳米气泡的塌陷时间由 5 ps 增加为 6 ps, 同一时刻, 冲击波经过时的密度、压力较小, 冲击波传播较慢. 除了个别时刻, 其余时刻直径为 14 nm 的纳米气泡塌陷形成的纳米射流的最大速度均大于 10 nm 的, 说明较大直径的纳米气泡塌陷形成的纳米射流的冲击力更强. 当冲击波到达盒子另一端时, 相同条件下, 与直径为 10 nm 的含二氧化碳 (223 个二氧化碳分子) 纳米气泡相比, 直径为 14 nm 的含二氧化碳纳米气泡的凹陷深度深 2 nm, 二氧化碳分子主体在 z 方向的位置更远, 超出距离约为 2 nm.

本文的研究对人体组织的爆炸创伤评估有重要参考意义,更有助于拓宽冲击波在生物医疗方面的应用.

参考文献

- [1] Mayorga M A 1997 *Toxicology* **121** 17
- [2] Scott T E, Kirkman E, Haque M, Gibb I E, Mahoney P, Hardman J G 2017 *Br. J. Anaesth.* **118** 311
- [3] Hoge C W, Megurk D, Thomas J L, Cox A L, Engel C C, Castro C A 2008 *N. Engl. J. Med.* **358** 453
- [4] Rosenfeld J V, McFarlane A C, Bragge P, Armonda R A, Grimes J B, Ling G S 2013 *Lancet Neurol.* **12** 882
- [5] Li X L, Shen Y, Lai X L, Ma Y B, Liu H, Wang L L, Chen Q 2016 *Med. J. Chin. People's Liberation Army* **41** 689 (in Chinese) [李新岭, 沈岳, 赖西南, 马彦波, 刘海, 王丽丽, 陈强 2016 *解放军医学杂志* **41** 689]
- [6] Chen J G, Zhang D F, Wang C H, Li Zh X, Dong Y, Hou L J 2019 *Acad. J. Second Military Med. Univ.* **40** 763 (in Chinese) [陈吉钢, 张丹枫, 王春晖, 李振兴, 董艳, 侯立军 2019 *第二军医大学学报* **40** 763]
- [7] Li Z J, You X C, Liu Z L, Du Z B, Zhang Y, Yang C, Zhuang Z 2020 *Explosion and shock* **40** 100 (in Chinese) [栗志杰, 由小川, 柳占立, 杜智博, 张亿, 杨策, 庄茁 2020 *爆炸与冲击* **40** 100]
- [8] Axelsson H, Yelverton J T 1996 *J. Trauma Acute Care Surg.* **40** S31
- [9] Stuhmiller J H, Ho H H, Vorst M J V, Dodd K T, Fitzpatrick T, Mayorga M 1996 *J. Biomech.* **29** 227
- [10] Zhou J, Tao G, Wang J 2012 *Explosion and shock* **32** 418 (in Chinese) [周杰, 陶钢, 王健 2012 *爆炸与冲击* **32** 418]
- [11] Xu C, Ju Y Y, Hu M, Long R R, Ruan D K 2019 *Translational Medicine Journal* **8** 179 (in Chinese) [徐成, 巨圆圆, 胡明, 龙仁荣, 阮狄克 2019 *转化医学杂志* **8** 179]
- [12] Adhikari U, Goliaei A, Berkowitz M L 2016 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** 32638
- [13] Larina I V, Evers B M, Esenaliev R O 2005 *Anticancer Res.* **25** 149
- [14] Parker J L, Claesson P M, Attard P 1994 *J. Phys. Chem.* **98** 8468
- [15] Ishida N, Inoue T, Miyahara M, Higashitani K 2000 *Langmuir* **16** 6377
- [16] Lou S T, Ouyang Z Q, Zhang Y, Li X J, Yang F J 2000 *J. Vac. Sci. Technol., B* **18** 2573
- [17] Ohgaki K, Khanh N Q, Joden Y, Tsuji A, Nakagawa T 2010 *Chem. Eng. Sci.* **65** 1296
- [18] Peng H, Birkett G R, Nguyen A V 2015 *Adv. Colloid Interface Sci.* **222** 573
- [19] Bunkin N F, Shkirin A V, Suyazov N V, Babenko V A, Sychev A A, Penkov N V, Belosludtsev K N, Gudkov S V 2016 *J. Phys. Chem. B* **120** 1291
- [20] Pan G, He G, Zhang M, Zhou Q, Tyliczszak T, Tai R, Guo J, Bi L, Wang L, Zhang H 2016 *Langmuir* **32** 11133
- [21] Ohl S W, Klaseboer E, Khoo B C 2015 *Interface Focus* **5** 20150019
- [22] Ding Z, Gracewski S M 1996 *J. Fluid Mech.* **309** 183
- [23] Hawker N, Ventikos Y 2012 *J. Fluid Mech.* **701** 59
- [24] Vedadi M, Choubey A, Nomura K, Kalia R K, Nakano A, Vashishta P, Van Duin A C T 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 014503
- [25] Choubey A, Vedadi M, Nomura K, Kalia R K, Nakano A, Vashishta P 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 023701
- [26] Santo K P, Berkowitz M L 2014 *J. Chem. Phys.* **140** 054906
- [27] Santo K P, Berkowitz M L 2015 *J. Phys. Chem. B* **119** 8879
- [28] Adhikari U, Goliaei A, Berkowitz M L 2015 *J. Phys. Chem. B* **119** 6225
- [29] Fu H, Comer J, Cai W, Chipot C 2015 *J. Phys. Chem. Lett.* **6** 413
- [30] Lau E Y, Berkowitz M L, Schwegler E 2016 *Biophys. J.* **110** 147
- [31] Goliaei A, Adhikari U, Berkowitz M L 2015 *ACS Chem. Neurosci.* **6** 1296
- [32] Wu Y T, Adnan A 2017 *Sci. Rep.* **7** 1
- [33] Vedadi M H, Haas S 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 154105
- [34] Sun D D, Lin X, Zhang Z, Gu N 2016 *J. Phys. Chem. C* **120** 18803
- [35] Lu X M, Yuan B, Zhang X R, Yang K, Ma Y Q 2017 *Appl. Phys. Lett.* **110** 023701
- [36] Nan N, Si D, Hu G 2018 *J. Chem. Phys.* **149** 074902
- [37] Van Der Spoel D, Lindahl E, Hess B, Groenhof G, Mark A E, Berendsen H J 2005 *J. Comput. Chem.* **26** 1701
- [38] Hess B, Kutzner C, van der Spoel D, Lindahl E 2008 *J. Chem. Theory Comput.* **4** 435
- [39] Abraham M J, Murtola T, Schulz R, Páll S, Smith J C, Hess B, Lindahl E 2015 *SoftwareX* **1** 19
- [40] Oostenbrink C, Villa A, Mark A E, Van Gunsteren W F 2004 *J. Comput. Chem.* **25** 1656
- [41] Berendsen H J, Postma J P, van Gunsteren W F, Hermans J 1981 *Intermolecular Forces* (Dordrecht: Springer) pp331–342
- [42] Berweger C D, Gunsteren W F V, Müller-Plathe F 1995 *Chem. Phys. Lett.* **232** 429
- [43] Cygan R T, Romanov V N, Myshakin E M 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 13079
- [44] Malde A K, Zuo L, Breeze M, Stroet M, Poger D, Nair P C, Oostenbrink C, Mark A E 2011 *J. Chem. Theory Comput.* **7** 4026
- [45] Koziara K B, Stroet M, Malde A K, Mark A E 2014 *J. Comput.-Aided Mol. Des.* **28** 221
- [46] Stroet M, Caron B, Visscher K M, Geerke D P, Malde A K, Mark A E 2018 *J. Chem. Theory Comput.* **14** 5834
- [47] Lau E Y, Berkowitz M L, Schwegler E 2016 *Biophysical Journal* **110** 147
- [48] Wang X F, Tao G, Wen P, Ren B X, Pang C Q, Du C X 2020 *J. Phys. Chem. B* **124** 9535
- [49] Humphrey W, Dalke A, Schulten K 1996 *J. Mol. Graphics* **14** 33
- [50] Ollila O S, Risselada H J, Louhivuori M, Lindahl E, Vattulainen I, Marrink S J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 078101
- [51] Vanegas J M, Torres-Sánchez A, Arroyo M 2014 *J. Chem. Theory Comput.* **10** 691
- [52] Torres-Sánchez A, Vanegas J M, Arroyo M 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 258102

Molecular dynamics analysis of shock wave-induced nanobubble collapse in water^{*}

Wang Xiao-Feng¹⁾ Tao Gang^{1)†} Xu Ning²⁾ Wang Peng²⁾
Li Zhao³⁾ Wen Peng¹⁾

1) (*School of Energy and Power Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China*)

2) (*32381 Unit, PLA, Beijing 100072, China*)

3) (*63961 Unit, PLA, Beijing 100012, China*)

(Received 10 January 2021; revised manuscript received 31 January 2021)

Abstract

The nanobubbles contained in the human body are induced to collapse by the shock wave, and thus produce a strong impact and high-speed nanojet, resulting in trauma to human tissues. The collapse of nanobubbles in water caused by shock waves is investigated by molecular dynamics. Nanobubbles are divided into three types: vacuum nanobubble, carbon dioxide nanobubble, and oxygen nanobubble. The influence of factors such as the number of gas molecules, the diameter of the nanobubbles, and the impulse of the shock wave on the bubble collapse are considered separately. The results show that the addition of gas molecules to vacuum nanobubbles does not affect the propagation of shock waves. However, before the nanobubbles are completely collapsed, the maximum velocity of the nanojet formed by the collapse of nanobubbles containing 718 carbon dioxide molecules (or 733 oxygen molecules) is larger than that of vacuum and nanobubbles containing 1368 carbon dioxide molecules (or 1409 oxygen molecules). After the nanobubbles are completely collapsed, the gas molecules cause the velocity of the nanojet to decay, and finally the maximum velocity of the nanojet containing gas molecules is less than that of the vacuum nanojet. In addition, it is also found that the collapse time of nanobubbles is short at high impulse, and the density and pressure when the shock wave passes at the same time are both greater. After the bubble collapses, the maximum velocity of the nanojet is larger, and the impact force is much stronger than that at a small impulse. Larger diameter nanobubble has a longer collapse time, and the density and pressure when the shock wave passes at the same time are both smaller, and the shock wave propagation is slower, but the maximum speed of the nanojet is larger. The impact is stronger. The greater the maximum velocity of the nanojet, the greater the distance that is dispersed by the gas molecules of the gas-containing nanobubbles in the impact direction will be and the deeper the depression.

Keywords: shock wave, nanobubble, collapse, nanojet, molecular dynamics

PACS: 47.55.dd, 47.11.Mn, 47.40.-x

DOI: [10.7498/aps.70.20210058](https://doi.org/10.7498/aps.70.20210058)

^{*} Project supported by the Fundamental Research Fund for the Central Universities, China (Grant No. 30919011239).

[†] Corresponding author. E-mail: taogang@njust.edu.cn