

## 纳米液滴撞击高温平板壁的分子动力学模拟\*

冯山青 龚路远 权生林 郭亚丽† 沈胜强

(大连理工大学能源与动力学院, 热能综合利用技术国家地方联合工程研究中心, 大连 116024)

(2024 年 1 月 6 日收到; 2024 年 3 月 19 日收到修改稿)

采用分子动力学的方法对纳米液滴撞击高温平板壁面产生的 Leidenfrost 现象进行了探究, 分析了液滴撞击不同温度壁面对 Leidenfrost 现象的影响. 结果表明, 随着壁面温度的提升, 液滴蒸发的速度更快, 脱离壁面的时刻越早, 脱离壁面时的速度也越大, 最终悬浮时液滴体积也越大. 通过分析脱离壁面前一时刻液滴内部的密度、温度分布发现, 由于高温壁面具有更高的热通量致使蒸发过程更快进而产生更厚的蒸气层, 该蒸气层将阻碍换热, 使得液滴在壁面温度更高时液滴内部的平均温度越低, 且平均密度越小.

**关键词:** 分子动力学, 液滴, Leidenfrost 现象**PACS:** 31.15xv, 44.35.+c, 47.11.Mn, 47.55.D-**DOI:** 10.7498/aps.73.20240034

## 1 引言

液滴撞击高温壁面的过程广泛存在于日常生活以及工业应用中<sup>[1]</sup>, 例如高温锅具上跳跃的水滴, 喷雾冷却<sup>[2]</sup>、海水淡化过程中液滴撞击换热管道降温<sup>[3]</sup>以及内燃机中油滴撞击气缸壁<sup>[4]</sup>等过程. 液滴撞击高温壁面不同于液滴撞击常温壁面<sup>[5-8]</sup>, 在撞击过程中不仅涉及到液滴形态的动力学的研究, 同时还涉及到液滴蒸发相变的过程, 因此, 液滴撞击高温壁面过程的相关理论较为复杂. 其中值得注意的是当壁面温度达到一定程度时将会产生 Leidenfrost 现象, 即指当液滴与高温壁面接触时, 液滴底部迅速蒸发形成蒸气膜, 并将液滴托举起来, 同时阻碍液滴与壁面之间的换热<sup>[9]</sup>. 由于蒸气膜的存在使得液滴在削减传热量的同时, 也减小了液滴的摩擦阻力. 因此 Leidenfrost 现象一经被发现就吸引了大量学者对其进行研究<sup>[10-13]</sup>. 目前学者们对该现象多集中于实验及宏观角度的研究, 对该现象产生的机理尚不完善准确. 因此已有学者尝

试采用分子动力学从微观角度来分析这一现象产生的机理, 以此来完善 Leidenfrost 现象的产生机理<sup>[14-17]</sup>. 本文将采用分子动力学手段对 Leidenfrost 现象进行模拟, 探究温度对 Leidenfrost 现象生成的机理以及作用, 为实现微流体控制<sup>[18]</sup>、高功率集成电路散热<sup>[19]</sup>以及 Leidenfrost 热机<sup>[20]</sup>等应用提供理论帮助, 从而实现能源的高效利用.

## 2 模型和方法

## 2.1 模型介绍

图 1 为研究液滴撞击高温壁面的物理模型, 该模型由固体平板壁和液滴构成, 其中固体壁面采用铜原子, 液体采用氩原子. 在设置初始模型时, 铜原子和氩原子均采用 FCC(面心立方)晶格结构, 晶格常数分别为 3.615 Å 和 5.8 Å ( $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$ ). 其中模拟盒子大小为  $300 \text{ Å} \times 300 \text{ Å} \times 300 \text{ Å}$  的立方体盒子, 氩液滴初始原子数目为 10741.

在整个模拟过程中, 原子间相互作用力场均采用 Lennard-Jones (12-6) 势, 该势函数  $U$  表达式为

\* 国家自然科学基金重点项目(批准号: 51936002)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ylguo@dlut.edu.cn

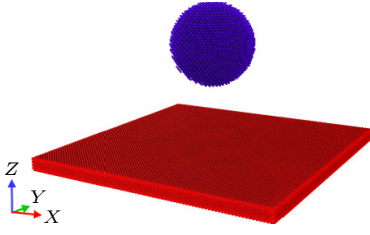


图 1 液滴撞击高温壁面的物理模型

Fig. 1. Physical model of a droplet hitting a high-temperature wall.

$$U = 4\alpha\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], r < r_c \quad (1)$$

式中,  $\alpha$  为调节因子, 通过改变其大小可以调控液体与固体之间的相互作用力, 进而从原子作用力的角度来改变亲疏水性;  $\varepsilon$  为势阱深度, 代表原子之间的最大作用势能的值;  $\sigma$  为特征尺寸, 表征能量为零时的原子间距;  $r$  为原子间的距离;  $r_c$  为截断半径. 本文对应的模拟参数在表 1 列出. 不同种类原子相互作用参数采用 L-B 混合规则处理, L-B 规则为

$$\varepsilon_{AB} = \sqrt{\varepsilon_A \varepsilon_B}, \quad (2)$$

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}, \quad (3)$$

式中, 下标  $A, B$  以及  $AB$  分别代表  $A$  类原子的相互作用、 $B$  类原子的相互作用以及  $A$  和  $B$  两种类型原子间相互作用. 由于在分子动力学模拟中原子间的相互作用力远大于重力, 因此本次模拟中忽略重力的影响.

表 1 Lennard-Jones (12-6) 各原子模拟参数

Table 1. Lennard-Jones (12-6) atomic simulation parameters.

	$\varepsilon/\text{eV}$	$\sigma/\text{\AA}$	$r_c/\text{\AA}$
Cu	0.52031	2.29726	12
Ar	0.0104	3.405	12
Cu—Ar	0.07356	2.85113	12

## 2.2 计算方法

本次模拟采用 Lammmps 软件进行相关模拟. 在模拟过程中,  $X$  方向和  $Y$  方向的边界设置为周期性边界,  $Z$  方向的边界设置为固定边界. 为防止原子从  $Z$  边界丢失, 在  $Z$  边界上设置自由反射墙, 即当原子接触到该边界后, 原子遵从弹性碰撞规则反弹到系统中. 模拟时间步长  $\Delta t = 5$  fs. 计算过程

采用 velocity-verlet 数值解法, 迭代公式如下所示:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t) \Delta t + \frac{1}{2} a(t) (\Delta t)^2, \quad (4)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{1}{2} [a(t) + a(t + \Delta t)] \Delta t. \quad (5)$$

加热底板设置为三层, 分别为固定层、加热层以及真实层. 固定层的作用用来固定底板, 防止底板出现大的变形; 加热层主要用来控制底板温度, 维持底板的工作温度; 真实层直接和液滴直接接触, 使其传热过程更具有真实性.

模型建立好后, 首先需要进行能量最小化处理, 即消除初始模型中不合理的物理结构, 该过程采用共轭梯度法实现. 接着进行控温弛豫过程, 使整体能量趋于稳定, 靠原子间相互作用力使液滴中的部分原子自我平衡到周围环境中, 生成气相体系. 在弛豫过程中, 整个体系采用 NVT 系综, 并且使用耦合时间为 0.5 ps 的 Berendsen 热浴控制整个体系温度为 85 K. 弛豫过程进行  $2 \times 10^5$  步, 即 1 ns. 整个体系达到能量平衡后, 进行液滴撞击过程, 即 Leidenfrost 现象的模拟过程, 在这个阶段, 将真实层以及液滴切换为 NVE 系综 (micro-canonical ensemble, 微正则系综) 进行模拟, 加热层控制手段不变, 但温度控制为所需温度. 本文将模拟盒子划分为  $3.5 \text{ \AA}$  的立方盒子统计空间的物理量场特性, 同时采用  $1.5\sigma$  团簇法, 确定液相或气相原子数目, 分析液滴的蒸发特性.

## 2.3 可靠性验证

在进行 Leidenfrost 模拟前有必要对力场的正确性进行验证, 主要从三方面进行验证, 分别为径向分布函数、物性参数以及润湿特性.

### 1) 径向分布函数验证

径向分布函数  $g(r)$  是指在一个中心原子周围距离为  $r$  处, 原子的局部密度相对于本体密度的比值. 通过径向分布函数的验证, 可得出原子间的作用力是否正确. 径向分布函数计算公式为

$$g(r) = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{n(r)}{V} \approx \frac{1}{\rho} \cdot \frac{n(r)}{4\pi r^2 \delta r}, \quad (6)$$

式中,  $\rho$  为本体密度;  $V$  为球壳体积;  $n(r)$  为球壳中的粒子数;  $r$  为据中心原子处的距离;  $\delta r$  为球壳厚度. 本次验证的实验数据来自 Yarnell 等<sup>[21]</sup>的工作, 通过比较 85 K 时的氩的径向分布函数如图 2 所示, 发现本次模拟的数据与 Yarnell 等<sup>[21]</sup>的数据

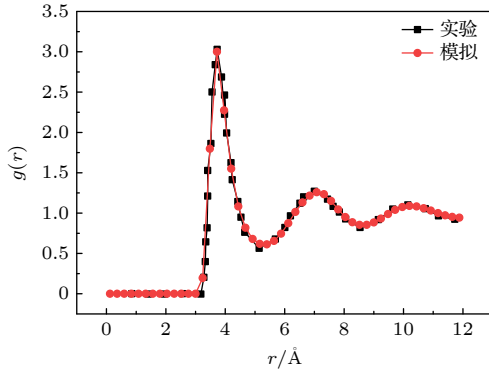


图 2 径向分布函数比较图

Fig. 2. Comparison of radial distribution functions.

几乎吻合,同时经计算  $g(r)$  最大相对误差为 3.2%,波峰最大相对误差为 1.5%,因此在流体受力方面的可靠性足以保证.

## 2) 物性参数验证

物性参数的验证可保证在模拟过程中传热以及动力学特性的正确性,本次模拟主要验证热导率及黏度这两个参数,热导率及黏度在分子动力学中的计算方法主要为通过 Green-Kubo 理论,对相应的自相关函数进行积分求解.其计算公式如下所示:

$$\lambda = \frac{V}{3k_B T^2} \int_0^\infty \langle \mathbf{J}(0) \cdot \mathbf{J}(t) \rangle dt, \quad (7)$$

$$\eta = \frac{V}{k_B T^2} \int_0^\infty \langle \mathbf{P}_{xy}(0) \cdot \mathbf{P}_{xy}(t) \rangle dt, \quad (8)$$

式中,  $\lambda$  为热导率;  $\eta$  为黏度;  $V$  为模拟体积;  $k_B$  为格子玻尔兹曼常数;  $T$  为体系温度;  $\mathbf{J}$  为热流密度;  $\mathbf{P}_{xy}$  为  $xy$  方向的应力张量.模拟数据及相关实验数据 [22,23] 如表 2 所列.与 Haile [23] 的实验数据相比导热系数和黏度的误差分别为 3.03% 和 -4.28%,该误差在接受的范围内,即本次模拟可以保证传热及动力学特性的可靠性.

表 2 物性参数对比

Table 2. Comparison of physical property parameters.

	本文模拟	实验测量	误差
导热系数/(W·m <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup> )	0.128	0.132	3.03%
黏度/(10 <sup>-4</sup> Pa <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup> )	2.92	2.8	-4.28%

## 3) 润湿特性的验证

在液滴与高温壁面相互作用的过程中,存在液滴的铺展过程,因此有必要验证液滴对壁面润湿过程特性的可靠性.接触角可以直观地体现壁面的润湿特性,在统计接触角的过程中,主要通过提取密度等值线并对其拟合,进而得出接触角.接触角获得过程如图 3 所示.

壁面润湿性主要受调节因子  $\alpha$  的控制,通过模拟不同的  $\alpha$  得出了不同润湿特性,如图 4 所示,发现接触角随着  $\alpha$  值的增加越来越小,即越来越亲水.这与王甜 [24] 研究的规律一致,因此液滴润湿性的可靠性也得到了保证.

通过以上三个方面可靠性的验证可以得出,本次模拟选取势函数及其参数的正确性,也为后文模拟 Leidenfrost 现象的真实性提供了保障.

## 3 模拟结果与讨论

本次模拟探究了液滴撞击在不同温度的平板壁上的特性,其中控制液滴的直径为 10 nm,液滴下降速度为 1 Å/ps,调节因子  $\alpha$  为 1,平板壁的温度分别取 85, 150, 200, 250 以及 300 K.不同温度下不同时刻的原子快照结果如图 5 所示.考虑到不同温度下不同的蒸发特性,因此工况 a 和工况 b 每 200 ps 记录一次原子图像,工况 c 每 100 ps

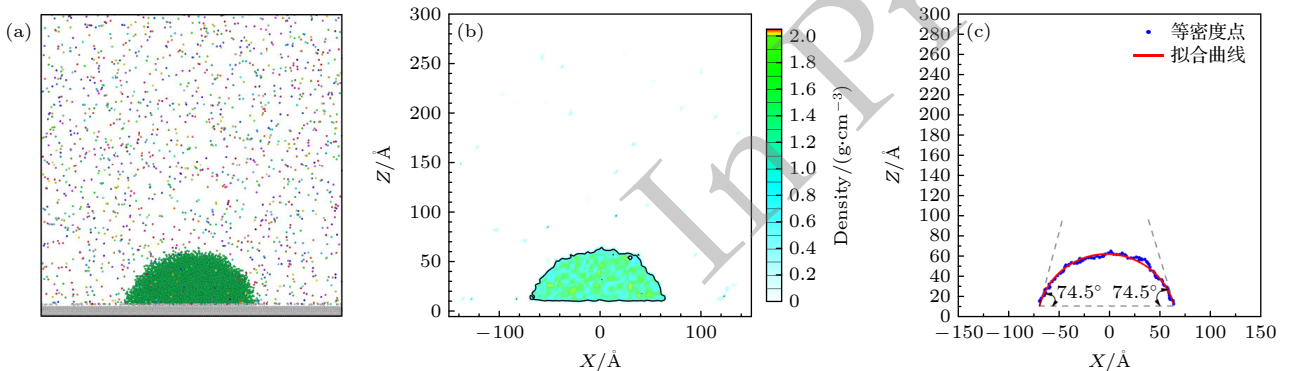


图 3 接触角获得过程 (a) 液滴铺展原子快照; (b) 液滴密度云图; (c) 等值线拟合

Fig. 3. Contact angle acquisition process: (a) Droplet spreading atomic snapshot; (b) droplet density contours; (c) contour fitting.



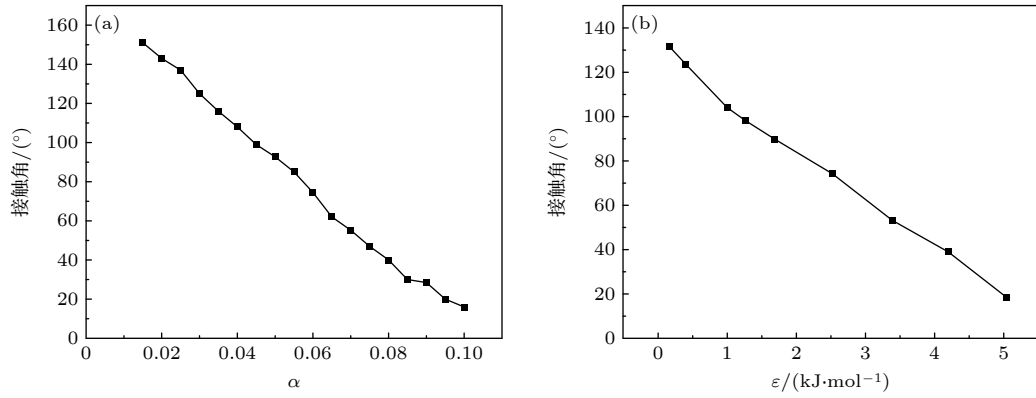


图 4 调节因子对润湿角的影响 (a) 本文模拟; (b) 对比模拟<sup>[24]</sup>

Fig. 4. Effect of moderator on wetting angle: (a) Simulated in this paper; (b) comparative simulation<sup>[24]</sup>.

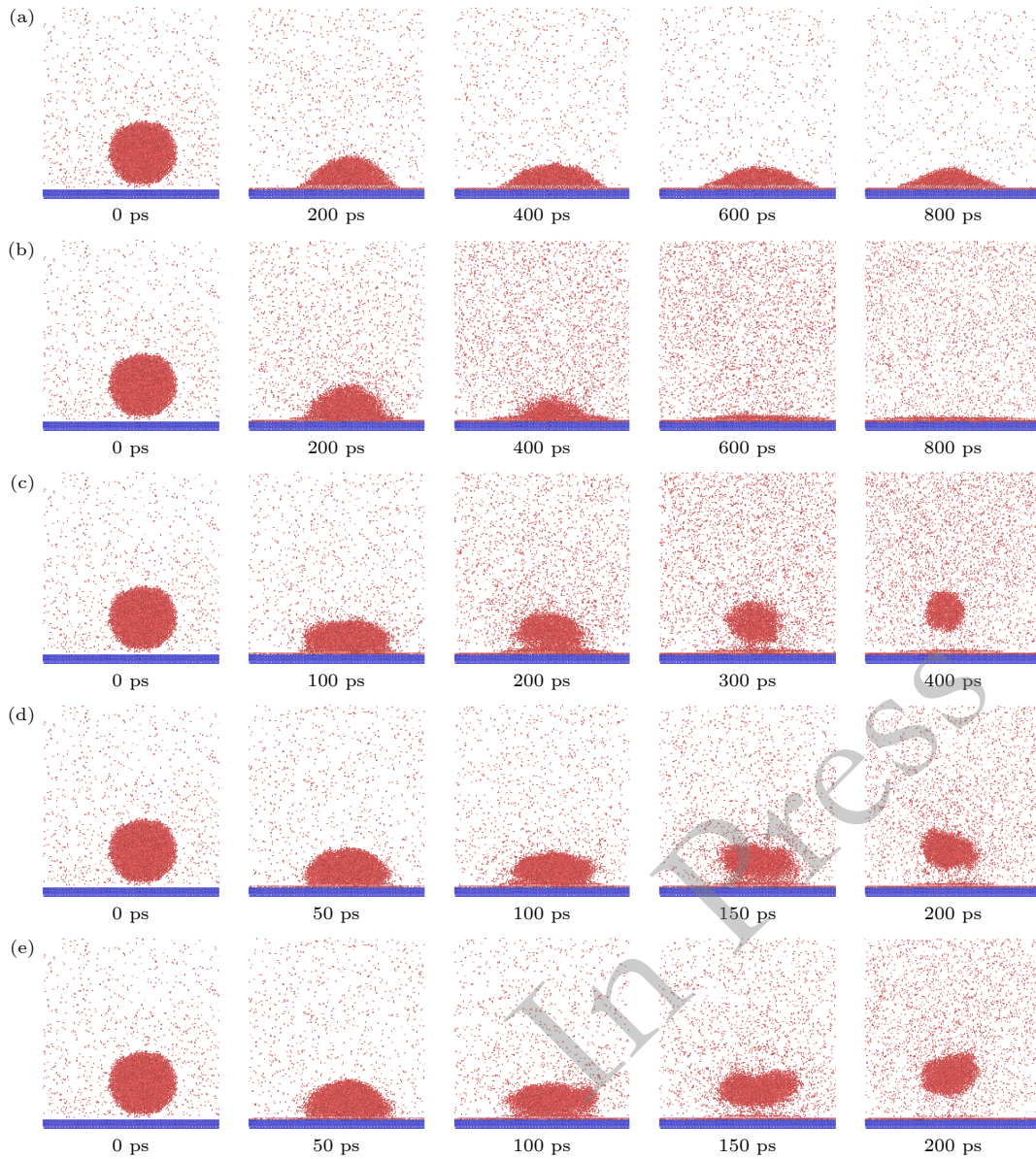


图 5 不同壁面温度下不同时刻的原子快照 (a) 85 K; (b) 150 K; (c) 200 K; (d) 250 K; (e) 300 K

Fig. 5. Atomic snapshots with different wall temperatures at different moments: (a) 85 K; (b) 150 K; (c) 200 K; (d) 250 K; (e) 300 K.

记录一次原子图像, 工况 d 和工况 e 每 50 ps 记录一次原子图像. 从原子快照可以得到, 当温度为 85 K 时, 液滴最终稳定在壁面上; 当温度为 150 K 时, 液滴在壁面上缓慢蒸发直至完全蒸发; 当温度为 200, 250 以及 300 K 时, 液滴在蒸发到一定程度时, 液滴将脱离壁面. 由于 85 和 150 K 时, 液滴没有出现悬浮, 因此可以认为 200, 250 以及 300 K 时的悬浮现象就是 Leidenfrost 现象. 由图 5 可知, 原子快照能够很直观地展示不同工况下液滴蒸发情况, 下面将通过不同参数分析壁面温度的影响.

### 3.1 液滴蒸发原子数目

液滴在蒸发过程中, 液滴蒸发原子数目将发生变化, 因此首先将从液滴蒸发原子数目进行分析, 进而分析温度对蒸发速率的影响. 不同温度下的液滴蒸发原子数目如图 6 所示, 除 85 K 工况外, 每个工况均出现了阶跃. 该阶跃是由类固层产生的影响, 这里的类固层是指在分子动力学模拟中, 由于原子间的强相互作用使得一部分液体原子吸附在固体表面上, 表现出固体的性质, 故被称为类固层. 刚开始蒸发阶段液相原子数目包含了类固层原子数目, 液滴悬浮后类固层原子不再包含在液相内, 而液滴蒸发原子数目为氩原子总数目减去液相原子数目得到, 因此液滴脱离壁面时会出现阶跃现象. 阶跃后液滴蒸发原子数目趋于稳定, 认为液滴脱离壁面悬浮即 Leidenfrost 现象. 阶跃后液滴蒸发原子数目仍在持续增长, 认为液滴未产生 Leidenfrost 现象. 蒸发在阶跃前的初始时段里, 随着温度的升高, 液滴蒸发速率越快. 阶跃后在 200, 250 以及 300 K 工况下, 液滴蒸发原子数目趋于稳定, 即液滴维持稳定不再蒸发; 而 150 K 工况则是继续保

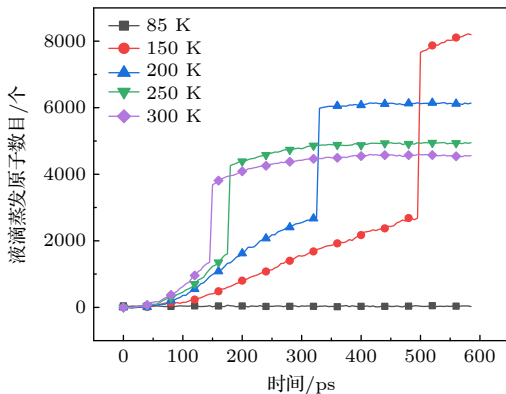


图 6 液滴蒸发原子数目

Fig. 6. Number of atoms evaporated by the droplet.

持蒸发, 直至完全蒸发. 对于产生 Leidenfrost 的工况下随着温度的升高, 产生阶跃的时间越早, 液滴维持的原子数目越多. 因此通过液滴蒸发原子数目的变化情况, 可以得出温度对 Leidenfrost 现象具有促进作用, 能有效地降低液滴悬浮的时间.

### 3.2 液滴质心位移

通过液滴质心的变化, 可以得出不同工况下液滴悬浮过程中的运动情况. 液滴质心变化如图 7 所示, 在前 50 ps 内几个工况的液滴下降规律一致, 说明此时主要受到撞击的影响, 液滴仍处于与壁面润湿过程, 而传热影响较小, 故润湿性决定了前 50 ps 内下降过程一致. 当液滴与壁面撞击效果逐渐减弱后, 液滴的质心高度受传热的影响, 随时间变化呈现出不同变化趋势. 对于 200, 250 以及 300 K 的工况, 液滴的质心升高, 即液滴出现了悬浮. 150 K 时由于液滴在壁面上完全蒸发, 因此液滴质心一直处于缓慢下降. 85 K 则因为最后稳定在壁面上因此液滴质心趋于稳定. 统计液滴脱离壁面时的速度, 在 200 K 时速度为 0.15 Å/ps, 250 K 时为 0.34 Å/ps, 300 K 时为 0.41 Å/ps. 因此可以得出, 随着温度的升高, 液滴脱离壁面时的速度越大即液滴悬浮的动力越大.

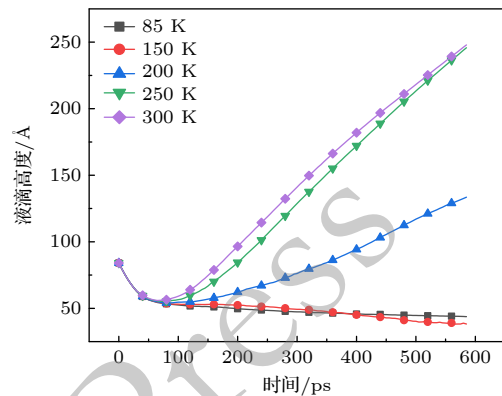


图 7 液滴的质心变化

Fig. 7. Change in the center of mass of a droplet.

### 3.3 液滴的能量变化

液滴撞击高温壁面的过程中, 其能量来自壁面的传热. 因此通过液滴总能的变化情况可以得出液滴和壁面的传热特性. 液滴总能单位面积上的变化率即热通量, 液滴热通量变化如图 8 所示. 从图 8 可以看出, 液滴在 85 K 工况下并没有热量的吸收, 其在零附近浮动, 由于分子的热运动与壁面不断撞

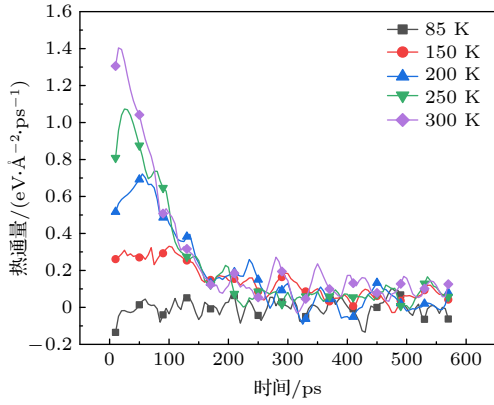


图 8 液滴与不同温度壁面之间的热通量

Fig. 8. Heat flux between the droplet and the wall at different temperatures.

击, 因此在微观上热量也会出现负值. 150 K 时液滴处于正常蒸发过程, 刚开始 (100 ps 之前) 热通量不变, 随着蒸发的进行, 液滴与壁面的接触面积越来越小, 因此热通量缓慢下降, 直至完全蒸发后, 热通量趋于零. 对于发生 Leidenfrost 的工况 (200, 250, 300 K), 热通量曲线变化情况一致, 即当液滴撞击这三种高温壁面时, 刚开始由于液滴的铺展使

得换热面积增加, 促进了热通量的增长, 在液滴与壁面间产生蒸气之前, 热通量达到波峰, 当液滴与壁面之间产生蒸气时, 由于气态的换热弱于液态的换热, 因此热通量开始出现下降, 最后由于液滴悬浮热通量趋于零. 壁面温度越高, 即传热温差越大, 初始热通量越大, 峰值越高. 在热通量下降阶段, 温度越高下降速度越快, 最后都趋于零即脱离壁面后不再蒸发. 因此, 当出现 Leidenfrost 现象后, 将严重阻碍液滴换热, 温度越高越严重. 初始热通量的不同, 说明增加换热温差有益于液滴换热, 这与宏观现象一致.

### 3.4 液滴内部密度及温度分布

为了探究 Leidenfrost 和正常蒸发的区别, 统计了 150 K 工况下液滴即将完全蒸发前的液滴内部密度及温度分布和其他三种高温下液滴即将脱离壁面时液滴内部的密度及温度分布. 不同工况下液滴内部的密度变化如图 9 所示, 其中汽液密度划分为  $0.8 \text{ g/cm}^3$ , 可以看出 150 K 工况下没有出现蒸气层, 而 200, 250 以及 300 K 的工况下在液滴

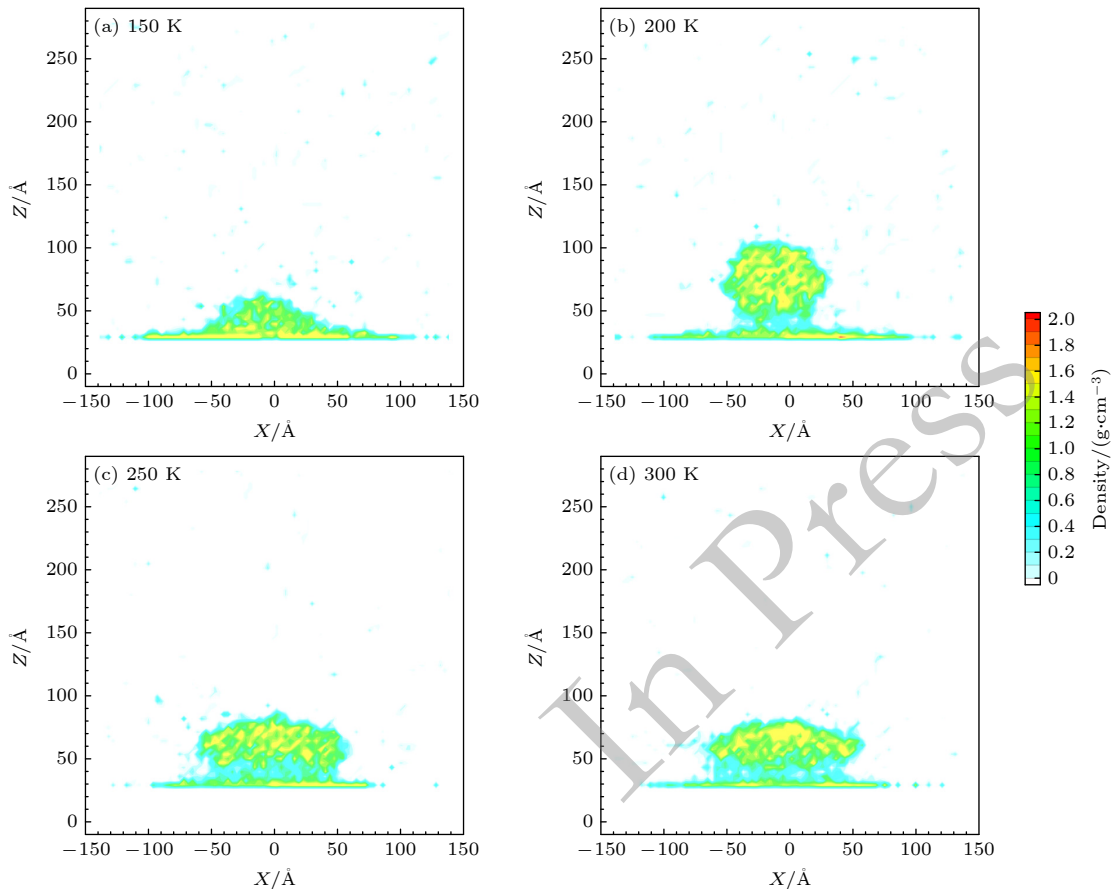


图 9 液滴脱离壁面前不同壁面温度下液滴的密度分布

Fig. 9. Density distribution of droplets at different wall temperatures before droplets detach from the wall.

与壁面之间均出现了蒸气层. 不同工况下蒸气层厚度、液滴厚度以及液滴的平均密度, 统计数据见表 3. 其中厚度计算为统计  $XY$  为零, 不同  $Z$  值上的密度值, 根据密度划分汽液层,  $Z$  值的差值即为厚度大小. 液滴平均密度则是统计液态的每个点上密度值做平均. 通过表 3 可以得出, 壁面温度越高, 蒸气层厚度越大, 液滴厚度越小, 液滴平均密度越大. 这是由于壁面温度越高, 壁面热通量越高致使蒸气层形成的越快, 因此更容易生成厚的蒸气层. 由于蒸气层具有较差的传热性, 因此蒸气层越厚, 壁面向液滴传递的热量越少, 可以从图 8 中热通量不同的下降速度得出该结论. 由于液滴撞击壁面后的铺展收缩是与液滴蒸发同时进行的, 铺展收缩是  $X$ - $Y$  平面上的运动, 蒸发是  $Z$  方向上的过程, 因此在相同的撞击速度下, 不同的壁面温度下液滴出现不同的形状. 由于 200 K 时液滴蒸发相对缓慢, 因此在悬浮过程中,  $Z$  方向的蒸发量少, 尺寸变化小, 与液滴收缩速度相当, 最终在脱离壁面时, 液滴呈现球形. 相反在 250 K 及 300 K 工况下, 液滴在  $Z$  方向上的蒸发速度大于  $X$ - $Y$  方向上的收缩, 故液滴

呈现饼状. 同时, 通过液滴在 150 K 蒸发, 液滴保持一定的接触角稳定地在壁面上蒸发的过程, 可推断出液滴脱离壁面时的形状受蒸发速率和液滴铺展收缩共同影响是合理的.

表 3 不同壁面温度下蒸气层厚度、液滴厚度以及液滴平均密度的统计

Table 3. Statistics of vapor layer thickness, droplet thickness and average droplet density at different wall temperatures.

壁面温度/K	蒸气层厚度/Å	液滴厚度/Å	液滴密度/(g·cm <sup>-3</sup> )
150	0	10	0.95
200	14	50	1.15
250	19	35	1.21
300	23	24	1.29

不同温度下液滴脱离壁面时温度云图如图 10 所示. 表 4 列出了液滴平均温度, 液滴上下温差以及液滴内部温度梯度. 从图 10 和表 4 可以看出, 壁面温度越高, 液滴平均温度越低, 液滴上下温差越大, 同时液滴内部温度梯度越大. 这是由于如前所述, 在三种高温下发生了 Leidenfrost 现象, 由于蒸

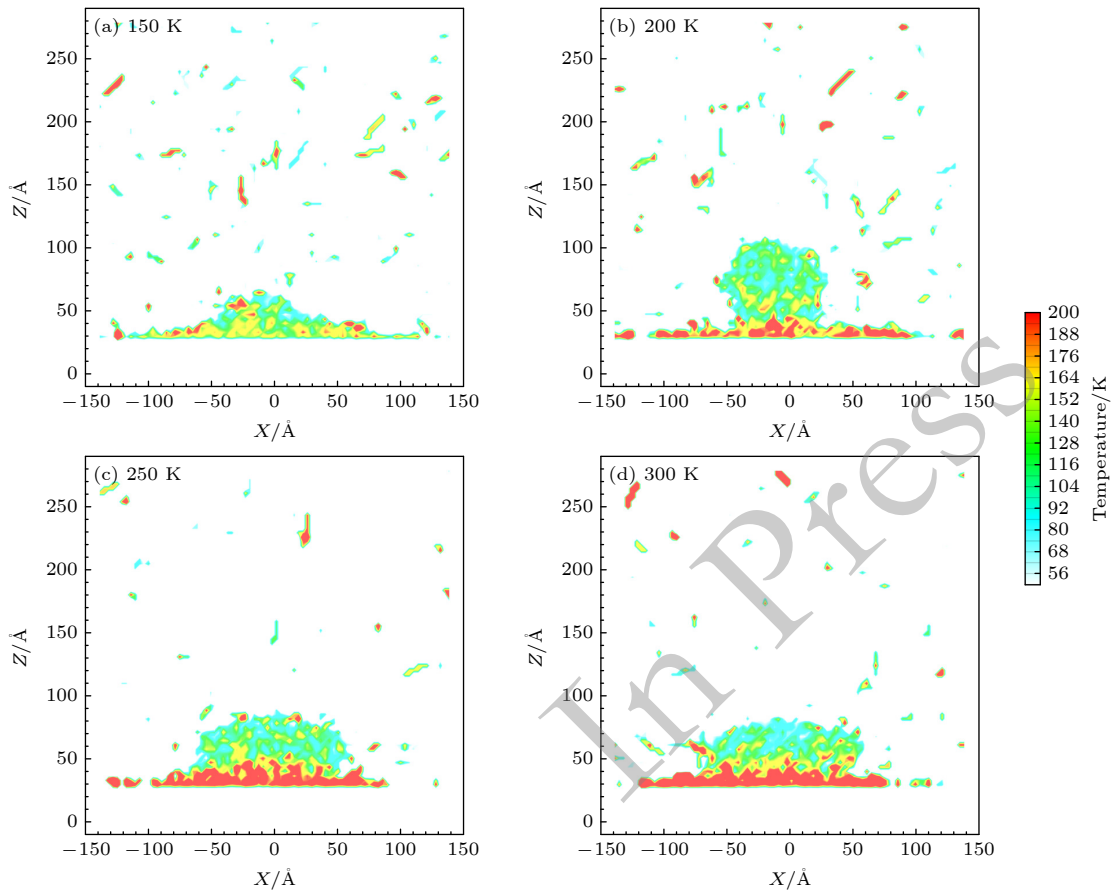


图 10 液滴脱离壁面前不同壁面温度下的液滴温度分布

Fig. 10. Droplet temperature distribution at different wall temperatures before the droplet detached from the wall.



表 4 不同壁面温度下液滴平均温度, 上下温差以及温度梯度

Table 4. Average droplet temperature, the temperature difference between upper and lower temperatures, and the temperature gradient at different wall temperatures.

壁面温度/K	平均温度/K	液滴上下温差/K	温度梯度/(K·Å <sup>-1</sup> )
150	140	5	0.5
200	121	33	0.65
250	107	41	1.17
300	98	47	1.95

气层的存在, 壁面向液滴的传热性能下降, 且壁面温度越高, 蒸气层越厚, 传热下降越严重, 故壁面温度越高液滴的平均温度越低, 液滴上下温差越大.

## 4 结 论

本文采用分子动力学方法, 模拟了纳米液滴撞击温度为 85, 150, 200, 250 以及 300 K 的平板壁面时产生的不同现象, 通过分析原子快照、液滴蒸发原子数目、液滴质心位移、液滴能量变化、液滴内部密度及温度分布特征, 考察了壁面温度对 Leidenfrost 现象的影响, 主要得出下述结论.

1) 在不同温度的壁面上液滴将呈现不同的状态, 85 K 时液滴稳定铺展在壁面上, 150 K 时液滴在壁面上缓慢蒸发并完全蒸发, 200, 250 以及 300 K 液滴发生悬浮即 Leidenfrost 现象.

2) 对于发生 Leidenfrost 现象的壁面温度, 温度越高液滴蒸发越快, 但是液滴蒸发原子数目更少即悬浮体积更大, 同时脱离壁面的速度将更快.

3) 液滴与壁面刚接触时, 壁面温度越高, 壁面与液滴之间的热通量越大, 同时热通量下降也更快, 这是由于蒸气层所导致的传热恶化.

4) 壁面温度越高蒸气层产生的越快且蒸气层越厚, 致使液滴的平均温度更低.

## 参考文献

[1] Shen S Q, Zhang J S, Liang G T 2015 *Acta Phys. Sin.* **64**

134704 (in Chinese) [沈胜强, 张洁珊, 梁刚涛 2015 物理学报 **64** 134704]

[2] Visaria M, Mudawar I 2009 *IEEE Trans. Compon. Packaging Technol.* **32** 784

[3] Shen S Q, Liang G T, Guo Y L, Liu R, Mu X S 2013 *Desalin. Water Treat.* **51** 830

[4] Moreira A L N, Moita A S, Panoa M R 2010 *Prog. Energy Combust. Sci.* **36** 54

[5] Liu X H, Zhao Y M, Chen S, Shen S Q, Wang S Q 2017 *J. Therm. Sci. Technol.* **16** 280 (in Chinese) [刘晓华, 赵一鸣, 陈石, 沈胜强, 王斯琦 2017 热科学与技术 **16** 280]

[6] Liu X H, Chen H, Wang K M, Chen S, Shen S Q 2018 *J. Therm. Sci. Technol.* **17** 464 (in Chinese) [刘晓华, 陈晗, 王开珉, 陈石, 沈胜强 2018 热科学与技术 **17** 464]

[7] Liang G T, Guo Y L, Shen S Q 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 184703 (in Chinese) [梁刚涛, 郭亚丽, 沈胜强 2013 物理学报 **62** 184703]

[8] Guo Y L, Chen G Y, Shen S Q, Zhang J T, Wang M X, Cao X S, Zheng Z H 2015 *J. Eng. Thermophys.* **36** 1547 (in Chinese) [郭亚丽, 陈桂影, 沈胜强, 张京涛, 王明旭, 曹雪松, 郑周虎 2015 工程热物理学报 **36** 1547]

[9] Biance A L, Clanet C, Quéré D 2003 *Phys. Fluids* **15** 1632

[10] Rong S, Shen S Q, Wang T Y, Che Z Z 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 154701 (in Chinese) [荣松, 沈世全, 王天友, 车志钊 2019 物理学报 **68** 154701]

[11] Cai C, Liu H, Xi X, Mudawar I 2021 *J. Eng. Thermophys.* **42** 732 (in Chinese) [蔡畅, 刘红, 奚溪, Issam Mudawar 2021 工程热物理学报 **42** 732]

[12] Wang J Y, Shi H, Xu W B, Hu L C, Liu H, Zhu X L 2020 *Aeronaut. Comput. Tech.* **50** 72 (in Chinese) [王均毅, 施红, 徐文冰, 胡亮春, 刘欢, 朱信龙 2020 航空计算技术 **50** 72]

[13] Zhang Y, Ning Z, Lü M, Sun C H 2017 *J. Combust. Sci. Technol.* **23** 451 (in Chinese) [张瑜, 宁智, 吕明, 孙春华 2017 燃烧科学与技术 **23** 451]

[14] Rony M D, Islam M A, Thakur M S H, Islam M, Hasan M N 2023 *Int. J. Heat Mass Transfer* **209** 124107

[15] Huang X N, Zhou L P, Du X Z 2023 *J. Mol. Liq.* **382** 121982

[16] Biryukov D A, Gerasimov D N, Yurin E I 2020 *J. Phys. Conf. Ser.* **1683** 022007

[17] Tuoliken A, Zhou L P, Bai P, Du X Z 2021 *Int. J. Heat Mass Transfer.* **172** 121218

[18] Feng R T, Zhao W J, Wu X D, Xue Q J 2012 *J. Colloid Interface Sci.* **367** 450

[19] Hashmi A, Xu Y H, Coder B, Osborne P A, Spafford J, Michael G E, Yu G, Xu J 2012 *Sci. Rep.* **2** 797

[20] Wells G G, Ledesmaaguilar R, Mchale G, Sefiane K 2015 *Nat. Commun.* **6** 6390

[21] Yarnell J L, Katz M J, Wenzel R G, Koenig S H 1973 *Phys. Rev. A* **7** 2130

[22] MullerPlathe F 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 6082

[23] Haile J M 1997 *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods* (New York: Wiley-Interscience) p489

[24] Wang T 2015 *M. S. Thesis* (Dalian: Dalian University of Technology) (in Chinese) [王甜 2015 硕士学位论文 (大连: 大连理工大学)]

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

Feng Shan-Qing Gong Lu-Yuan Quan Sheng-Lin



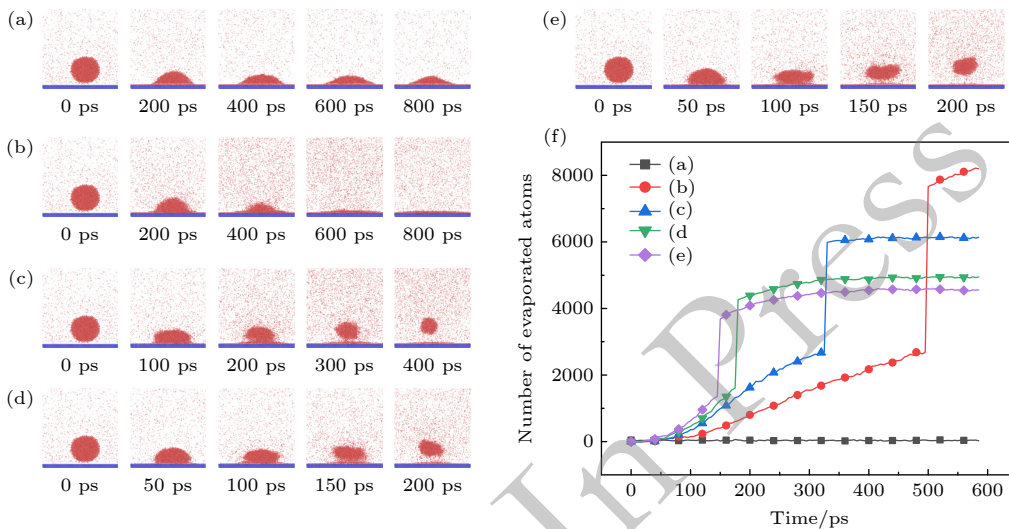
Guo Ya-Li<sup>†</sup> Shen Sheng-Qiang

(National and Local Joint Engineering Research Center for Comprehensive Utilization of Thermal Energy,  
School of Energy and Power Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

( Received 6 January 2024; revised manuscript received 19 March 2024 )

**Abstract**

The process of droplet impacting on a high-temperature wall is widely existent in daily life and industrial applications. Most of scholars mainly have focused on experimental and macroscopic research on this phenomenon. In this work, molecular dynamics simulation is conducted to investigate the evolution of droplet and the influence of surface temperature on its evolution, in order to explore the heat transfer mechanism of nanodroplet impacting on high-temperature surface. Droplet containing 10741 argon atoms impacts on the copper plates at temperatures of 85, 150, 200, 250 and 300 K, respectively. The number of droplet evaporation atoms is statistically obtained, the droplet barycenter displacement is analyzed, and the density distribution and temperature distribution inside the droplet are acquired. It is shown that the droplet exhibits different characteristics on the wall at different temperatures. The droplet finally stabilizes on the wall at 85 K as shown in Fig. (a), but when the temperature of the wall rises to 150 K, the droplet evaporates slowly and finally completely as shown in Fig. (b), and for the wall temperatures 200, 250 and 300 K, the Leidenfrost phenomenon is found: the droplet is suspended above the wall as displayed in Figs. (c)–(e). Fig. (f) shows the number of evaporated atoms at different wall temperatures. It also can be seen that the Leidenfrost phenomenon occurs at wall temperatures 200, 250 and 300 K, because for the three conditions there are rise steps and then the numbers of evaporated atoms almost keep constant. For the temperature conditions under which the Leidenfrost phenomenon can occur, the higher the wall temperature, the faster the droplet evaporates, the earlier the detachment occurs from the wall, the greater the droplet detaching velocity, and the larger the final suspending droplet volume. The analyses of the density distribution and temperature distribution of the droplet at the moment when it detaches from the wall show that the evaporation process is faster and a thicker vapor layer is generated due to the higher heat flux of the high-temperature wall, which will hinder the heat exchange, so that the average temperature of the droplet is lower and the average density is smaller.



**Keywords:** molecular dynamics, droplets, Leidenfrost phenomenon

**PACS:** 31.15.xv, 44.35.+c, 47.11.Mn, 47.55.D-

**DOI:** 10.7498/aps.73.20240034

\* Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51936002).

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