

壁面润湿性对沸腾核化的影响

郑文秀 厉思杰 白博峰

(西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 西安 710049)

摘要 建立了近壁面区池沸腾系统分子动力学模型, 将壁面对流体的作用作为附加力引入, 从成核位置、平均分子动能和界面接触热阻三个方面研究了壁面润湿性对液氩沸腾核化的影响规律和机理。模拟结果表明, 壁面润湿性越强, 壁面对流体分子的束缚作用越强, 成核位置离壁面越远; 壁面润湿性较强时紧靠壁面区域的平均分子动能明显高于远离壁面处的平均分子动能, 润湿性弱时沿垂直壁面方向分子动能变化不明显; 对于润湿性较强的壁面, 界面接触热阻较大, 不利于沸腾核化。

关键词 沸腾核化; 壁面润湿性; 分子动力学

中图分类号: TK121 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2016)01-0111-05

Effects of Surface Wettability on Boiling Nucleation

ZHENG Wen-Xiu LI Si-Jie BAI Bo-Feng

(State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract We established a gas-liquid-solid three phase pool boiling system from molecular dynamics insight, introducing the interactions between the wall and the fluid as an additional force. The effects of wall wettability on the boiling nucleation were studied from three aspects of the nucleation position, the average kinetic energy and the interface contact thermal resistance. The results show that strong surface wettability means strong constraint to the near surface molecules and gas nuclear position is farther from the surface. For stronger surface wettability, the molecular average kinetic energy for the molecules adjacent to the surface is significantly larger than that for the molecules far from the surface. for weaker surface wettability, molecular kinetic energy has a uniform distribution in the vertical direction of the wall. As increasing the surface wettability the interface contact thermal resistance increases and accordingly the boiling nucleation is weakened.

Key words boiling nucleation; surface wettability; molecular dynamics

0 引言

近壁面区沸腾是气、液、固三相强耦合的非线性系统, 流体和壁面的物理化学性质及相互作用都会影响沸腾特性。沸腾核化的时间和空间尺度小, 核化形成的核子临界直径在 10^{-9} m 量级, 临界核子形成时间在 10^{-10} s 量级^[1], 实验手段难以达到该尺度水平, 因此分子动力学 (MD)^[2] 模拟方法已成为主要研究手段。

许多学者采用 MD 方法对沸腾核化问题进行了研究。Maruyama 等进行了大量研究, 得到了氩分子液滴^[4-5] 与水分子液滴^[6] 在固体壁面上的接触角与密度分布等规律, 固体壁面上的气泡异质核化过程^[7], 以及贴壁气泡的分子形貌等。Nagayama 等^[3] 得到了存在固体壁面时的气核形态; Yan 等^[8] 研究了不同壁面温度对近壁区液膜厚度的影响; Carey

等^[9] 研究了固体壁面对沸腾过程的影响, 发现近壁区液体分子在固体壁面的作用下压力与临界过热度显著提高, 导致距离固体壁面有一定距离的液体先达到核化条件开始沸腾; Wang 等^[10] 采用铂加热面模拟了三角形截面的纳米尺度通道内的固液界面接触热阻的影响; Xue 等^[11] 发现固液原子间的相互作用强弱对接触热阻有重要影响。

尽管目前对于沸腾核化的研究已取得了较为丰富的成果, 但是对于不同固体壁面性质对核化现象及换热规律影响的研究仍不充分。受到壁面条件多样性的影响^[12], 壁面与流体原子间的相互作用很难准确表述, 需模拟大量原子才能得到较准确的宏观信息^[13], 气泡中心位置的确定也较难^[14]。随着研究对象尺度的减小, 界面接触热阻对沸腾核化的影

收稿日期: 2015-01-06; 修订日期: 2015-12-19

基金项目: 国家杰出青年科学基金 (No.51425603)

作者简介: 郑文秀 (1989-), 女, 山东潍坊人, 博士生, 主要从事凝结及沸腾机理研究。

通信作者: 白博峰, 教授, E-mail:

bfbai@mail.xjtu.edu.cn

响不容忽视,对池沸腾条件下近壁面处核化规律的研究中需专门考虑^[15]。

本文建立了近壁面区池沸腾系统的分子动力学模型,模拟了大空间池沸腾条件下近壁区的沸腾核化过程,将固体壁面对液体的影响以附加力的形式引入。通过分析成核位置、平均分子动能及固液壁面接触热阻等因素的变化情况,研究了壁面润湿性对沸腾核化的影响。

1 分子动力学模型

1.1 模拟区域

本文模拟对象为 4096 个液氩原子,初始时按面心立方晶格 (FCC) 结构排列成一个立方体, x 和 y 方向各由 8 个 FCC 晶格组成,长度为 4.93 nm, z 方向由 16 个 FCC 晶格构成,长度为 8.87 nm,如图 1 所示。 $z = 0$ (最底部) 平面布置了无限大固体壁面, $z = 8.87$ nm(最顶部) 的平面布置相同温度的无限大液体区域,它们与流体分子之间的作用通过引入一个附加力考虑。与固体壁面垂直的四个面均采用周期性边界条件。

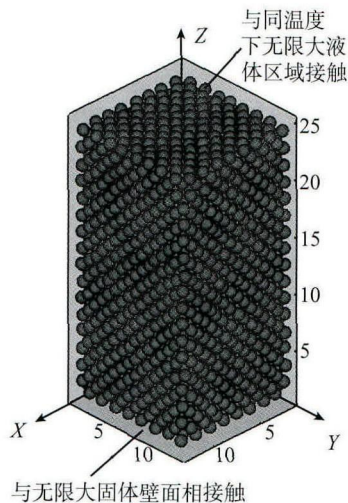


图 1 模拟系统模型

Fig. 1 Model of the simulation system

1.2 势能模型

采用 Lennard-Jones 势能方程模拟液体分子间的相互作用:

$$\phi(r_{ij}) = 4\epsilon_{ll} \left[\left(\frac{\sigma_{ll}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ll}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

式中, $\phi(r_{ij})$ 为分子间距为 r_{ij} 时具有的势能, ϵ_{ll} 和 σ_{ll} 分别为液体分子相互作用的能量参数和长度参数。

采用修正的 Lennard-Jones 势能方程模拟固液相互作用^[16]。对于液体分子与固体原子间相互作用,此修正方程形式为:

$$\begin{cases} \phi_{sl} = 4\alpha \cdot \epsilon_{sl} \left(\left(\frac{\sigma_{sl}}{r_{ij}} \right)^{12} - \beta \left(\frac{\sigma_{sl}}{r_{ij}} \right)^6 \right) \\ \epsilon_{sl} = \sqrt{\epsilon_s \epsilon_l} \\ \sigma_{sl} = \frac{1}{2}(\sigma_s + \sigma_l) \end{cases} \quad (2)$$

式中, ϕ_{sl} 为固液分子间距为 r_{ij} 时具有的势能, ϵ_{sl} 和 σ_{sl} 分别为固液相互作用的能量参数和长度参数, ϵ_s 和 σ_s 分别为固体原子相互作用的能量参数和长度参数, ϵ_l 和 σ_l 分别为液体分子相互作用的能量参数和长度参数, α 和 β 是用于调整固液之间相互作用的参数。

液体主体和固体壁面分别选用氩和铂进行模拟,表 1 给出了氩和铂的势能参数:

表 1 氩和铂的势能参数

Table 1 Potential energy parameters of Ar and Pt

物质名称	σ/nm	ϵ/J
氩	0.34	1.67×10^{-21}
铂	0.2475	8.35×10^{-20}

由于固体原子间作用远强于液体分子间及固液间相互作用,固体原子仅在晶格节点附近做高频振动,因此可忽略位置偏移的影响,认为固体原子位置固定、仅对液体分子产生力的作用。固体壁面原子对距壁面 z 处的液体分子产生的附加势能为^[17]:

$$\Delta\phi_{sl} = -\frac{2\pi n_l n_s \epsilon_{sl} \sigma_{sl}^6}{3z^3} + \frac{4\pi n_l n_s \epsilon_{sl} \sigma_{sl}^{12}}{45z^9} \quad (3)$$

式中, n_l 为液体分子数密度, n_s 为固体壁面原子的数密度, ϵ_{sl} 和 σ_{sl} 分别为固液相互作用的能量参数和长度参数。

同理,认为模拟区域外无限大液体区域仅对模拟液体分子产生力的作用,模拟区域外液体分子对距界面为 z' 的液体分子的附加势能为^[17]:

$$\Delta\phi_{ll} = -\frac{2\pi n_l \epsilon_{ll} \sigma_{ll}^6}{3z'^3} + \frac{4\pi n_l \epsilon_{ll} \sigma_{ll}^{12}}{45z'^9} \quad (4)$$

1.3 其它细节

本文中的所有参数均以势能参数和质量为基准无量纲化^[18]。模拟采用 NVT 系综,截断半径取 $3.5\sigma_{Ar}$,步长为 1 fs,前 30000 步采用速度标定法控制沸腾系统温度为 88 K,随后撤去速度标定,观察系统演化规律,模拟总步数为 200000 步。

2 壁面润湿性

壁面润湿性是固体壁面与液体分子相互作用体现出来的一种性质, 通常用接触角表示。调整式 (2) 中的参数 α 可改变固液相互作用势能, 保持 $\beta = 1$ 不变, 分析不同 α 对固液接触角的影响规律。通过模拟铂壁上 896 个氩原子达到稳定后的液滴形态, 得到不同 α 下的固液接触角变化情况, 如图 2 所示。可以看出, 随着 α 的增大即壁面作用的增强, 接触角迅速减小, 壁面的润湿性增强。当 α 增大到一定值 (> 0.106) 时, 接触角为 0, 液滴已经完全润湿壁面, 继续增大 α 接触角始终保持为 0。因此 α 的变化可以表征壁面润湿性的变化, 本文将分析不同 α 下各参数的变化。

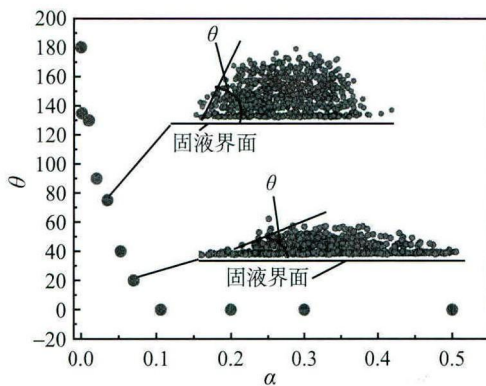


图 2 不同 α 下的固液接触角

Fig. 2 Solid-liquid contact angle at different α

3 模拟结果与分析

3.1 成核位置

控制壁面温度为 98 K, 保持参数 $\beta = 1$ 不变, 研究不同 α 条件下的沸腾核化规律, 得到不同壁面润湿性下的分子形貌 (如图 3 所示)。图 3(a)~(h) 分别为 $\alpha = 0.5$ 、 $\alpha = 0.3$ 、 $\alpha = 0.2$ 、 $\alpha = 0.141$ 、 $\alpha = 0.07$ 、 $\alpha = 0.053$ 、 $\alpha = 0.035$ 和 $\alpha = 0.027$ 的情况。为了解沸腾系统内部的原子排布情况, 图 3 中给出了系统中间切片层 ($5.5 < Y^* < 8.5$, Y^* 为图 1 中的无量纲坐标) 的分子形貌。可以看出, 成核位置距壁面有一定距离, 随着 α 的增大即壁面润湿性的增强, 成核位置与壁面的距离增大。这是因为壁面润湿性越强, 近壁区流体分子受到固体壁面的束缚作用越强, 因此处于束缚状态的液层越厚, 气核形成位置离壁面越远。

接下来本文进一步对比了不同壁面润湿性下成核位置的 MD 模拟值与理论值。成核位置与壁面的

距离 Z 的理论计算式如下^[19]:

$$Z = \left(\frac{2\pi\epsilon_{sl}\sigma^6 n_s n_l \Delta v T_1}{3h_{lv}\Delta T_{sup}} \right)^{1/3} \quad (5)$$

式中, T_{sup} 为局部过热度, h_{lv} 为汽液相焓差, T_1 为液相饱和温度, Δv 为汽液相比体积之差。气核形成无量纲距离 Z^* 与 α 之间的关系如图 4 所示, 可以发现模拟值与理论值吻合较好, 这也验证了本文 MD 模型的可靠性。

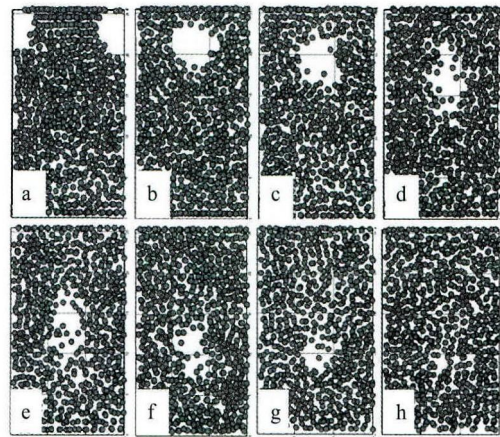


图 3 不同 α 下的沸腾核化分子分布

Fig. 3 Boiling nucleation molecular distribution at different α

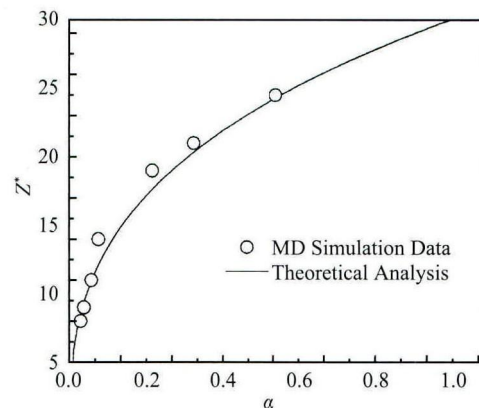


图 4 气核形成位置与 α 之间的关系

Fig. 4 Relationship between gas nucleation position and α

3.2 平均分子动能

控制壁面温度为 98 K, 研究不同壁面润湿性下系统的热力学特性。图 5 给出了不同 α 下沿垂直壁面方向的平均分子动能分布, 当 $\alpha = 0.027$ 与 $\alpha = 0.053$ 时壁面润湿性较弱, 壁面对分子的束缚较弱, 靠近壁面的分子和其他分子间的能量较易相互传递, 因此沿垂直壁面方向平均分子动能变化不明显; 当 $\alpha = 0.3$ 与 $\alpha = 0.5$ 时壁面润湿性较强, 壁面对分子的束缚较强, 靠近壁面的分子向其他分子的能量传

递较难, 紧靠壁面区域的平均分子动能明显高于远离壁面处的分子的平均分子动能。

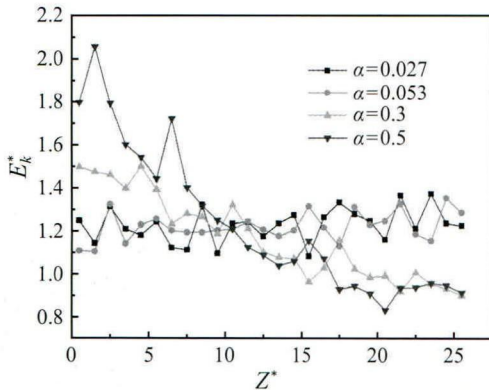


图 5 沿垂直壁面方向平均分子动能分布曲线

Fig. 5 Molecular average kinetic energy distribution curve along the vertical direction of wall

3.3 固液界面接触热阻

控制壁面温度为 108 K, 分析不同壁面润湿性下达到平衡时的系统温度和固液界面温差, 如图 6 所示。 $\alpha = 0.035$ 时, 系统平衡时达到的温度最高 (104 K), 与壁面的温差为 4 K; $\alpha = 0.5$ 时, 系统平衡时达到的温度最低 (94 K), 与壁面的温差为 14 K。随着 α 的增大, 系统平衡温度降低, 固液界面温差增大。这是因为壁面作用越强, 近壁区能量较高的分子受到的束缚作用越大, 向液体主体区的运动越容易受到限制。

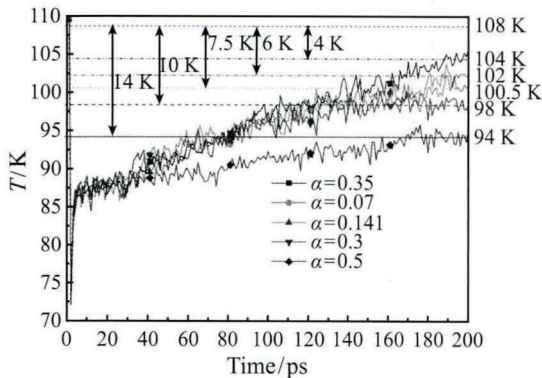


图 6 不同 α 下系统温度演化曲线及固液界面温差

Fig. 6 Temperature evolution curve of the system and solid-liquid interface temperature difference at different α

液体系统平衡温度与固体壁面设定温度之间存在温差, 该温差对应的热阻称为固液界面接触热阻。由下式求得:

$$\Delta T_{sl}^* = \frac{T_s - T_l}{T_s - T_{sat}} \quad (6)$$

$$R^* = \frac{\Delta T_{sl}^*}{q^*} \quad (7)$$

式中, ΔT_{sl}^* 为固液界面无量纲温差, T_s 为壁面温度, T_l 为液体系统平衡温度, T_{sat} 为液体饱和温度 (氙为 88 K), q^* 为通过界面的无量纲热流密度。

图 7 所示为不同 α 下的系统总能量演化曲线, 可以看出 α 不同, 曲线斜率也不同, 即界面热流密度不同。通过界面的无量纲热流密度和固液界面接触热阻随 α 的变化曲线如图 8 所示。可以看出, 随着 α 的增加, 通过界面的热流密度减小, 界面接触热阻增大。这是因为壁面作用增强, 近壁区能量较高的分子向液体区的运动受到限制, 能量传递效率较低, 表现为固液界面接触热阻较大。这会导致从壁面到液体区域的传热受到限制, 不利于沸腾核化过程的进行。

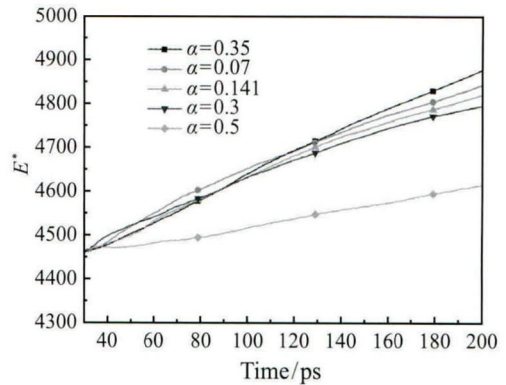


图 7 不同 α 下系统总能量演化曲线

Fig. 7 Total energy evolution curve of the system at different α

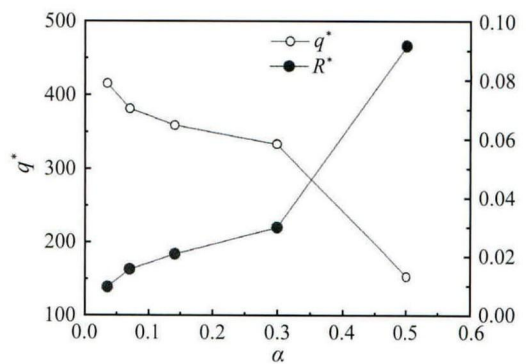


图 8 不同 α 下的固液界面热流密度和接触热阻

Fig. 8 Solid-liquid interface heat flux and the contact thermal resistance at different α

4 结 论

本文采用分子动力学方法模拟了大空间池沸腾条件下近壁区的沸腾核化过程, 研究了壁面润湿性对成核位置、平均分子动能和界面接触热阻的影响。

主要结论如下:

1) 壁面润湿性越强, 壁面对液体分子的束缚作用越强, 气核形成位置越远离壁面。

2) 润湿性较弱时, 靠近壁面的分子向其它分子的能量传递较易, 沿垂直壁面方向分子动能变化不明显; 壁面润湿性较强时, 靠近壁面的分子向其它分子的能量传递较难, 紧靠壁面区域的平均分子动能明显高于远离壁面处的平均分子动能。

3) 对于润湿性较强的壁面, 近壁区能量较高的分子向液体区的运动受到限制, 能量传递效率低, 导致界面接触热阻增大, 固液界面温差也增大, 不利于沸腾核化。

参 考 文 献

- [1] Bayazitoglu Y, Maruyama S, Hos P. Phase Change Studies With Molecular Dynamics: A Computer Simulation [J]. *International Journal of Heat and Technology*, 2000, 18(1): 15-43
- [2] SUN Chengzhen, LU Wenqiang, BAI Bofeng, et al. Molecular Dynamics Simulation of Nanofluid's Effective Thermal Conductivity in High-Shear-Rate Couette Flow [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2011, 54(11): 2560-2567
- [3] Nagayama G, Tsuruta G, CHENG Ping. Molecular Dynamics Simulation on Bubble Formation in a Nanochannel [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2006, 49(23): 4437-4443
- [4] Maruyama S, Kimura T, LU Mingchang. Molecular Scale Aspects of Liquid Contact on a Solid Surface [J]. *Thermal Science & Engineering*, 2002, 10(6): 23-29
- [5] Maruyama S, Matsumoto S, Shoji M, et al. A Molecular Dynamics Study of Interface Phenomena of a Liquid Droplet [C]// *Heat Transfer 1994*. Brighton: Proceedings of the 10th International Heat Transfer Conference, 1994: 14-18
- [6] Kimura T, Maruyama S. A Molecular Dynamics Simulation of Water Droplet in Contact With a Platinum Surface [C]// *Hawaii: The 6th ASME-JSME Thermal Engineering Joint Conference*, 2003
- [7] Maruyama S, Kimura T. A Molecular Dynamics Simulation of a Bubble Nucleation on Solid Surface [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2000, 8 (1): 69-74
- [8] Ji C Y, YAN Yuying. A Molecular Dynamics Simulation of Liquid-Vapor-Solid System Near Triple-Phase Contact Line of Flow Boiling in a Microchannel [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2008, 28(2): 195-202
- [9] Carey V P, Wemhoff A P. Thermodynamic Analysis of Near-Wall Effects on Phase Stability and Homogeneous Nucleation During Rapid Surface Heating [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2005, 48(25): 5431-5445
- [10] Wang C S, Chen J S, Shiomi J, et al. A Study on the Thermal Resistance Over Solid-Liquid-Vapor Interfaces in a Finite-Space by a Molecular Dynamics Method [J]. *International Journal of Thermal Sciences*, 2007, 46(12): 1203-1210
- [11] Xue L, Koblinski P, Phillpot S R, et al. Two Regimes of Thermal Resistance at a Liquid-Solid Interface [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2003, 118(1): 337-339
- [12] Betz A R, Jenkins J, Attinger D, et al. Boiling Heat Transfer on Superhydrophilic, Superhydrophobic, and Superbiphilic Surfaces [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2013, 57(2): 733-741
- [13] Maruyama S. Molecular Dynamics Method for Microscale Heat Transfer [J]. *Advances in Numerical Heat Transfer*, 2000, 2(6): 189-226
- [14] Park S H, Weng J G, Tien C L. A molecular Dynamics Study on Surface Tension of Micro-Bubble [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2001, 44(10): 1849-1856
- [15] Dhir V K. Mechanistic Prediction of Nucleate Boiling Heat Transfer-Achievable or a Hopeless Task [J]. *Journal of Heat Transfer*, 2006, 128(1): 1-12
- [16] DENG Peigang, Lee Y K, CHENG Ping. The Growth and Collapse of a Microbubble Under Pulse Heating [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2003, 46(21): 4041-4050
- [17] Maruyama S, Kimura T, LU Mingchang. Molecular Scale Aspects of Liquid Contact on a Solid Surface [J]. *Thermal Science & Engineering*, 2002, 10(6): 23-29
- [18] Frenkel D, Smit B. *Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications* [M]. San Diego: Academic Press, 2002
- [19] Rapaport D C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation* [M]. New York: Cambridge University Press, 2004