电场抑制纳米液滴的Leidenfrost现象

王硕林, 沈园, 何鑫, 杨燕茹, 王晓东*

华北电力大学工程热物理研究中心, 北京 102206

* 联系人, E-mail: wangxd99@gmail.com

2019-09-02 收稿, 2019-10-07 修回, 2019-10-08 接受, 2019-12-25 网络版发表

国家自然科学基金(51936004, 51525602, 51821004)和中央高校基本科研业务费(2017ZZD006)资助

摘要 Leidenfrost现象是指液滴与过热表面接触时, 快速汽化的蒸汽层将液滴与表面隔离, 使液滴在表面悬浮的现象. 为揭示表面润湿性对纳米液滴Leidenfrost现象的影响机制并实现纳米液滴的强化换热, 本文采用分子动力学模拟研究了纳米液滴在不同润湿性表面上的Leidenfrost现象. 结果表明, 纳米液滴的Leidenfrost温度与表面润湿性密切相关, 即表面越亲水, Leidenfrost温度越高. 本文进一步研究了电场作用下纳米液滴在不同润湿性表面上的相变换热过程, 发现施加电场可有效抑制Leidenfrost现象, 电场增加液滴与表面的相互作用力是其抑制Leidenfrost现象的机理.

关键词 Leidenfrost现象, 润湿性, 分子动力学, 电场, 强化传热

当液滴与过热表面接触时, 一旦表面温度超过Leidenfrost温度(Leidenfrost point, LFP), 液滴底部和过热表面的接触部分会迅速汽化形成蒸汽层, 把液滴与表面隔开, 降低液滴与表面之间的换热热流, 这种现象被称为Leidenfrost现象. Leidenfrost现象可发生在液滴接触高温金属表面^[1]、高温金属浸入液池^[2], 以及两种温差极大的液体接触(例如液氮与水接触)^[3]. 由于Leidenfrost现象使表面被蒸汽层覆盖, 液滴与表面之间的传热仅仅依靠蒸汽层导热和辐射两种方式^[4], 液滴换热能力急剧下降, 表面温度飙升, 严重时表面将被烧毁. 对于实际工业应用而言, Leidenfrost现象大大降低了换热设备的换热效率, 同时也会影响系统运行的可靠性, 是一种急需抑制的不利现象.

鉴于上述原因, 研究者致力于研究如何抑制Leidenfrost现象. 目前已提出多种方法, 如利用 γ 射线辐照表面^[5]、紫外/臭氧清洗表面^[6]、改变液滴组分^[7]、改造表面结构^[8-11]、低频振动^[12]、高频声波^[13]、电场抑

制^[14-20]等. 电场具有良好的可控性, 且电极结构和电场形式灵活多样, 因此近年来电场抑制Leidenfrost现象备受关注. 研究者对电场类型、电极结构、液滴种类等诸多因素开展研究, 得出以下结论: (1) 直流电场下, 电压超过临界电压(也称抑制电压), 可抑制Leidenfrost现象^[14]; 而交流电场除电压外, 还可改变频率, 频率越低, 抑制效果越好^[15]. (2) 电极结构影响抑制Leidenfrost现象的临界电压. 例如, 在液滴与加热基板中插入电极^[14-19]和将液滴放置在平行电极板中^[20], 临界电压不同. (3) 基板形态影响抑制效果. 相比固态基板, 液态基板在较小电压下就能实现抑制^[16]. (4) 液滴导电性和极化特性是影响抑制的最重要物性参数. 微导电液滴在较小电压下即可产生抑制, 而绝缘液滴很难产生抑制^[17,18].

目前, 电场抑制Leidenfrost现象的研究主要关注毫米尺度液滴, 仅有少数研究关注了微米尺度液滴^[17-19]. 这些研究发现, 抑制微米尺度液滴Leidenfrost现象所需

引用格式: 王硕林, 沈园, 何鑫, 等. 电场抑制纳米液滴的Leidenfrost现象. 科学通报, 2020, 65: 1705-1714

Wang S L, Shen Y, He X, et al. Suppression of Leidenfrost phenomenon of nanodroplets through an external electric field (in Chinese). Chin Sci Bull, 2020, 65: 1705-1714, doi: 10.1360/TB-2019-0479

的临界电压比毫米尺度液滴小一个量级^[17~19]。近年来,随着新材料和微纳技术的不断发展,微纳液滴传热特性及操控微纳液滴强化热质传递的研究已成为学术界的热点。喷雾冷却技术已证实,将液滴直径从35降低到20 μm ,换热系数可提高约10%^[21]。可以期待,把液滴直径降低到微米以下尺度可进一步提高换热能力,因此探究纳米尺度液滴Leidenfrost现象的产生机理及抑制方法具有重要意义。最近,已有研究者开始关注这一问题,分析了纳米尺度液滴Leidenfrost现象与衬底材料、液滴直径和温度的关系^[22],揭示了液滴和固体表面的分子间作用力对Leidenfrost现象的影响机制^[23]。需要指出的是,表面润湿性是影响相变换热的关键参数,它不仅影响沸腾核化和沸腾起始点^[24,25],同时也影响表面与液滴的换热能力^[26]。迄今为止,即便对于宏观尺度液滴,表面润湿性对LFP的影响规律也没有取得一致结论。因此,本文利用分子动力学模拟研究了纳米尺度液滴在不同润湿性表面上的Leidenfrost现象。在此基础上,进一步探究了电场对不同润湿性表面上Leidenfrost现象的抑制作用。本文结果不仅有助于认识纳米液滴Leidenfrost现象产生的机理及抑制方法,同时也可揭示表面润湿性对LFP的影响机制提供分子尺度的证据。

1 计算模型及方法

本文采用经典分子动力学方法,利用Lammps^[27]软件包模拟纳米尺度液滴在过热表面上的Leidenfrost现象。相互作用势能方面,液滴中水分子使用SPC/E模型描述。其中,氢原子-氧原子-氢原子构成的键角固定为109.47°,氢氧之间键长固定为1 $\text{\AA}$;氢原子电荷量为0.4238e,氧原子电荷量为-0.8476e。体系中水分子之间的相互作用势能包括长程库仑作用势能和范德瓦尔斯作用势能:

$$U_{ij} = \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

式中, q_i 为第 i 个粒子所带的电荷, r_{ij} 为粒子 i 与 j 之间的距离, σ 为Lennard-Jones(L-J)作用势能为零时的粒子间距, ϵ 为L-J作用势能的最小值。式(1)右侧第一项为带电粒子间的长程静电力,第二项为粒子间的短程作用力。参数 σ_{ij} 和 ϵ_{ij} 通过式(2)和(3)计算:

$$\sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j) / 2, \quad (2)$$

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j}. \quad (3)$$

对于作为表面的金平板,金原子之间相互作用采用嵌入原子势描述。嵌入原子势模型由Daw和Baskes^[28,29]共同提出,此模型将金原子间的相互作用分解为原子核之间的相互作用能和将原子核嵌入电子云背景的嵌入能:

$$E_{\text{tot}} = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi_{ij}(r_{ij}), \quad (4)$$

式中, ϕ_{ij} 为短程对势函数, ρ_i 为第 i 个原子所处位置的电子云密度函数。电子云密度 ρ_i 可通过对相关组元原子的电子密度进行线性求和得到:

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} f_j(r_{ij}), \quad (5)$$

式中, f_j 为 j 原子的电子密度。

由于本文关注表面润湿性对Leidenfrost现象的影响,模拟中需构建3种不同润湿性的表面,实现手段为调节表面金原子与水分子中氧原子之间的势能参数 ϵ_{ij} 。对于亲水表面A,金原子与水分子中氧原子之间的相互作用参数为 $\sigma_{ij}=2.8675 \text{ \AA}$, $\epsilon_{ij}=0.0554 \text{ eV}$ 。对于中性表面B,金原子与水分子中氧原子之间的相互作用参数为 $\sigma_{ij}=2.8675 \text{ \AA}$, $\epsilon_{ij}=0.0114 \text{ eV}$ 。对于疏水表面C,金原子与水分子中氧原子之间的相互作用参数为 $\sigma_{ij}=2.8675 \text{ \AA}$, $\epsilon_{ij}=0.0056 \text{ eV}$ 。模拟所设计的相互作用中,氢原子与氢原子,以及氢原子与3种表面的金原子之间的相互作用忽略不计。氧原子与氧原子的L-J作用使用以下参数: $\sigma_{ij}=3.1660 \text{ \AA}$, $\epsilon_{ij}=0.0067 \text{ eV}$ 。纯水液滴在不同润湿性表面A, B, C上的接触角采用密度向量法获取^[30,31],相应的接触角展示在图1(a)中。亲水表面A上的接触角为34.2°,中性表面B上的接触角为85.5°,疏水表面C上的接触角130.2°。

模拟系统盒子的尺寸为 $(1640 \times 16.4 \times 800) \text{ \AA}^3$, 其中 x 与 y 方向为周期性边界条件, z 方向为固定边界条件。利用Packmol^[32]软件包建模纳米液滴,其初始结构为由5100个水分子组成的圆柱,圆柱的半径和长度分别为55和16 $\text{\AA}$ 。利用Lammps软件包建模基底,其为金原子构成的理想平板,晶格结构为FCC结构,晶格常数为 $a_0=4.08 \text{ \AA}$, 尺寸为 $400a_0 \times 4a_0 \times 6a_0$ 。基底中金原子之间的相互作用采用Zhou等人^[33]使用的嵌入原子势模型描述。模拟计算设置方面,粒子运动方程用Velocity-Verlet算法求解,积分步长为1 fs,每2000 fs输出体系中粒子位置和速度,用来分析模拟结果。模拟过程中所有L-J势能计算的截断半径为10 $\text{\AA}$,长程库仑作用计算采用粒子-粒子/粒子网格法。

图1 (网络版彩色)模拟中使用的3种润湿性表面及模拟系统的初始构型。(a)水液滴在不同润湿性表面A、B、C上平衡接触角;(b)模型系统初始构型的示意图

Figure 1 (Color online) Snapshots of surfaces with three different wettabilities and initial configuration of the simulated systems. (a) Static contact angles of a water droplet on surfaces A, B and C; (b) schematic of the initial simulated system

模拟过程分为平衡阶段和生产阶段。平衡阶段分为两步:在第一步中,分别弛豫液滴与平板,其中圆柱状液滴在NVT系综下弛豫3.3 ns,而基底在NPT系综下弛豫3.5 ns后,转为NVT系综下继续弛豫1.0 ns。在第二步中,将弛豫后的液滴与基底放置在模拟盒子中,基底最下面3层原子刚性固定,用于固定整个盒子,基底剩余部分作为加热层,形成图1(b)所示的模拟系统。模拟系统在温度为298 K的NVT系综下运行3.0 ns达到平衡。系统达到平衡后转入生产阶段。利用以下方法判断系统是否达到平衡:首先观察系统的宏观状态,系统各部分不再有扩散或变形的趋势是平衡的基础;然后观察系统或目标对象的能量曲线,能量曲线趋于稳定是平衡的重要特征;最后统计液滴在3个方向上的速度分布,若符合麦克斯韦分布则可认为达至平衡态^[34]。生产阶段,液滴处于NVE系综,固定表面温度,模拟高温表面与液滴之间的换热。

2 结果与讨论

2.1 不同润湿性表面上的Leidenfrost现象

为研究纳米液滴在不同润湿性表面上的Leidenfrost现象,模拟中使用3种润湿性表面(亲水表面A、中性表面B、疏水表面C)。触发Leidenfrost现象需要特别高的表面过热度,因此表面温度被固定为700 K。通过模拟不同润湿性表面在此温度下的相变过程,判断是否出现Leidenfrost现象,从而揭示Leidenfrost现象产生的机理及其对相变传热的影响。此部分结果也将作为比对基准,应用于后续施加电场的模拟研究中。

图2给出了液滴在3种润湿性表面上的相变快照。对于亲水表面A,随着液滴从表面吸热,水分子动能逐渐增加,从液滴中逃逸的气态水分子数量不断增多。水分子动能的增加也会抑制液滴在三相接触线的钉扎,促进液滴继续铺展,在液滴的接触线边缘产生前驱膜。

前驱膜的出现使液滴与表面的接触面积显著增加($t=580$ ps)。在 $t=1038$ ps时,水分子几乎全部由液态转变为气态,最初的球冠状液滴变为一层薄液膜,液滴在亲水表面A上始终未出现Leidenfrost现象。对于中性表面B,随着汽化的进行,接触线向外移动的现象没有出现,伴随气态分子数的增加,液滴底部与表面接触面积反而减小,并且在液滴底部逐渐形成核化气泡($t=580$ ps)。气泡体积逐渐长大,最终在 $t=1038$ ps时,液滴脱离表面,出现Leidenfrost现象。对于疏水表面C,由于沸腾起始点低^[23],液滴底部核化气泡出现得更早。在 $t=580$ ps时,液滴已经脱离表面,发生了Leidenfrost现象。由此可见,在相同的表面温度下,表面疏水性的增加促进了Leidenfrost现象的产生。

纳米液滴在不同润湿性表面上热流随时间的演化如图3(a)所示。随汽化不断进行,热流逐渐降低。对于亲水表面A, $t=150$ ps为热流曲线的转折点。在0~150 ps内,热流曲线骤降; $t=150$ ps之后,下降变得平缓。这是由于在汽化初期,液滴三相线附近的水分子动能突然增加,增加的动能将用于克服表面的黏性剪切力产生前驱膜,因此系统热流较高。随液滴不断铺展,接触线附近水分子的动能逐渐减小。当液滴半径达到最大铺展半径后,三相线附近的水分子动能维持稳定,因此热流曲线的下降变得平缓。对于中性表面B和疏水表面C,热流曲线的波动比较明显。而对于疏水表面C,纳米液滴迅速发生Leidenfrost现象,因此热流下降最为缓慢。图3(a)表明,系统热流的大小与表面亲疏水性呈正比关系,即亲水表面A热流最大,而疏水表面C最小,意味着Leidenfrost现象将会恶化传热,大大增加了纳米液滴汽化所需要的时间。

纳米液滴温度随时间的演化如图3(b)所示,随液滴汽化进行,不同润湿性表面上呈现出不同的温度变化特性。在汽化初期,不同润湿性表面上液滴温度随时间的变化规律均呈指数增加。亲水表面A的表面热流最

图2 (网络版彩色)水液滴在不同润湿性表面A, B, C上相变换热的快照

Figure 2 (Color online) Snapshots of phase change of a water droplet on the hydrophilic surface A, moderate wettability surface B, and hydrophobic surface C

图3 (网络版彩色)不同润湿性表面A, B, C上的表面热流及液滴温度。(a) 表面热流; (b) 液滴温度

Figure 3 (Color online) The heat flux and droplet temperature on surfaces A, B, and C. (a) Heat flux; (b) droplet temperature

大,因而在汽化初期温度上升曲线的斜率明显高于另两种表面。当壁温升高至525 K后,温度变化曲线开始变得平缓。对于中性表面B,随汽化进行,液滴温度逐渐升高,但低于亲水表面A。在 $t > 640$ ps后,液滴温度曲

线呈现出反转的趋势,液滴温度开始下降。对于疏水表面C,由于纳米液滴与表面的接触面积最小,因此其温度上升曲线的斜率最小,液滴温度反转出现在 $t > 750$ ps。

因此,当表面温度固定为700 K时,纳米液滴的汽

化速率和表面润湿性密切相关, 表面越亲水, 纳米液滴的汽化速率越大. 对于亲水表面A来说, 液滴几乎全部蒸发, 没有发生Leidenfrost现象. 对于中性表面B和疏水表面C, 纳米液滴均发生Leidenfrost现象, 但在疏水表面C上发生Leidenfrost现象所需的时间远小于中性表面B, 表明表面疏水性越强, 液滴越容易发生Leidenfrost现象.

2.2 不同润湿性表面上的LFP

本节将研究亲水表面A上是否可发生Leidenfrost现象, 同时探究表面润湿性与LFP的关系. 对于亲水表面A, 进行了时间从0~700 ps, 温度从700 K不断升高至1300 K的一系列模拟, 其汽化过程如图4所示. 当亲水表面A的温度从700 K升高至900 K后, 纳米液滴的汽化速率明显升高. 在 $t=535$ ps时, 纳米液滴的厚度明显低于在700 K亲水表面上纳米液滴的厚度($t=580$ ps). 随汽化进行, 液滴逐渐变薄, 但直至模拟的最后时刻($t=700$ ps)仍未出现Leidenfrost现象. 当亲水表面的温度升高到1132 K时, 液滴的汽化现象发生明显改变. 在汽化初期, 纳米液滴顶部出现震荡, 并且随汽化过程的不

断进行, 震荡越来越剧烈. 在 $t=449$ ps时, 在靠近纳米液滴底部处发生撕裂. 随后, 液滴上部与底部之间产生间隙. 伴随间隙的不断扩大, 液滴上部与底部在 $t=535$ ps时发生分离, 脱离表面的束缚, 发生Leidenfrost现象, 在表面上留下一层薄液膜. 在此之后的算例中继续升高表面温度, 液滴都能出现Leidenfrost现象, 并且出现Leidenfrost现象所需要的时间随表面温度升高而不断减小. Leidenfrost现象同样会出现在亲水表面, 但所需要的表面温度很高. 对于亲水表面A, LFP为1132 K.

对于中性表面B, 进行了时间0~1127 ps, 温度从650 K降低到400 K的一系列模拟来确定其LFP. 温度为600和500 K的汽化过程如图5(a)和(b)所示. 与图2比对可知, 当表面温度从700 K逐渐降低时, 液滴发生Leidenfrost现象所需要的时间不断增加. 当表面温度降低到600 K时, 纳米液滴在 $t=1127$ ps才出现Leidenfrost现象, 远大于表面温度为700 K时. 当继续降低表面温度, 直至表面温度降低到500 K以下时, 纳米液滴将完全蒸发而非出现Leidenfrost现象.

对于疏水表面C, 经过一系列模拟发现, 随表面温度不断降低, 纳米液滴仍会出现Leidenfrost现象. 纳米

图4 (网络版彩色)不同表面温度时, 水液滴在亲水表面A上相变换热的快照

Figure 4 (Color online) Snapshots of phase change of a water droplet on the hydrophilic surface A with various temperatures

图5 (网络版彩色)不同表面温度时,水液滴在不同润湿性表面上相变换热的快照。(a) $T=600$ K, 中性表面B; (b) $T=500$ K, 中性表面B; (c) $T=500$ K, 疏水表面C; (d) $T=400$ K, 疏水表面C

Figure 5 (Color online) The Snapshot of phase change heat of water droplets on different wettability surfaces at different surface temperatures. (a) Surface B with $T=600$ K; (b) surface B with $T=500$ K; (c) surface C with $T=500$ K; (d) surface C with $T=400$ K

液滴在500和400 K过热表面上的汽化过程如图5(c)和(d)所示。在500 K表面上, $t=634$ ps时液滴已经发生Leidenfrost现象, 然而在400 K表面上, $t=736$ ps时液滴才发生Leidenfrost现象。因此对于疏水表面, 液滴发生Leidenfrost现象所需要的时间同样随壁温降低而增加。同时, 相比于中性表面B, 液滴在疏水表面C上出现Leidenfrost现象所需的过热度更低。以上结果表明, 随表面疏水性增强, 液滴出现Leidenfrost现象的LFP降低。

2.3 电场抑制不同润湿性表面的Leidenfrost现象

前面的结果显示, 表面越疏水, 液滴越容易出现Leidenfrost现象。因此从实际应用角度考虑, 可通过增

加表面亲水性来防止换热设备出现Leidenfrost现象, 提高换热设备的换热能力和安全性。本文将进一步探讨外加电场对不同润湿性表面Leidenfrost现象的抑制效果。如图6所示, 在平板底部指定区域对称添加正负条形电极(条纹阴影区域)产生电场, 即选取对称区域的原子分别带等量的正电荷和负电荷作为电极。电极在x方向的宽度为50 Å, 在z方向的深度为16.39 Å; 左侧电极每个原子带负电荷, 右侧电极每个原子带正电荷, 两个电极原子所带的总电荷量相同。基于以上电极构造方法, 在表面处产生沿水平方向的电场, 电场强度随z轴正向减小, 即主要作用范围为近表面区域。亲水表面发生Leidenfrost现象所需的表面温度高于中性和疏水表面, 故只要能抑制中性和疏水表面的Leidenfrost现象,

图6 (网络版彩色)模拟中电极安放的位置

Figure 6 (Color online) Positions of electrodes in simulations

就同样可以抑制亲水表面。基于以上原理,为节省计算时间,本文仅研究电场对中性表面和疏水表面Leidenfrost现象的抑制作用。

本节所有的模型,表面温度均为 $T=700$ K。当中性表面B的电极区原子带电后,如图7(a)所示,在汽化初期,纳米液滴在电场力作用下被极化。极化水分子中的氧原子和氢原子在电场力作用下分别向正极和负极定向移动,因而纳米液滴的铺展半径增加,接触角减小($t=300$ ps)。随汽化进行,纳米液滴体积逐渐减小,直到液滴完全蒸发,仍未出现Leidenfrost现象。对比图2(b)可知,外加电场抑制了中性表面的Leidenfrost现象。当疏水表面C的电极区原子带电后,如图7(b)所示,在汽化初期,纳米液滴在电场力作用下由球状变为椭球状,但相

对于中性表面,疏水表面上液滴的接触角没有明显改变。随汽化进行,椭球形纳米液滴缓慢蒸发,并在液滴底部出现核化气泡。气泡不断生长,最终在液滴底部形成一层气膜,将液滴托起,发生Leidenfrost现象。进一步将疏水表面C的电极区单个原子带电量增大到 $0.0105e$,液滴在其上的汽化过程如图7(c)所示。在电场作用下,纳米液滴迅速变形,由最初的球形逐渐被拉成椭球形,最后被拉成一条紧贴表面的液膜($t=580$ ps)。纳米液膜不断汽化,厚度变薄,最终断裂为两部分。断裂形成的两个液膜分别向正极和负极移动,直到完全汽化。由此可见,在条形电极的作用下,纳米液滴在疏水表面上的Leidenfrost现象同样可以被抑制,但所需的电场强度高于中性表面。

图7 (网络版彩色)表面温度 $T=700$ K时,水液滴在不同电场和不同润湿性表面上相变换热的快照。(a) 中性表面B,电极区每个原子带电的电荷量为 $0.005e$; (b) 疏水表面C,电极区每个原子带电的电荷量为 $0.005e$; (c) 疏水表面C,电极区每个原子带电的电荷量为 $0.0105e$

Figure 7 (Color online) Snapshots of phase change of a water droplet on surfaces with the same $T=700$ K but different wettabilities under different electric fields. (a) Surface B, each atom in the electrode region is charged with $0.005e$; (b) surface C, each atom in the electrode region is charged with $0.005e$; (c) surface C, each atom in the electrode region is charged with $0.0105e$

本文进一步统计了中性表面B和疏水表面C在有或无电场作用下液滴与表面的相互作用。如图8所示,没有电场时,液滴与中性表面的相互作用强于与疏水表面的相互作用。有电场时,液滴与中性表面B和疏水表面C的相互作用均得强化。因为疏水表面C电极区单个原子带电量为 $0.0105e$,高于中性表面B的原子带电量 $0.005e$,液滴与疏水表面相互作用的强化更为显著,因而使液滴被拉伸为贴壁液膜。基于以上分析,施加电场强化了固体表面分子与液滴分子的相互作用是电场抑制液滴Leidenfrost现象的物理机理。

3 结论

表面润湿性显著影响纳米尺度液滴的Leidenfrost现象,固体表面越亲水,发生Leidenfrost现象所需的表面温度越高,因此提高表面浸润性可视为一种抑制Leidenfrost现象的主动式方法。施加平行于表面的电场可

图8 (网络版彩色)液滴与不同润湿性表面的相互作用

Figure 8 (Color online) Interactions between the droplet and surfaces with different wettabilities

有效抑制Leidenfrost现象,抑制的微观机理是电场强化了液滴分子与固体表面分子间的相互作用强度。

参考文献

- Burton J C, Sharpe A L, van der Veen R C A, et al. Geometry of the vapor layer under a Leidenfrost drop. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 074301
- Vakarelski I U, Marston J O, Chan D Y, et al. Drag reduction by Leidenfrost vapor layers. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 214501
- Snezhko A, Jacob E B, Aranson I S. Pulsating-gliding transition in the dynamics of levitating liquid nitrogen droplets. *New J Phys*, 2008, 10: 043034
- Talari V, Behar P, Lu Y, et al. Leidenfrost drops on micro/nanostructured surfaces. *Front Energy*, 2018, 12: 22–42
- Seshadri A, Phillips B, Shirvan K. Towards understanding the effects of irradiation on quenching heat transfer. *Int J Heat Mass Transf*, 2018, 127: 1087–1095
- Vig J R. UV/ozone cleaning of surfaces. *J Vacuum Sci Tech A-Vacuum Surfs Films*, 1985, 3: 1027–1034
- Chen H, Cheng W, Peng Y, et al. Dynamic Leidenfrost temperature increase of impacting droplets containing high-alcohol surfactant. *Int J Heat Mass Transf*, 2018, 118: 1160–1168
- Lee G C, Kang J, Park H S, et al. Induced liquid-solid contact via micro/nano multiscale texture on a surface and its effect on the Leidenfrost temperature. *Exp Therm Fluid Sci*, 2017, 84: 156–164
- Farokhnia N, Sajadi S M, Irajizad P, et al. Decoupled hierarchical structures for suppression of Leidenfrost phenomenon. *Langmuir*, 2017, 33: 2541–2550
- Auliano M, Fernandino M, Zhang P, et al. The Leidenfrost phenomenon on sub-micron tapered pillars. In: ASME 2017 15th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels. American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, 2017
- Duursma G, Kennedy R, Sefiane K, et al. Leidenfrost droplets on microstructured surfaces. *Heat Transf Eng*, 2016, 37: 1190–1200
- Ng B T, Hung Y M, Tan M K. Suppression of the Leidenfrost effect via low frequency vibrations. *Soft Matter*, 2015, 11: 775–784
- Ng B T, Hung Y M, Tan M K. Acoustically-controlled Leidenfrost droplets. *J Colloid Interf Sci*, 2016, 465: 26–32
- Shahriari A, Wilson P S, Bahadur V. Acoustic detection of electrostatic suppression of the Leidenfrost state. *Phys Rev E*, 2018, 98: 013103
- Ozkan O, Shahriari A, Bahadur V. Electrostatic suppression of the Leidenfrost state using AC electric fields. *Appl Phys Lett*, 2017, 111: 141608
- Shahriari A, Ozkan O, Bahadur V. Electrostatic suppression of the Leidenfrost state on liquid substrates. *Langmuir*, 2017, 33: 13207–13213
- Shahriari A, Bahadur V. Film boiling heat transfer enhancement via electrostatic Leidenfrost state suppression. In: ASME 2015 International Technical Conference and Exhibition on Packaging and Integration of Electronic and Photonic Microsystems Collocated with the ASME 2015 13th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels. American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, 2015
- Shahriari A, Wurz J, Bahadur V. Heat transfer enhancement accompanying Leidenfrost state suppression at ultrahigh temperatures. *Langmuir*, 2014, 30: 12074–12081
- Shahriari A, Das S, Bahadur V, et al. Analysis of the instability underlying electrostatic suppression of the Leidenfrost state. *Phys Rev Fluids*, 2017, 2: 034001

- 20 Yuan Q, Zhao Y P. Precursor film in dynamic wetting, electrowetting, and electro-elasto-capillarity. [Phys Rev Lett](#), 2010, 104: 246101
- 21 Zhao F, Yan X, Bo H, et al. Application of droplet motion and phase change model in containment spray system. [Ann Nucl Energy](#), 2019, 131: 123–137
- 22 Rodrigues J, Desai S. The nanoscale Leidenfrost effect. [Nanoscale](#), 2019, 11: 12139–12151
- 23 Wang Y H, Wang S Y, Lu G, et al. Effects of wettability on explosive boiling of nanoscale liquid films: Whether the classical nucleation theory fails or not? [Int J Heat Mass Transf](#), 2019, 132: 1277–1283
- 24 Wang Y H, Wang S Y, Lu G, et al. Explosive boiling of nano-liquid argon films on high temperature platinum walls: Effects of surface wettability and film thickness. [Int J Therm Sci](#), 2018, 132: 610–617
- 25 Wang B B, Wang X D, Wang T H, et al. Enhancement of boiling heat transfer of thin water film on an electrified solid surface. [Int J Heat Mass Transf](#), 2017, 109: 410–416
- 26 Tabe H, Kobayashi K, Yaguchi H, et al. Influence of liquid-solid intermolecular force on levitation of impacting nanodroplet. [Heat Mass Transf](#), 2018, 55: 993–1003
- 27 Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. [J Comput Phys](#), 1995, 117: 1–19
- 28 Daw M S, Baskes M I. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals. [Phys Rev Lett](#), 1983, 50: 1285–1288
- 29 Daw M S, Baskes M I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. [Phys Rev B](#), 1984, 29: 6443–6453
- 30 Tinti A, Giacomello A, Grosu Y, et al. Intrusion and extrusion of water in hydrophobic nanopores. [Proc Natl Acad Sci USA](#), 2017, 114: E10266–E10273
- 31 Santiso E, Herdes C, Müller E. On the calculation of solid-fluid contact angles from molecular dynamics. [Entropy](#), 2013, 15: 3734–3745
- 32 Ma H, Suhling J C. A review of mechanical properties of lead-free solders for electronic packaging. [J Mater Sci](#), 2009, 44: 1141–1158
- 33 Zhou X W, Johnson R A, Wadley H N G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. [Phys Rev B](#), 2004, 69: 144113
- 34 Yaguchi H, Yano T, Fujikawa S. Molecular dynamics study of vapor-liquid equilibrium state of an argon nanodroplet and its vapor. [J Food Sci Technol](#), 2010, 5: 180–191

Summary for “电场抑制纳米液滴的Leidenfrost现象”

Suppression of Leidenfrost phenomenon of nanodroplets through an external electric field

Shuolin Wang, Yuan Shen, Xin He, Yanru Yang & Xiaodong Wang*

*Research Center of Engineering Thermophysics, North China Electric Power University, Beijing 102206, China** Corresponding author, E-mail: wangxd99@gmail.com

When a droplet comes into contact with a hot solid surface, heat is conducted from the surface to the droplet, triggering phase change of the droplet. As the surface temperature increases, the droplet undergoes successively evaporation, nucleate boiling, and transition boiling. When the surface temperature increases further and exceeds a critical one, a vapor layer immediately generates between the droplet and surface, and separates the droplet from the surface, making the droplet depart from the surface. This phenomenon is commonly termed the Leidenfrost phenomenon and the critical temperature is referred as Leidenfrost point (LFP). The Leidenfrost phenomenon significantly reduces heat dissipation from a surface because heat is transported from the surface to a droplet only by heat conduction of the vapor film, so that the surface temperature abruptly increases, which may lead to surface burnout. Various methods have been developed to suppress the Leidenfrost phenomenon. Among these methods, electrostatic suppression of the Leidenfrost phenomenon by external electric fields exhibits many advantages, and hence is considered as a very promising method. Many efforts have been devoted to understanding the mechanisms behind electrostatic suppression and optimizing the parameters of electric fields. These studies focused on droplets with sizes ranging from a few millimeters to a few tens of microns. With the development of micro/nano technique, heat transfer enhancement by manipulation of micro/nanodroplets has attracted a great deal of attention. Thus, how to suppress the Leidenfrost phenomenon of micro/nanodroplets becomes an interesting problem.

In this work, the Leidenfrost phenomenon of a nanoscale water droplet on gold plates with different wettabilities is first investigated via molecular dynamics simulations. The main emphasis is focused on how the surface wettability affects the LFP. Our simulations show that, with the same plate temperature of 700 K, only evaporation on the free surface of the droplet takes place on a hydrophilic surface, whereas the Leidenfrost phenomenon is triggered on a moderate wettability surface and a hydrophobic surface. Moreover, the triggering time is earlier on the hydrophobic surface. The further simulations demonstrate that the Leidenfrost phenomenon can be triggered on the hydrophilic surface by increasing the surface temperature to 1132 K, whereas it can also be suppressed on both the moderate wettability surface and the hydrophobic surface by decreasing the surface temperature. Therefore, it is concluded that the LFP increases as the increased surface hydrophilicity. By charging gold atoms in two specific region of the gold plate bottom, an electric field parallel to the surface is generated. This electric field is employed to suppress the Leidenfrost phenomenon. With the same plate temperature of 700 K, it is found that the Leidenfrost phenomenon is successfully suppressed on both the moderate wettability surface and the hydrophobic surface by the electric field, but a stronger electric field is required by the hydrophobic surface. The electric field enhances the interaction between water molecules and gold atoms, making the surface more wettable by the droplet. In other words, the electric field enhances the surface hydrophilicity, which is responsible for the electrostatic suppression of the Leidenfrost phenomenon.

Leidenfrost phenomena, wettability, molecular dynamics, electric fields, heat transfer enhancementdoi: [10.1360/TB-2019-0479](https://doi.org/10.1360/TB-2019-0479)