

基底各向异性引起的表面纳米气泡变形机制^{*}

韦佳辰¹, 张现仁², 宋凡¹

(1. 中国科学院力学研究所, 北京 100190;

2. 北京化工大学, 北京 100029)

近年的实验研究发现, 纳米气泡具有不同的曲率半径; 而计算及理论研究表明, 在相同过饱和度和系统中, 不同表面的纳米气泡应当具有一致的曲率半径。为解决这一分歧, 我们通过分子动力学模拟, 研究了在几何各向异性模型(GHM)及化学各向异性模型(CHM)基底上的表面纳米气泡, 提出实验与理论计算结果的差异归因于基底各向异性所导致的纳米气泡变形。

我们发现: 当系统的过饱和度不变时, GHM 和 CHM 中表面纳米气泡的接触角具有相同的上限, 该结果与之前的理论及模拟结论相符。通过分析纳米气泡的形态随基底疏水性(即固-液相互作用)的变化, 发现了表面纳米气泡变形的两种机制。在 GHM 基底上气泡接触线由表面粗糙度锚定, 因此固-液相互作用的变化仅会改变接触线和实测接触角的位置, 而纳米气泡曲率则保持不变; 另一方面, 在 CHM 基底上固-液相互作用的变化会导致气-液界面变形, 从而引发表面纳米气泡曲率和接触角的共同变化。

关键词: 纳米气泡; 变形机制; 气-液界面; 分子模拟

^{*} 通讯作者: 韦佳辰(1988-), 男, 助理研究员. E-mail: weijiachen@lnm.imech.ac.cn