

异形微结构表面润湿特性数值研究

孙小涵^{1,2}, 党超^{1,2*}, 王小伟³

(1. 北京交通大学 机械与电子控制工程学院 热能工程研究所, 北京 100044;
2. 微细尺度流动与相变传热北京市重点实验室, 北京 100044;
3. 国家能源集团科学技术研究院有限公司, 南京 210023)

摘要: **目的** 通过表面异形微结构设计实现低表面能有机工质的润湿性调控。**方法** 运用 VOF 模型针对不同表面能工质液滴在多种异形微结构表面的润湿情况进行仿真研究, 着重分析了微结构构型、微结构间距、宽度等几何参数尺寸对液滴润湿行为的影响, 提出了微结构表面实现润湿状态转变的临界判别准则。**结果** 研究发现单层双折返微结构疏液性能远优于单层单折返和单层柱形微结构表面, 可以在不依赖表面化学的情况下, 实现本征接触角为 5° 的低表面能工质的超疏水状态。单层柱形微结构在间距 100~250 μm 时, 临界本征接触角大于 90°。单层单折返微结构在间距 100~250 μm 时, 临界本征接触角大于 19°。双层异形微结构疏液性明显低于单层异形微结构。**结论** 相较于单层柱形微结构和单层单折返微结构, 单层双折返微结构可以实现对低表面能工质的排斥, 液滴在异形微结构间距较大、宽度较小的条件下, 也能保持良好的超疏水性。双层异形微结构由于结构尺寸较小, 毛细力作用显著, 表面疏液性能仅与上层微结构有关, 下层结构的能量壁垒失效。除此之外, 基于研究内容, 利用异形微结构润湿性差异, 提出了可实现低表面能液滴定向运输的异形微结构表面。

关键词: 异形微结构; 本征接触角; 润湿状态; 低表面能工质; 几何参数

中图分类号: TK123 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3660(2023)12-0160-09

DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2023.12.014

Numerical Study on Wetting Characteristics of Special-shaped Microstructure Surface

SUN Xiao-han^{1,2}, DANG Chao^{1,2*}, WANG Xiao-wei³

(1. Institute of Thermal Engineering, School of Mechanical, Electronic and Control Engineering, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, China; 2. Beijing Key Laboratory of Flow and Heat Transfer of Phase Changing in Micro and Small Scale, Beijing 100044, China; 3. National Energy Group Science and Technology Research Institute Co., Ltd., Nanjing 210023, China)

ABSTRACT: Superlyophobic surfaces are playing an increasingly important role in practical applications due to their excellent performance such as self-cleaning, anti-icing and droplet manipulation. In practical application, low surface energy working

收稿日期: 2023-10-01; 修订日期: 2023-11-20

Received: 2023-10-01; Revised: 2023-11-20

基金项目: 国家自然科学基金 (52106069); 装备预研教育部联合基金 (8091B032247)

Fund: National Natural Science Foundation of China (52106069); Joint fund of Equipment Pre-Research and the Ministry of Education (8091B032247)

引文格式: 孙小涵, 党超, 王小伟. 异形微结构表面润湿特性数值研究[J]. 表面技术, 2023, 52(12): 160-168.

SUN Xiao-han, DANG Chao, WANG Xiao-wei. Numerical Study on Wetting Characteristics of Special-shaped Microstructure Surface[J]. Surface Technology, 2023, 52(12): 160-168.

*通信作者 (Corresponding author)

medium is the most widely used working medium except water, but the properties of low surface energy working medium are obviously different from water, so how to realize the control of wettability of low surface energy organic working medium has become the main concern of the industry. To investigate the mechanism of wettability regulation of low surface energy working fluid by special-shaped microstructures, simulation studies were conducted on a variety of special-shaped microstructure surfaces. VOF model was used in this work to simulate the wettability of different surface energy working media on special-shaped microstructure surface. Contact angle was an important index to measure wettability. This work focused on analyzing the effect of microstructure, spacing and upper microstructure surface width on the wetting behavior. It was found that the lyophobic performance of single-layer double reentrant microstructure was much better than that of single-layer single reentrant and cylindrical microstructures, and the superlyophobic state of low surface energy working medium with intrinsic contact angle of 5° could be achieved without relying on surface chemistry. When the spacing of the cylindrical microstructure was between 100 μm and 250 μm, the critical intrinsic contact angle was more than 90°. When the single-layer single reentrant microstructure was between 100 μm and 250 μm, the critical intrinsic contact angle was more than 19°. The lyophobicity of single-layer double reentrant microstructures to low surface energy working fluids was less affected by the spacing and width of special-shaped microstructures. The study of droplet wetting behavior showed that the smaller the solid-liquid interface contact area, the larger the apparent contact angle, and the better the lyophobic performance. At the same time, the energy barrier of the reentrant structure had a great effect on the improvement of lyophobicity. Therefore, the double-layer special-shaped microstructure with a small width of the first layer was designed to reduce the contact area and increase the energy barrier. Due to the small size of the double-layer special-shaped microstructure and the significant effect of capillary force, the surface lyophobic performance was only related to the upper microstructure, and the energy barrier of the lower structure failed. In addition, based on the research content and the wettability difference of special-shaped microstructure, a special-shaped microstructure surface which could realize directional transport of droplets was proposed. The results show that the self-drive of low surface energy droplets can be effectively realized through the surface microstructure design. Simple operation and low energy consumption are of great significance for practical applications.

KEY WORDS: special-shaped microstructure; intrinsic contact angle; wetting state; low surface energy working medium; geometric parameters

随着石油工业、航空航天、生物医疗等行业的高速发展,对自洁防污等高性能表面的需求逐渐增大。超疏水表面因其自洁^[1]、油水分离^[2]、抗粘连^[3]、抗菌^[4]、液滴操纵^[5]等性能得到了广泛的关注。在传热领域,表面润湿性会影响工质与表面的接触过程以及流动阻力,进而影响换热系数及功耗。表面能低于 25 mN/m 的工质被称为低表面能工质。如表 1 所示,低表面能工质是除水以外在国民经济和国防装备中应用较为广泛的工质,而与之相对应的应用场景中固体壁面通常是具有高表面能的金属材质,如铜、铝等。液体的润湿状态由固液表面能差决定,液体表面能越

低越不容易在未加工表面实现疏液状态。因此,如何实现低表面能工质的润湿性调控成为现阶段需要关注的问题。本研究将主要针对低表面能液滴的润湿行为进行研究。

现有的制备超疏水表面的方法:一是修饰低表面能工质,即在固体表面喷涂氟化物^[6-10]等涂层来降低固体表面能。但由于含氟化学物质的非生物相容性和毒性,使其在传热领域的应用受限^[11]。二是,修饰表面纹理,该方法在传热领域应用广泛。但是,传统的方柱、圆柱等微结构表面^[12-16],对低表面能工质仍不能起到良好的疏液效果。通过对荷叶表面微观结构的

表 1 不同表面能工质典型示例
Tab.1 Typical examples of different surface energy working media

surface tension/(mN/m)	working medium	application
8.4	R134a	high-pressure refrigerant, blowing agent
13.6	HFE7100	electronic coolant, electronic cleaning fluid
14.0	R245fa	atmospheric pressure refrigerant, blowing agent
22.3	Ethanol	disinfectant, coolant, organic solvent, detergent
23.1	Acetone	binder, diluent, cleaner, extractant
25.4	Dodecane	Organic synthetic intermediates and chromatographic analysis standards

研究^[17],人们发现微米-纳米二级结构是制备人工超疏水表面的关键。在不依赖材料特性的情况下,改变表面纹理可以将非双疏表面转变为双疏表面。国内外学者基于仿生学^[18],从壁虎脚部、甲虫背部、水稻叶、水黽、蝉翅膀、蝴蝶翅膀、蚊子眼睛、玫瑰花瓣、鱼鳞、槐叶、杨树叶、蛤壳、企鹅羽毛表面获取灵感开发了具有分层结构、单折返结构、双折返结构等异形微结构表面^[19-22]。

此外,研究人员进一步发现,在自然界中,生物疏水表面利用其各向异性的疏水性来完成液滴驱动。基于仿生制备出的各向异性超疏水表面^[23-26],相较于基于外场作用(如磁场驱动、电驱动、光驱动等)的液滴驱动方法,具有操作简单、无需外部能量加入等优点。将液滴滴在表面化学或不均匀表面纹理的各向异性表面时,不同部位的润湿性存在差值,从而出现指向某一侧的拉普拉斯压力,使液滴向亲水的一端移动。

Tuteja等^[22,27]首次通过光刻制备了双折返微结构并提出4项设计参数,该设计可稳定抵抗多种低表面张力液滴浸润。Liu等^[28]制备了一种双折返微结构表面,可使表面张力72.8~10 mN/m的多种有机溶液或氟化剂维持悬浮态并实现反弹。Hu等^[29]通过激光光刻制备了具有柔性支架的异形微结构表面,通过抵抗液滴刺穿和减少接触时间来提高液体驱避性。异形微结构表面对于低表面能液滴润湿性调控的良好性能已成为众多学者的探索重点。然而受限于表面制备的复杂性,实验开发新型微结构表面进度较为缓慢。同时,液滴润湿异形微结构过程涉及一系列复杂的动态物理过程,相比于宏观流动,润湿行为往往有局部润湿特征,实验机理研究还受限于观测困难和难以量化的问题。随着仿真技术的发展,将一些复杂的物理问题精炼为相对简单的数值仿真问题,通过更加灵活的表面建模和量化分析为异形微结构表面润湿行为的演变和预测提供有效分析手段。已有研究人员运用数值模拟对水在异形微结构表面的润湿行为进行了深入探索^[30-32],验证了数值模拟研究液滴润湿行为的可靠性。本文将通过仿真研究和理论分析,针对不同表面能工质的液滴,进一步探讨低表面张力液滴在异形微结构表面的润湿状态和动力学特征,提出定向运输的新结构。

1 模型建立

1.1 物理模型

以单层单折返微结构为例,仿真采用的异形微结构几何模型如图1所示,计算域为2 mm×2.5 mm的长方形区域,将计算域的下表面和微结构设定为壁面边界条件,上方和右侧表面设定为压力出口边界条件,对计算域进行四面体网格划分,将底部微结构

区域网格加密,微结构上方网格尺寸呈1.05指数递增,并对网格进行无关性验证。整个计算域的重力加速度为9.81 m/s²,表面张力为0.013 6 N/m,密度为1 520 Kg/m³,时间步长设定为0.000 001 s。本次仿真通过本征接触角(θ_0)的设定值体现液体与微结构的润湿作用,液滴直径取1 mm,液滴相对于微结构上表面无初始高度和速度。为了保证二维仿真的准确性,避免液滴冲击壁面对润湿过程产生影响,本文模型设计时,在模型底部设置20 μ m的通道,避免二维模型底部结构造成气流阻塞产生向上的力,确保本文讨论对象为微结构自身特征对润湿性的影响,使仿真过程更接近实际润湿过程。

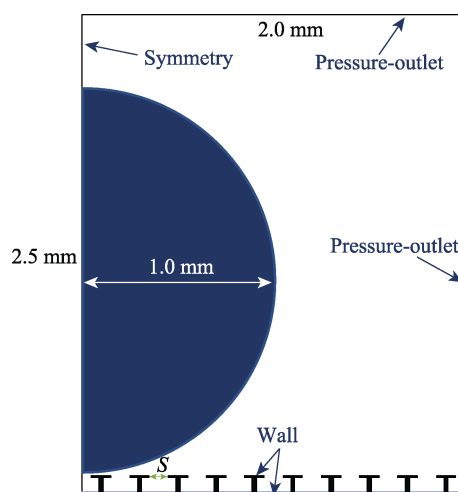


图1 液滴润湿异形微结构几何模型
Fig.1 Geometric model of special-shaped microstructure with droplet wetting

1.2 异形微结构模型

本文选用的5种不同的异形微结构表面,如图2所示,研究5种样件表面上的液滴润湿过程。利用VOF模型,进行液滴润湿的仿真研究,本文着重分析了表面微结构构型及相关尺寸参数对润湿性的影响。

1.3 数学模型

1.3.1 VOF模型

相较于宏观流动,本研究所涉及的液滴和微结构几何量级较小,因此液态工质的质量守恒就显得尤为重要。在诸如VOF、Level Set、相场法等可靠性较高的两相流追踪方法中,VOF模型能够精确追踪相界面运动,保证流体质量守恒,在本文的研究场景下有较为突出的优势,因此,本研究使用基于VOF模型的相界面追踪方法开展仿真研究,仿真时设定空气为主相,液滴为第二相,通过计算网格内每一相的体积分数得到气液界面,完成对每一个计算单元相界面的追踪。

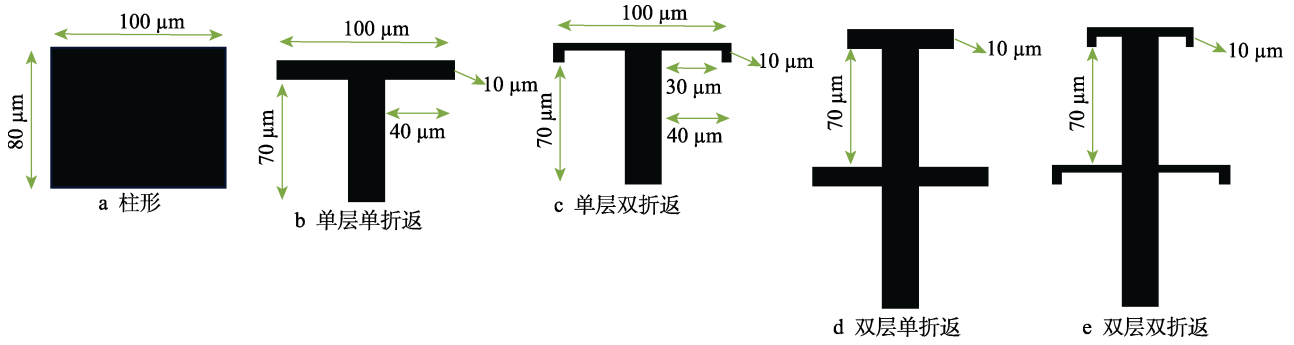


图 2 异形微结构几何结构图

Fig.2 Geometric diagram of special-shaped microstructure: a) cylindrical; b) single-layer single reentrant; c) single-layer double reentrant; d) double-layer single reentrant; d) double-layer double reentrant

1.3.2 控制方程

连续性方程:

$$\frac{\delta(\alpha_2)}{\delta t} + \nabla \cdot (\alpha_2 \vec{v}_2) = 0 \quad (1)$$

$$\alpha_2 + \alpha_1 = 1 \quad (2)$$

式中, α_2 为次相体积分, v_2 为次相速度, α_1 为主相体积分。

动量方程:

$$\frac{\delta(\rho \vec{v})}{\delta t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla [\mu(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (3)$$

式中, ρ 为流体平均密度, v 为流体速度, μ 为流体平均黏度, F 为表面张力项。表面张力项 F 运用连续表面力模型 (Continuum Surface Force, CSF) 进行处理。本文中气液两相间的仿真, 单个网格单元表面张力源项 F 的表达式为:

$$\vec{F} = \sigma \frac{\rho \kappa_2 \nabla \alpha_2}{(\rho_1 + \rho_2)/2} \quad (4)$$

式中, κ_2 为第二相与主相之间的界面曲率。

1.3.3 本征接触角

本研究中通过定义壁面本征接触角 θ_0 以体现液相与壁面的黏附效果, 实现对固液表面能差的量化调

控, 进而反映具有不同表面能特性的低表面能工质液滴在异形微结构表面的润湿特征。对于理想的光滑表面, 液滴三相接触线上气液界面的法向量为:

$$\vec{n} = \nabla \alpha_i = \vec{n}_w \cos \theta_0 + \vec{t}_w \sin \theta_0 \quad (5)$$

式中, \vec{n}_w 和 \vec{t}_w 分别为壁面单位法向量和切向量。

2 结果及分析

2.1 单层异形微结构表面液滴润湿行为分析

以柱形、单层单折返和单层双折返微结构为研究对象, 在支柱高度为 80 μm 、宽度为 100 μm 条件下, 对液滴在不同间距尺寸微结构上的润湿过程进行仿真。图 3 将柱形、单层单折返、单层双折返 3 种微结构润湿转变情况进行对比分析。本文运用临界本征接触角表征液滴润湿性转变临界值, 本征接触角低于临界本征接触角液滴最终呈现 Wenzel 态, 高于临界本征接触角呈现 Cassie 态。通过图 3a 可以清晰地看出, 相较于柱形微结构, 单层单折返和单层双折返微结构对疏液性有明显的提升。如图 3b 所示, 达到临界本征接触角的液滴表观接触角基本大于 150°, 液滴呈现稳定的超疏水性。

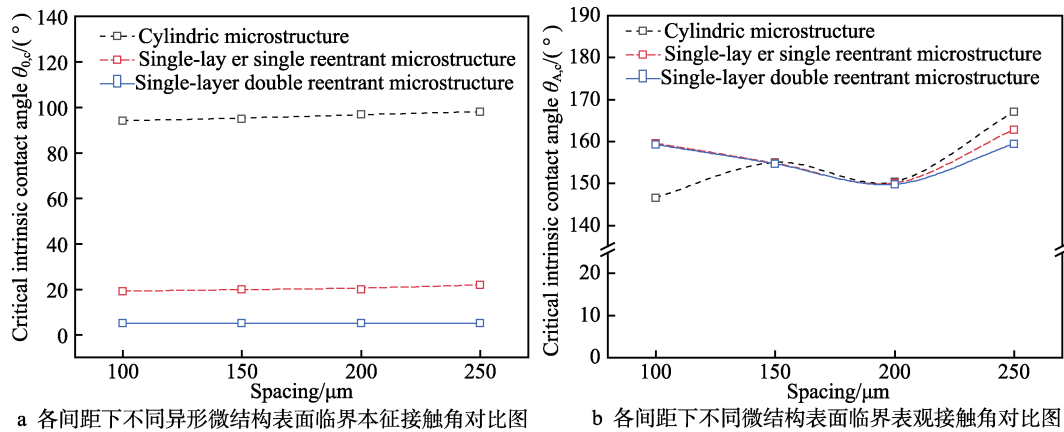


图 3 各间距下不同微结构表面临界本征接触角与临界表观接触角

Fig.3 Critical intrinsic contact angle and apparent contact angle of different microstructure surfaces with different spacing: a) comparison of intrinsic contact angles of different special-shaped microstructures with different spacing; b) comparison of apparent contact angles of different special-shaped microstructures with different spacing

根据仿真结果对单层折返结构上的液滴润湿行为进行分析, 浸润过程中三相界面的变化状况如图 4 所示。设定液滴即将接触到单折返微结构上表面时刻为 0 ms; 在 0 ms 到 1.7 ms 内, 液滴与固体壁面接触时, 因液滴内部振动, 造成三相界面连续膨胀收缩, 三相界面受惯性力的影响接连突破 2 个尖锐边缘; 1.7 ms 后三相界面始终未接触到支柱, 则三相界面在液体表面张力的作用下退回到第 2 个尖锐边缘位置, 在单折返微结构第 2 个尖锐边缘实现钉扎效应。此现象解释了折返微结构与柱形微结构润湿行为和润湿情况的差异。

此外, 分析发现, 微结构构型及尺寸确定时, 液滴稳定后的表观接触角与润湿微结构的数目和相邻微结构之间的间距有关。选取 2 种单层异形微结构表面各自临界 Cassie 状态附近对应的本征接触角, 对不同间距条件下液滴的润湿情况进行仿真研究, 结果如图 5 所示。

将液滴最终形态拟合为圆来确定液滴表观接触角, 仿真结果与模型计算得出不同间距下液滴的润湿状态及最后形成的表观接触角大小, 结果如表 2 所示。

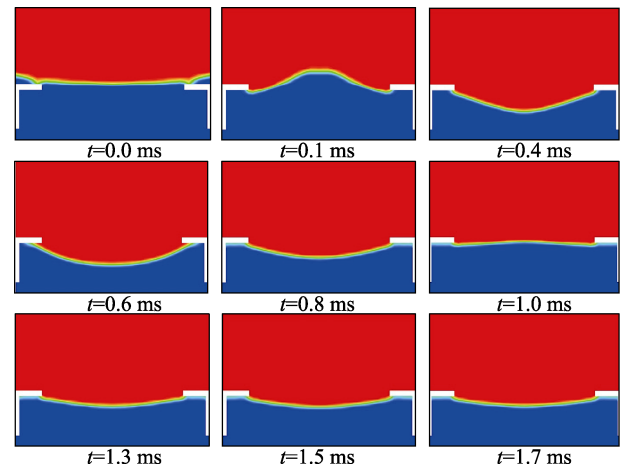


图 4 润湿过程中气液界面的变化情况
Fig.4 Changes of gas-liquid interface during wetting process

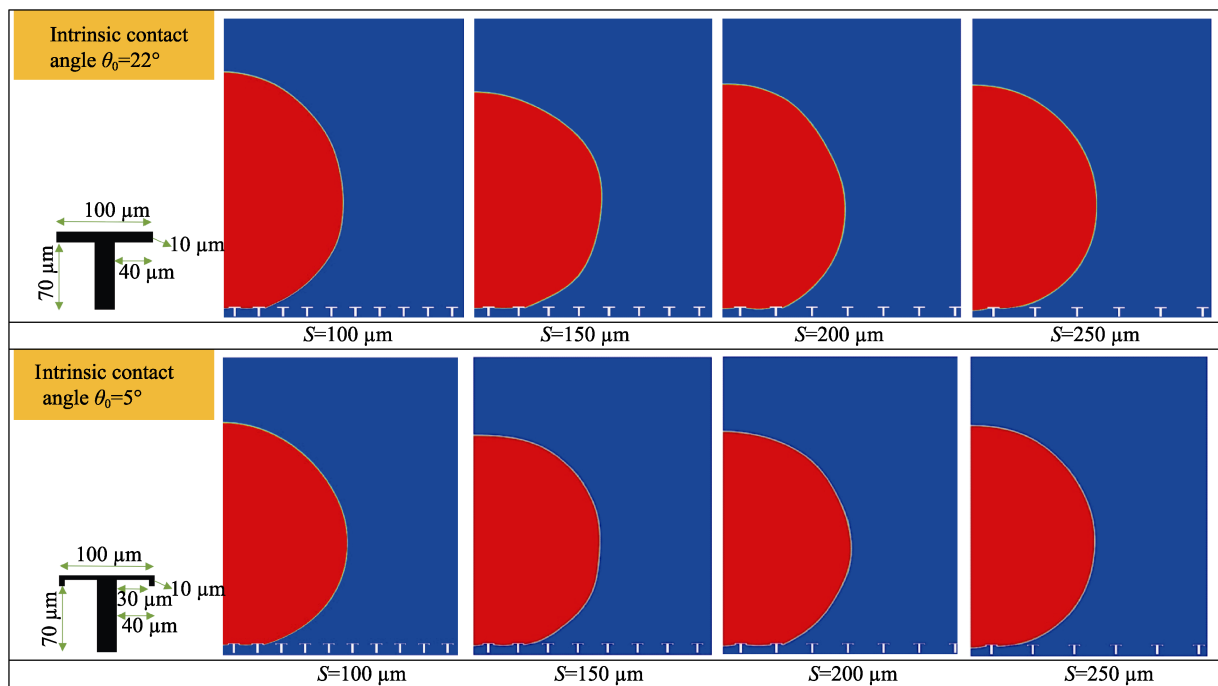


图 5 不同微结构间距时液滴状态
Fig.5 Droplet state at different microstructure spacing

表 2 润湿状态及表观接触角计算结果
Tab.2 Wetting state and apparent contact angle calculation results

Configuration	Spacing/ μm	Wetting state	Critical intrinsic contact angle/ $^{\circ}$	Number of infiltrated microstructures	Apparent contact angle/ $^{\circ}$
Single-layer single reentrant microstructure	250	Cassie state	22	1	157.9
	200	Cassie state	20	2	150
	150	Cassie state	20	2	154.8
	100	Cassie state	19	2	159.5
Single-layer double reentrant microstructure	250	Cassie state	≤ 5	1	161.1
	200	Cassie state	≤ 5	2	150
	150	Cassie state	≤ 5	2	154.8
	100	Cassie state	≤ 5	2	159.5

从图 5 与表 2 可以发现, 在微结构间距 100~200 μm 的单层单折返异形微结构表面, 随着相邻微结构间距的减小, 临界本征接触角减小, 相同本征接触角下其表观接触角增大。润湿微结构数目相同时, 随着相邻微结构之间间距的增大, 液滴稳定后的表观接触角减小, 而当间距增至 250 μm 时, 表观接触角受相邻折返结构之间的间距和润湿微结构个数的影响使表观接触角陡增。双折返微结构随间距变化规律基本与单折返微结构相似, 然而其悬壁结构的增加, 阻碍了三相界面向支柱靠近的运动, 使其超疏水性能大幅提升。即使本征接触角低至 5° , 微结构间距增大, 仍能够建立稳定的 Cassie 状态, 实现对低表面能工质的疏液状态。

2.2 双层异形微结构表面液滴润湿行为分析

在下层微结构宽度为 100 μm 、各层支柱高度为 80 μm 、微结构间距为 100 μm 的情况下, 对 2 种双层异形微结构在不同上层微结构宽度下的润湿情况进行仿真研究, 结果如图 6 所示。

从图 6a 可以看出, 由于折返结构良好的钉扎效应, 微结构上表面宽度对润湿状态转变的影响较小, 随着上表面宽度的变化, 临界本征接触角值相对稳定。然而, 研究发现上表面宽度与临界表观接触角呈负相关, 如图 6b 所示。分析原因发现, 相较于单层折返微结构, 双层折返微结构由于其上层结构间距较大, 随着上表面宽度增加, 液滴润湿双层微结构个数增加, 使固液接触面积增大, 临界表观接触角减小, 疏液性降低, 如图 6c 所示。

进一步分析液滴浸润单折返微结构表面过程, 如图 7 所示, 可以看出双层微结构疏液性只与上层微结构有关, 下层结构不能对疏液性能产生贡献。这是因为当液滴浸润上层微结构后, 由于固体表面微结构尺寸较小, 在毛细力作用下, 液体会顺着微结构表面继续运动, 增大了液体对表面的润湿能力, 导致下层结构的能量壁垒失效, 最终完全浸润。

2.3 异形微结构表面液滴润湿过程局部受力机制理论分析

为更清晰地阐述异形微结构表面润湿行为, 本文对异形微结构的润湿过程局部受力机制进行理论分析, 见图 8。由于液滴体积远大于凹槽半径, 因此, 忽略重力作用, 假设初始液气界面为平面, $\Delta P=0$ 。除此之外, 假设固体表面是理想的均匀、光滑、刚性表面。忽略接触角滞后, 认为本征接触角是唯一的独立变量。

悬壁与直壁的润湿性差异是由于顶部结构对表面突破压力的影响造成的。液滴滴落时, 液滴表面曲线不断向下移动, 表面压力不断增大, 但三相线保持不动。

微结构间弧形界面曲率半径为 R , 表示为:

$$R = \frac{x}{\sin(\theta_A - \pi)} \quad (6)$$

式中, x 为三相接触线与微结构边缘的接触点到凹槽对称中心的距离。当表观接触角增大到一定程度时, 三相接触线将突破微结构边缘固定。三相线开始向下移动, 发生浸润, 临界表观接触角由本征接触角和顶部微结构边缘角决定, 如式 (7) 所示。选用笛卡尔坐标进行描述, 逆时针为角度的正方向。

$$\theta_{A,c} = \theta_0 + \pi + \psi \quad (7)$$

式中, $\theta_{A,c}$ 为临界表观接触角, θ_0 为本征接触角, ψ 为顶部微结构边缘角。

悬壁因其产生的垂直毛细力和钉扎效应使表面的突破压力更大, 液滴滴落的能量损失更小。而直臂结构毛细力倾斜, 当斜向毛细力不能提供足够的支撑力, 三相线发生移动时, 会损失动能, 这使得液滴更难离开表面。对于突破压力的大小, 可以用拉普拉斯定律解析描述:

$$\Delta P = \frac{2\gamma}{R} \quad (8)$$

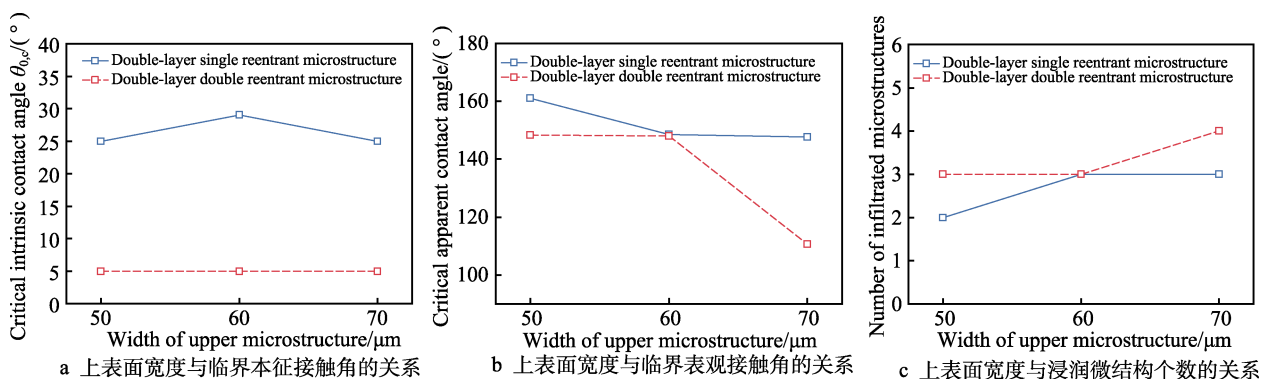


图 6 上表面宽度与临界本征接触角、临界表观接触角和浸润微结构个数的关系图

Fig.6 Relationship diagram of upper surface width with critical intrinsic, apparent contact angle and number of wetting microstructures: a) variation of intrinsic contact angle with the width of the upper surface; b) variation of apparent contact angle with the width of the upper surface; c) variation of number of wetting microstructures with the width of the upper surface

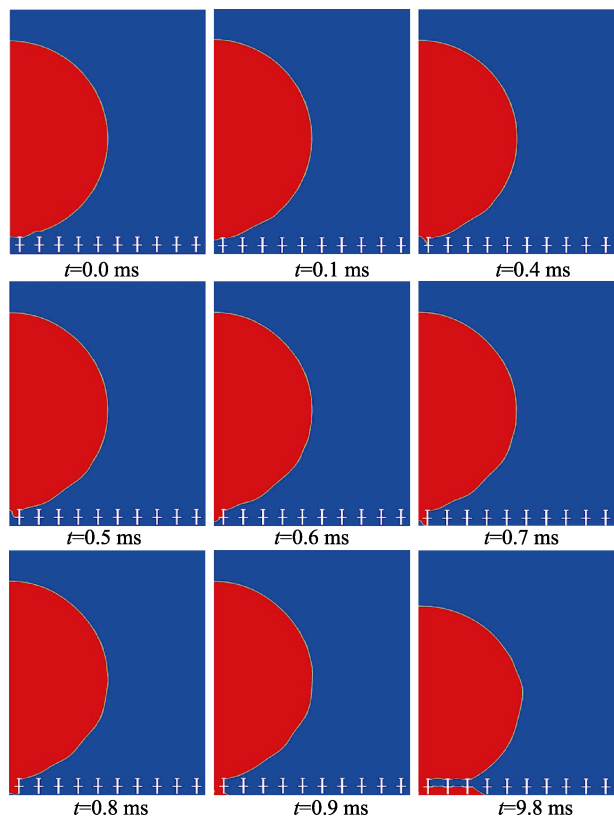


图 7 液滴浸润微结构表面情况
Fig.7 Droplet wetting of microstructure surfaces

式中, γ 为气液界面的表面张力。突破压力分为 2 种:

$$1) \theta_0 \leq \pi/2 - \psi$$

此时, 突破压力由式 (6) ~ (8) 推导得出:

$$\Delta P_{\text{break}} = P_h - P_0 = \frac{2\gamma \sin(\theta_0 + \psi)}{x} \quad (9)$$

$$2) \theta_0 > \pi/2 - \psi$$

此时, 凹槽内气液界面呈现半圆形, $R=x$, 由式 (8) 可以得到:

$$\Delta P_{\text{break}} = P_h - P_0 = \frac{2\gamma}{x} \quad (10)$$

柱形顶部微结构边缘角为 $(-2)/\pi$, 单折返边缘角为 0° , 双折返边缘角为 $2/\pi$, 进行计算并绘制图 9, 横坐标为微结构间距, 纵坐标为本征接触角, 颜色从浅到深依次表示突破压力 10^4 、 10^5 、 10^6 、 10^7 Pa。可以看出间距越小, 本征接触角越大, 对应的突破压力越大。

对于柱形微结构只有本征接触角大于 90° 时, 才能达到疏液状态。边缘角为 0° 的单折返微结构, 已经可以抵挡本征接触角接近 0° 的液体的完全润湿。但在本征接触角为 90° 时, 突破压力存在一个跃迁。当本征接触角大于 90° , 突破压力只与外加液体的表面张力 γ 成正比, 与腔体半径 x 成反比, 而与本征接触角无关。另一方面, 当本征接触角小于 90° 时, 阻力随着本征接触角的减小而减小。对于单折返微结构, 在非常小的固有接触角下, 可能会出现突破屏障小到足以被压力波动 (如机械振动等) 克服, 从而导致疏液能力不足。因此, 单折返微结构对于低表面能工质稳

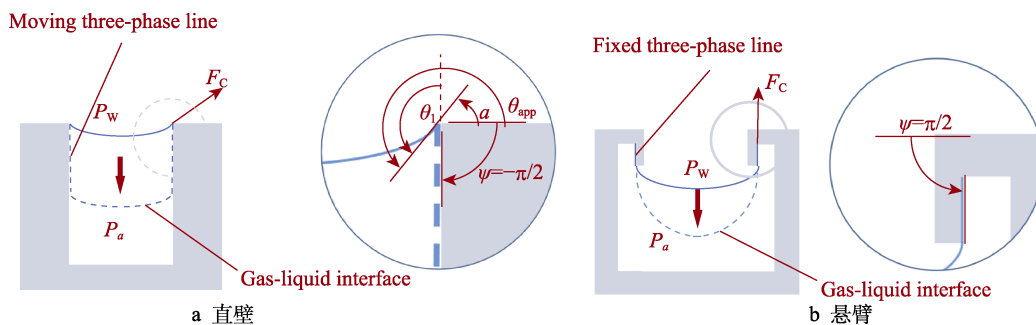


图 8 直壁和悬壁模型示意图

Fig.8 Model diagram of straight wall and overhang wall: a) straight wall; b) overhang wall

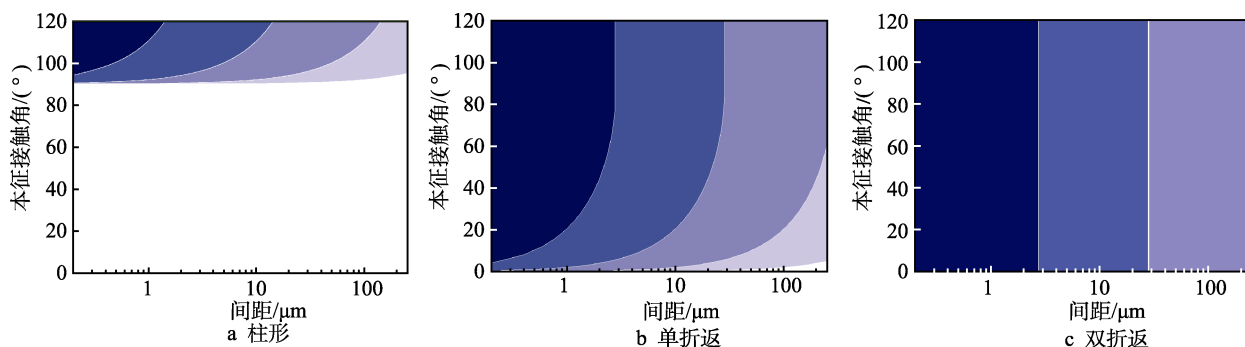


图 9 3 种微结构理论突破压力等高线

Fig.9 Theoretical break-through pressure contours of three microstructures:
a) cylindrical; b) single reentrant; c) double reentrant

定性较差。对于双折返微结构, 假设悬壁宽度 b 比凹槽的半径 x 小。边缘角为 $2/\pi$, 突破压力与本征接触角无关。因此, 双折返微结构对任何化学性质的固体和液体都能实现疏水状态。

2.4 液滴定向运输仿真研究

基于以上对不同结构液滴润湿性的研究, 本文进一步提出 2 种异形微结构表面, 尝试通过不同运动方向上的润湿性差异驱动液滴运动。2 种异形微结构如图 10 所示。

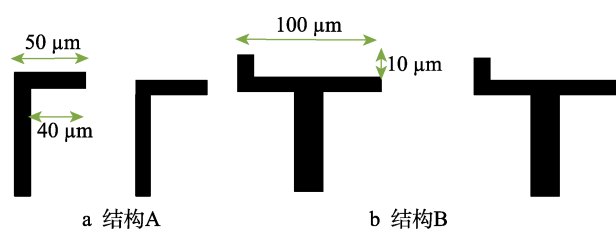


图 10 异形微结构几何结构图
Fig.10 Geometric diagram of special-shaped microstructures: a) structure A; b) structure B

通过仿真发现, 对于结构 A, 其左侧直壁和右侧悬壁的润湿性差异, 使液滴产生轻微偏移, 如图 11 所示, 但由于结构 A 对液滴的驱动力小于液滴润湿固体表面过程中产生的能量损耗, 因此使液滴发生偏移后无法驱动液滴继续移动。

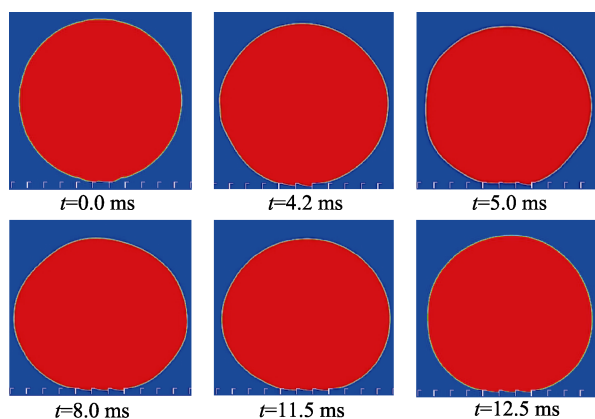


图 11 结构 A 表面液滴运动状态
Fig.11 Droplet motion on the surface of structure A

而对于结构 B, 凸起部分增加了对液滴的驱动作用, 且凸起部分先于平面接触到液滴, 因而左右两侧润湿情况产生差异, 在各向异性浸润性和重力的共同作用下, 液滴向右侧运动, 仿真结果如图 12 所示。

进一步研究发现, 高表面能工质会仅依靠凸起部分实现疏水状态, 无法与平面接触, 左右两侧不存在润湿性差异, 无法驱动液滴运动, 如图 13 所示。因此, 结构 B 能否实现液滴定向运输, 受工质表面能影响, 存在适用范围。

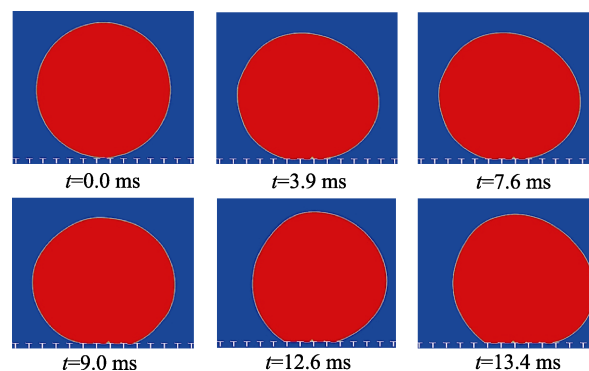


图 12 结构 B 表面液滴运动状态
Fig.12 Droplet motion on the surface of structure B



图 13 结构 B 表面液滴运动状态的局部放大图
Fig.13 Partial enlarged view of droplet motion on the surface of structure B

3 结论

本文对柱形、单折返、双折返、双层单折返和双层双折返微结构表面的润湿过程进行仿真。着重分析了微结构几何结构尺寸以及微结构几何构型对润湿状态的影响, 对超疏水异形微结构的润湿过程进行了研究分析, 得到的主要结论如下:

1) 液滴在不同微结构表面的润湿行为与微结构几何构型相关, 双折返微结构表面疏液性能远优于单折返和柱形微结构表面, 可以实现本征接触角为 5° 的低表面能工质, 可在双折返微结构表面实现超疏液状态。

2) 异形微结构表面润湿性受本征接触角和微结构间距的影响。随着本征接触角的增大, 液滴润湿微结构个数减小, 表观接触角增大。随着间距增大, 临界本征接触角增大。

3) 双层微结构表面疏液性仅与上层微结构有关。上层表面宽度增加, 液滴临界表观接触角减小。但仿真发现由于微结构尺寸较小, 毛细力作用显著, 导致下层结构的能量壁垒失效, 表面疏液性仅与上层微结构有关。

4) 依据不同结构润湿性的差异, 设计了不对称异形微结构, 实现了液滴不依靠外场的定向运输, 操作简单、能耗低对于实际应用有重要意义。但对于高表面能工质其各向异性润湿性得不到体现, 对于具体适用条件还需进一步探索。

参考文献:

- [1] WANG Yu, ZHANG Qian, LI Ping-ping, et al. A Durable and Sustainable Superhydrophobic Surface with Intertwined Cellulose/SiO₂ Blends for Anti-Icing and Self-Cleaning Applications[J]. *Materials & Design*, 2022, 217: 110628.
- [2] WANG Hao, HUANG Xue-wu, LI Bei, et al. Facile Preparation of Super-Hydrophobic Nanofibrous Membrane for Oil/Water Separation in a Harsh Environment [J]. *Journal of Materials Science*, 2018, 53(14): 10111-10121.
- [3] LI Da-wei, WANG Hui-yuan, LUO Dan, et al. Corrosion Resistance Controllable of Biomimetic Superhydrophobic Microstructured Magnesium Alloy by Controlled Adhesion [J]. *Surface and Coatings Technology*, 2018, 347: 173-180.
- [4] REED J H, GONSALVES A E, ROMÁN J K, et al. Ultrascale Multifunctional Nanoengineered Copper and Aluminum for Antiadhesion and Bactericidal Applications [J]. *ACS Applied Bio Materials*, 2019, 2(7): 2726-2737.
- [5] ZHONG Lie-shuang, FENG Jing, GUO Zhi-guang. An Alternating Nanoscale (Hydrophilic-Hydrophobic)/Hydrophilic Janus Cooperative Copper Mesh Fabricated by a Simple Liquidus Modification for Efficient Fog Harvesting[J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2019, 7(14): 8405-8413.
- [6] 周荃卉, 余新泉, 张友法, 等. 喷砂-阳极氧化-氟化处理构筑铝合金超疏水表面[J]. *高等学校化学学报*, 2010, 31(3): 456-462.
ZHOU Quan-hui, YU Xin-quan, ZHANG You-fa, et al. Fabrication of Superhydrophobic Surface on Aluminum Alloy by Sandblasting-Anodizing-Fluorination[J]. *Chemical Journal of Chinese Universities*, 2010, 31(3): 456-462.
- [7] ZHOU Hua, WANG Hong-xia, NIU Hai-tao, et al. Robust, Self-Healing Superamphiphobic Fabrics Prepared by Two-Step Coating of Fluoro-Containing Polymer, Fluoroalkyl Silane, and Modified Silica Nanoparticles[J]. *Advanced Functional Materials*, 2013, 23(13): 1664-1670.
- [8] AN Xiao-chan, LIU Zhong-yun, HU Yun-xia. Amphiphobic Surface Modification of Electrospun Nanofibrous Membranes for Anti-Wetting Performance in Membrane Distillation[J]. *Desalination*, 2018, 432: 23-31.
- [9] CHEN Bei-bei, DONG Zhe, JIA Yu-han, et al. Sepiolite-Based Superamphiphobic Coating with Excellent Robustness, Chemical Stability and Self-Cleaning Performance [J]. *Progress in Organic Coatings*, 2021, 157: 106297.
- [10] YI E, KANG H S, LIM S M, et al. Superamphiphobic Blood-Repellent Surface Modification of Porous Fluoropolymer Membranes for Blood Oxygenation Applications [J]. *Journal of Membrane Science*, 2022, 648: 120363.
- [11] GHAFARI S, ALIOFKHAZRAEI M, BARATI DARBAND G, et al. Review of Superoleophobic Surfaces: Evaluation, Fabrication Methods, and Industrial Applications[J]. *Surfaces and Interfaces*, 2019, 17: 100340.
- [12] MOHAN KUMAR K, VELMURUGAN V. Wetting Behavior of Textured Silicon Surfaces- an Experimental Study[J]. *Materials Research Express*, 2020, 7(5): 054001.
- [13] CHANG Zi-yang, LU Yan. Fabrication of Superhydrophobic Surfaces with Cassie-Baxter State[J]. *Journal of Dispersion Science and Technology*, 2022, 43(8): 1099-1111.
- [14] 李文, 马晓婧, 徐进良, 等. 纳米结构及浸润性对液滴润湿行为的影响[J]. *物理学报*, 2021, 70(12): 300-310.
LI Wen, MA Xiao-jing, XU Jin-liang, et al. Effects of Base Angle and Wettability of Nanostructures on Droplet Wetting Behaviors[J]. *Acta Physica Sinica*, 2021, 70(12): 300-310.
- [15] LYU Ji-zu, GAO Lin-song, ZHANG Yong-fei, et al. Dynamic Spreading Characteristics of Droplet on the Hydrophobic Surface with Microstructures[J]. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2021, 610: 125693.
- [16] MARTÍNEZ-CALDERON M, RODRÍGUEZ A, DIAS-PONTE A, et al. Femtosecond Laser Fabrication of Highly Hydrophobic Stainless Steel Surface with Hierarchical Structures Fabricated by Combining Ordered Microstructures and LIPSS[J]. *Applied Surface Science*, 2016, 374: 81-89.
- [17] BARTHOLOTT W, NEINHUIS C. Purity of the Sacred Lotus, or Escape from Contamination in Biological Surfaces[J]. *Planta*, 1997, 202(1): 1-8.
- [18] 佟威, 熊党生. 仿生超疏水表面的发展及其应用研究进展[J]. *无机材料学报*, 2019, 34(11): 1133-1144.
TONG Wei, XIONG Dang-sheng. Bioinspired Superhydrophobic Materials: Progress and Functional Application [J]. *Journal of Inorganic Materials*, 2019, 34(11): 1133-1144.
- [19] LIAO Dong, HE Ming-hao, QIU Hui-he. High-Performance Icephobic Droplet Rebound Surface with Nanoscale Doubly Reentrant Structure[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 133: 341-351.
- [20] WANG Hu-jun, ZHANG Zhi-hui, WANG Zuan-kai, et al. Improved Dynamic Stability of Superomniphobic Surfaces and Droplet Transport on Slippery Surfaces by Dual-Scale re-Entrant Structures[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2020, 394: 124871.
- [21] SONG Jin-long, PAN Wei-hao, WANG Kang, et al. Fabrication of Micro-Reentrant Structures by Liquid/Gas Interface Shape-Regulated Electrochemical Deposition[J]. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 2020, 159: 103637.
- [22] TUTEJA A, CHOI W, MABRY J M, et al. Robust Omniphobic Surfaces[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2008, 105(47): 18200-18205.

(下转第 187 页)