doi:10.3772/j.issn.1002-0470.2022.05.009

# 亲水微结构倾斜表面上液滴形态的数值模拟<sup>①</sup>

董 健②\*\*\* 胡光辉\* 郭有海\* 卞银波\* 赵逸平\* 李志鑫\*

(\*浙江工业大学机械工程学院 杭州 310023) (\*\*传感技术联合国家重点实验室 上海 200050)

**摘** 要 本文基于能量最小原理,建立了重力场中亲水微结构倾斜表面上液滴的数值模型。当系统总能量取到最小值时,液滴达到最终的平衡状态;采用有限差分法和非线性优化算法,对倾斜表面上的液滴形态进行数值模拟。讨论了表面倾角、液滴体积以及微结构尺寸对液滴形态的影响,并以实验结果验证数值结果。结果表明,倾角和液滴体积的增大会增加液滴前向接触角,减小后向接触角,同时增大了三相接触线长度和液滴高度;当微结构的相对高度较大且相对间距较小时,表面呈现超亲水的趋势,此时液滴三相线长度长、液滴高度低。该研究可以指导设计合理的亲水表面,或应用于微流控芯片中液滴的控制。 **关键词** 液滴形状;倾斜表面;微结构;亲水;能量最小原理

## 0 引言

固体表面上的液滴润湿特性在日常生活以及工 业领域中应用广泛,如农药喷洒<sup>[1-3]</sup>、冷凝换热 器<sup>[4-5]</sup>、印刷工艺<sup>[6-8]</sup>、微流控芯片<sup>[9-12]</sup>等。研究具有 亲水微结构的倾斜表面上的液滴形态是润湿和扩散 力学中的一个基本问题,有助于更好地了解如何操 作液滴在微结构表面上的固有润湿行为。

倾斜表面上的液滴形态的研究已经有许多报 道,Larkin<sup>[13]</sup>采用有限差分法来模拟光滑斜面上的 液滴形态。后来,更多研究者应用有限元的数值方 法进行模拟,Brown 等人<sup>[14]</sup>采用有限元方法给出了 Young-Laplace 方程的解,他们假定液滴的三相接触 线是固定的且为圆形,求解了固体表面上不同倾角 和不同体积下液滴的形状。Rotenberg 等人<sup>[15]</sup>基于 能量最小原理和有限元的方法来解决倾斜表面上液 滴形态的问题,他们把液滴沿三相界面的接触角变 化作为边界条件,求解液滴形状和动态接触角,并进 行了实验验证。Xu 和 Wang<sup>[16]</sup>则采用了有限差分 法和最小二乘的椭圆拟合算法,系统地研究了斜面 上不同倾角、不同体积的液滴的数值轮廓。之后, Maglio 和 Legendre<sup>[17]</sup>开发了一种流体体积法(volume of fluid, VOF)和相应的 JADIM 软件求解器,从 数值上模拟出斜面上的液滴形状。但是,将 VOF 方 法应用于具有微纳米结构的粗糙表面时,需要对液 滴底部进行精细的网格划分,这是比较繁琐的过程。

上述报道中计算倾斜表面液滴形态时,有的只 考虑了光滑表面,有的提出了三相线或接触角假设, 而本文创新地提出了计算具有微结构的亲水性倾斜 表面上的液滴形态的数值方法。基于能量最小原 理,对液滴和固体表面组成的热力学系统建立数学 模型,数值模拟了不同倾角和不同体积的液滴形态, 并讨论了表面微结构尺寸对液滴形态和前/后向接 触角的影响。同时,以实验结果来验证数值模型。 本文工作可作为一种新的亲水微结构表面设计方 法,应用于微流控芯片中的液滴控制。

① 国家自然科学基金(51875527),传感技术联合国家重点实验室基金(SKT2005)和浙江省自然科学基金(LZ22E050009,GG21E050044) 资助项目。

② 男,1968 生,博士,副教授;研究方向:微纳米机械、微纳米结构表面设计与制造;联系人,E-mail: zjutdj@ zjut. edu. cn。 (收稿日期:2021-04-23)

1 数值模型

### 1.1 模型假设与参数间关系

如图1所示,液滴和倾斜的微结构表面共同组 成了一个热力学系统。固体表面倾斜角为 d. 液滴 形态由于受重力影响,其截面轮廓呈现为前/后不对 称形态,且亲水表面上的液滴始终处于完全润湿的 Wenzel 状态<sup>[18]</sup>。对系统建立球坐标系,液滴与表面 接触面的中心为坐标原点 O, 倾斜表面为 XOY 平 面,z轴垂直于 XOY 平面。定义从原点 O 到液滴外 轮廓上任一点的向量为矢径.用  $r(\beta,\alpha)$  表示。其 中,  $\beta(-\pi \le \beta \le \pi)$  表示从 x 轴的正方向到矢径  $r(\beta, \alpha)$ 在*XOY*平面投影的夹角,  $\alpha(0 \le \alpha \le \pi/2)$ 表示 Z 坐标轴的正半轴与矢径  $r(\beta, \alpha)$  的夹角。图 1中,记Sext为液滴外表面积,Sbase为液滴的表观接 触面积, l 为液滴沿斜面方向的三相接触线长度,靠 近斜面底端液滴前部的接触角为前向接触角 $\theta_1$ ,靠 近斜面顶端液滴后部的接触角为后向接触角 0,。圆 柱微结构的直径、间距和高度分别为d、a、h。该系统 还考虑如下因素:(1)液滴的质量:(2)表面拓扑结 构尺寸和粗糙度:(3)液滴、固体表面和空气三者间 的表面张力;(4)平衡液滴的形状为系统总能量最 小的情况。



图 1 液滴与倾斜微结构表面组成的系统模型

表面粗糙度可以表示为

$$r_{gh} = 1 + \frac{\pi dh}{(a+d)^2}$$
(1)  
液滴体积可表示为

$$V = 2 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} \int_{0}^{r} r^{2} \sin\alpha dr d\alpha d\beta$$
  
522 —

$$= \frac{2}{3} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} r^{3} \sin\alpha d\alpha d\beta$$
(2)

平衡状态下,液滴的半径为

$$R_0 = \left(\frac{3V}{4\pi}\right)^{1/3} \tag{3}$$

液滴的控制边界为

$$r(\beta, \alpha) < r_{\max} = 4R_0 \tag{4}$$

液滴的外表面积为

$$S_{\text{ext}} = 2 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} r \sin\alpha \sqrt{r^{2} + \left(\frac{\partial r}{\partial \alpha}\right)^{2}} \, \mathrm{d}\alpha \mathrm{d}\beta \qquad (5)$$

液滴的表观接触面积为

$$S_{\text{base}} = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} r^2(\beta, \frac{\pi}{2}) \,\mathrm{d}\beta \tag{6}$$

Wenzel 润湿状态下实际固-液接触面积 S<sub>sl</sub> 和固-气接触面积 S<sub>sc</sub> 分别为

$$S_{\rm sl} = r_{\rm gh} S_{\rm base} \tag{7}$$

$$S_{\rm sv} = r_{\rm gh} (L_0^2 - S_{\rm hase}) \tag{8}$$

式中, L<sub>0</sub> 是矩形固体表面的侧边长度。

### 1.2 系统最小相对总能量的推导及计算

由界面理论可知,图1中系统的总能量*E*<sub>w</sub>由重 力势能和界面自由能组成,可表示为

$$E_{\rm w} = E_{\rm a} + E_{\rm b} \tag{9}$$

式中, $E_a$ 为重力势能, $E_b$ 为界面自由能。

重力势能 $E_a$ 为

$$E_{a} = 2 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} \int_{0}^{r} \rho g r^{2} \sin\alpha$$

$$\times \sqrt{(r \sin\alpha \sin\beta)^{2} + (r \cos\alpha)^{2}}$$

$$\times \sin[\operatorname{arccot}(\tan\alpha \sin\beta) + \phi] dr d\alpha d\beta$$
(10)

式中,g为重力加速度。界面自由能 $E_{\rm b}$ 为  $E_{\rm b} = \gamma_{\rm b}S_{\rm b} + \gamma_{\rm b}S_{\rm b} + \gamma_{\rm b}S_{\rm b}$ 

式中, $\gamma_{lv}$ 、 $\gamma_{sv}$ 分别为液-气、固-液、固-气的表面 张力。将式(10)和(11)代入(9),得

$$E_{\rm w} = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} \left\{ \frac{1}{2} \rho g r^4 \sin \alpha \sqrt{(\sin \alpha \sin \beta)^2 + \cos^2 \alpha} \right.$$
$$\times \sin \left[ \arccos(\tan \alpha \sin \beta) + \phi \right]$$
$$+ 2\gamma_{\rm lv} r \sin \alpha \sqrt{r^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial \alpha}\right)^2} \right\} d\alpha d\beta$$

+ 
$$(\gamma_{\rm sl} - \gamma_{\rm sv})r_{\rm gh}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}r^2(\beta, \frac{\pi}{2})\,\mathrm{d}\beta + \gamma_{\rm sv}r_{\rm gh}L_0^2$$
(12)

当液滴的体积和微结构表面尺寸确定时,  $\gamma_{sv}r_{gh}L_0^2$ 为常数,不影响能量最小的判定。根据杨氏 方程,引入光滑表面上平衡接触角 $\theta_e$ ,系统的相对 总能量 $E'_w$ 可以写为

$$E'_{w} = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \left\{ \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} \left\{ \frac{1}{2\gamma_{lv}} \rho g r^{4} \sin\alpha \times \sqrt{(\sin\alpha \sin\beta)^{2} + \cos^{2}\alpha} \right. \\ \left. \times \sin\left[ \arccos(\tan\alpha \sin\beta) + \phi \right] \right. \\ \left. + 2r \sin\alpha \sqrt{r^{2} + \left(\frac{\partial r}{\partial\alpha}\right)^{2}} \right\} d\alpha \\ \left. - \cos\theta_{e} r_{gh} r^{2}(\beta, \frac{\pi}{2}) \right\} d\beta$$
(13)

根据能量最小原理,在重力的作用下,液滴通过 不断改变外部形状和内部浸润状态,并最终趋向系 统能量最小的稳定状态。利用有限差分法和非线性 优化算法,把液滴的接触面积通过变量  $m(\beta)$  的等分 数)离散,以 $n(\alpha$ 的等分数)离散液滴剖面轮廓,得 到液滴形态的离散矢径  $r(\beta_j, \alpha_i), \beta_j = (j-1) \frac{\pi}{m}$  - $\frac{\pi}{2}$ , 其中*j*取1,2,...,*m*+1; $\alpha_i = (i-1)\frac{\pi}{2n}$ , 其中*i* 取1,2,…,n + 1 $_{\circ}r(\beta_i,\alpha_i)$  记为 $r[j,i]_{\circ}$ 系统的相对最小总能量可以写成  $E'_{wmin} = \min E'_{w}$  $= \min \sum_{i=1}^{m+1} \gamma_{\rm lv} \Big\{ -\frac{\pi}{m} \cos\theta_{\rm e} r_{\rm gh} r^2 \Big[ j, \frac{\pi}{2} \Big] \Big\}$ +  $\sum_{i=1}^{n+1} \left\{ \frac{\pi}{4n\gamma_i} \rho g r^4 [j, i] \sin \left[ \frac{\pi}{2n} (i-1) \right] \right\}$  $\sqrt{\sin^2\left[\frac{\pi}{2n}(i-1)\right]\sin^2\left[\frac{\pi}{m}(j-1)-\frac{\pi}{2}\right]}+\cos^2\left[\frac{\pi}{2n}(i-1)\right]}$  $\times \sin\left[\operatorname{arccot}\left(\tan\left[\frac{\pi}{2n}(i-1)\right]\sin\left[\frac{\pi}{m}(j-1)-\frac{\pi}{2}\right]\right)+\phi\right]$  $+\frac{\pi}{n}r[j, i]\sin\left[\frac{\pi}{2n}(i-1)\right]$  $\times \sqrt{r^{2}[j, i] + \frac{4n^{2}[r[j, i+1] - r[j, i]]^{2}}{\pi^{2}}} \right\} (14)$ 式(14)作为优化的目标函数 雲溝足以下约束

$$(1) \ 0 \ < \ r[j, \ i] \ \le 4R_0$$

(2) 
$$V = \frac{2}{3} \sum_{j=1}^{m+1} \sum_{i=1}^{n+1} r^3 [j,i] \sin \left[ \frac{\pi}{2n} (i-1) \right]$$

图 2 为具体的算法流程图。本文基于 Matlab 非线性优化函数 fmincon,在约束条件下不断搜索变 量从而得到目标函数的最小值,迭代计算过程中,为



图 2 系统相对最小能量的算法流程图

减少 fmincon 函数在寻找最优时带来的误差,令前 后两次计算得到的相对最小总能量  $E'_{mnin}$  差值收敛 于 10<sup>-4</sup>。否则,将等分数  $m \ n \ n \ D$ 别乘 2 后再次计 算。最后记录 Wenzel 润湿状态下系统的相对最小 能量  $E'_{mnin}$  和相对应的离散点  $r\langle j, i \rangle$  坐标,将离散 点拟合可得到倾斜表面上液滴的轮廓形态,进一步 可以计算三相接触线长度 l、前向接触角  $\theta_1$  和后向 接触角  $\theta_2$ , 分别为

$$l = r\langle 1, n+1 \rangle + r\langle m+1, n+1 \rangle$$
(15)

$$\theta_{1} = \pi - \arctan \frac{r\langle m+1, n \rangle \sin \frac{\pi}{2n}}{r\langle m+1, n \rangle \cos \frac{\pi}{2n} - r\langle m+1, n+1 \rangle}$$
(16)
$$- 523 -$$

$$\theta_2 = \arctan \frac{r\langle 1, n \rangle \sin \frac{\pi}{2n}}{r\langle 1, n+1 \rangle - r\langle 1, n \rangle \cos \frac{\pi}{2n}} \quad (17)$$

#### 2 实验部分

#### 2.1 微结构亲水表面的制备与表征

采用干法刻蚀工艺中的深反应离子刻蚀技术 (deep reactive ion etching, DRIE) 制备二氧化硅 (SiO<sub>2</sub>)微结构表面,加工衬底材料选择4 in "n"型 (100) 硅片。首先, 在硅片上旋涂 AZ4620 光刻胶, 并将周期性圆柱微结构的直径 d 和间距 a 的图案复 制到光刻胶上进行光刻。然后,针对圆形微结构的 高度 h,采用 DRIE 工艺进行刻蚀。最后,通过湿法 热氧化处理,在抛光的单晶硅表面生长一层 500 nm 厚的 SiO, 从而完成制备。如图 3 所示, 通过场发 射扫描电子显微镜(FESEM, Zeiss Sigma 300, Germany)测量SiO,微结构表面的形貌,制备出的SiO,微 结构基本参数为  $d = 6 \mu m$ 、 $h = 12 \mu m$  和 a = 60 $\mu m_{\circ}$ 



图 3 微圆柱结构表面的扫描电子显微镜图片及基本尺寸

#### 2.2 实验仪器及方法

实验装置如图4所示。实验仪器主要有东莞晟 鼎精密仪器有限公司 SDC-80 型接触角测量仪,合 肥富煌君达高科信息技术有限公司生产的千眼狼 2F01M型高速摄像机。

将样品台调整至水平,在注射器中加入足量去 离子水,保持室温在 20 ℃;把 SiO, 微结构表面放置 样品台中央;启动 2F01M 高速摄像机软件,并设置 参数,打开系统的 LED 背光源;手动调整倾斜台,使 表面固定在设定倾角(0°~60°),调整镜头的放大 倍数和光源的亮度,使进样针头清晰地出现在图像 采集界面;采用躺滴法,用注射器将一定体积的去离 子水滴定在 SiO, 微结构表面;利用高速摄像机的高 — 524 —

速捕捉模式记录斜面上液滴初始的形貌,并利用接 触角分析软件测量前/后向接触角( $\theta_1$ 、 $\theta_2$ )以及液 滴参数(高度  $h_a$ 、三相接触线长度 l)。



图 4

#### 结果与讨论 3

#### 3.1 平衡接触角

SiO, 是一种亲水材料, 通过 SDC-80 接触角测 量仪测得其光滑表面上水的平衡接触角仅为65.35 ±1.6°,如图 5(a)所示。表面通过构筑周期性圆 柱微结构后变得更加亲水,其水平的平衡接触角为 63.93 ±0.54°,如图 5(b)所示。



### 3.2 表面倾角对液滴形态的影响

本文对体积 V = 40  $\mu$ l 的液滴计算了不同倾角 下 SiO<sub>2</sub> 微结构表面上液滴形态,并与实验结果对 比。液滴密度  $\rho = 998.2 \text{ kg/m}^2$ ,液-气表面张力  $\gamma_{lr}$ =72.8 mN/m,重力加速度g =9.8 m/s<sup>2</sup>,光滑 SiO, 表面上的水接触角  $\theta_{\mu} = 65.35^{\circ}$ 。

图 6 展示了倾斜角 o 为 4°、8°、12°、16°、24°、 32°时,SiO,微结构表面上的液滴形态的数值模拟 与实际液滴的分布差异。由图发现,由模型拟合出 的液滴形态的剖面轮廓线(虚线)与实际拍摄的液 滴形貌吻合较好,且液滴呈现为前/后非对称的形



图 6 不同倾角下 SiO<sub>2</sub> 微结构表面上液滴形态

状。随着倾角的增大,液滴变形更加剧烈,液滴的前 端轮廓变得"饱满",而后端轮廓变得更加"扁平", 液滴沿斜面方向的三相接触线长度和高度增加。

表1给出了数值模型与实验得出的前/后向接 触角的差异。结果表明,前向接触角最大误差仅为 3.4°,而后向接触角的最大误差仅为 3.2°,且随着 倾角的增加,前向接触角增加,后向接触角减小。本 文提出的模型可以很好地预测不同倾斜角度的亲水 表面上液滴的轮廓形态,为进一步的理论分析和实 际应用奠定了基础。

| 表 1 | 表面倾角对液滴前/后接触角的影响 |
|-----|------------------|
|     |                  |

| 斜面倾角            | 数值模拟                      |                    | 实验                 | 测量                    |
|-----------------|---------------------------|--------------------|--------------------|-----------------------|
| $\phi/^{\circ}$ | $\theta_1 \nearrow^\circ$ | $\theta_2 / \circ$ | $\theta_1 / \circ$ | $\theta_2 / ^{\circ}$ |
| 4               | 63.28                     | 62.23              | 65.41              | 63.4                  |
| 8               | 63.71                     | 60.88              | 67.07              | 61.77                 |
| 12              | 64.85                     | 58.74              | 67.25              | 55.46                 |
| 16              | 66.36                     | 56.62              | 67.90              | 54.61                 |
| 24              | 69.79                     | 52.50              | 68.71              | 52.35                 |
| 32              | 73.26                     | 48.60              | 72.95              | 46.70                 |

## 3.3 液滴体积对形态的影响

保持表面材料、微结构形状及尺寸以及倾斜角 度不变,仅改变液滴体积,计算斜面上不同体积的液 滴形态以及前/后接触角参数。设定表面倾斜角度 φ为24°,液滴体积分别取10μl、20μl、30μl、40μl、 50μl、60μl。图7表示液滴体积对其形态的影响。





如图 7(a)所示,随着液滴体积的增大,沿斜面方向的分力增加,在重力作用下,液滴形态向斜面底端延

伸加剧,液滴三相接触线长度和高度均增大,液滴形 态参数的数值解与实际轮廓值基本吻合,在50μ 时有最大误差,误差仅为0.6 mm。图7(b)描述了 液滴体积对前/后向接触角的影响。由图7(b)可 知,倾斜角度一定时,体积与前向接触角成正比,与 后向接触角成反比。将实验值与数值解比较可知, 前向接触角最大误差为7.8°,而后向接触角的最大 误差仅为3.7°。

### 3.4 微结构尺寸对液滴形态的影响

保持表面圆柱微结构的直径  $d = 6 \mu m$  不变, 仅 改变微结构间距 a 和高度 h, 研究不同的相对间距 a/d 和相对高度 h/d 对液滴形态以及前/后向接触 角的影响。液滴体积  $V = 40 \mu l$ ,表面倾角  $\phi = 24^\circ$ 。

如图 8 所示,表面微结构的相对尺寸对前向接 触角  $\theta_1$ 、后向接触角  $\theta_2$  和液滴高度  $h_a$  的影响趋势 相同,而对三相接触线长度 l 的影响趋势相反。当 相对高度较小和相对间距较大时,固-液接触面积分 数和表面粗糙度均较小,此时,液滴沿斜面方向的三 相接触线长度较短,液滴高度较大,前/后向接触角 也有较大值,这说明液滴前/后端形态较"饱满"。 当相对高度取值较大,相对间距取值较小时,固-液 接触面积分数和表面粗糙度均较大,液滴的三相接 触线长度达到最大值,高度为最小值,其后向接触角 接近于 0°,说明该尺度范围内的表面浸润性最好, 为超亲水表面,液滴形态近似为薄膜状黏附于斜面 上,同时也说明,表面粗糙度越大,粗糙表面的亲水 性越强,这和 Wenzel 方程以及实验观察结果都是吻 合的。

# 4 结论

本文基于能量最小原理,建立了亲水性微结构 倾斜表面上固-液-气三相系统的数学模型,采用有 限差分法和非线性优化算法,对不同斜面上的液滴 形态进行数值模拟。在亲水微结构倾斜表面上,液 滴侧面轮廓不再具有对称性,表面倾角和液滴体积 越大,重力对液滴的影响越大,形变越明显,液滴前 端轮廓变得更加"饱满",而后端轮廓变得"扁平", 液滴的三相接触线长度和高度增加,前/后向接触角 之间差值不断增加。随着相对间距的减小和相对高 — 526 —



度的增加,倾斜微结构表面的粗糙度值越大,表面润湿性越好,即越亲水;液滴三相接触线的长度也越大,高度越小。该研究有望指导设计合理的亲水表面,或应用于微流控芯片中液滴的控制。

#### 参考文献

[1] LIN H, ZHOU H P, XU L Y, et al. Effect of surfactant concentration on the spreading properties of pesticide droplets on Eucalyptus leaves [J]. *Biosystems Engineering*, 2016, 143:42-49

- [2]周召路,曹冲,曹立冬,等.不同类型界面液滴蒸发特性与农药利用效果研究进展[J].农药学学报,2017,19
   (1):9-17
- [3] 陈青,仓业峥,张健,等.农药液滴在植物枝叶表面润湿 特性研究进展[J].中国农机化学报,2020,41(10):35-40
- [4] 徐象国, 詹思成, 梁灏彬, 等. 空调换热器表面排水性能 计算模型、整体影响及改进方法综述[J]. 机械工程学 报, 2017, 53(4):122-133
- [5] AHN H S, KIM K M, SUN T L, et al. Anti-fouling performance of Chevron plate heat exchanger by the surface modification [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 144:118634
- [ 6] YANG J X, ZHENG F, DERBY B. Stability of lines with zero receding contact angle produced by inkjet printing at small drop volume [J]. *Langmuir*, 2021,37(1):26-34
- [7] ZHENG J G, CHENG Y, HUANG Y Z, et al. Drop impacting on a surface with adjustable wettability based on the dielectrowetting effect [J]. *Physics of Fluids*, 2020, 32(9):097108
- [8] HE B, YANG S, QIN Z, et al. The roles of wettability and surface tension in droplet formation during inkjet printing[J]. Scientific Reports, 2017, 7(1):11841
- [9] 刘赵森,杨洋,杜宇,等.微流控液滴技术及其应用的研究进展[J].分析化学,2017,45(2):282-296
- [10] DONG J, JIN Y L, DONG H, et al. Numerical study for a large-volume droplet on the dual-rough surface: apparent contact angle, contact angle hysteresis, and transition barrier[J]. *Langmuir*, 2018, 34(27): 8119-8127

- [11] BIO CANIN M, BUES J, DAINESE R, et al. Simplified drop-seq workflow with minimized bead loss using a bead capture and processing microfluidic chip [J]. Lab on a Chip, 2019, 19(9):1610-1620
- [12]何浩延,黄恩奇,黎柱均,等. 微流控芯片液滴数字化分析用于快速定量检测细菌[J].分析化学,2020,48
   (7):855-862
- [13] LARKIN B K. Numerical solution of the equation of capillarity [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1967, 23(3): 305-312
- BROWN R A, ORR F M, SCRIVEN L E. Static drop on an inclined plate: analysis by the finite element method
   J. Journal of Colloid and Interface Science, 1980, 73 (1): 76-87
- [15] ROTENBERG Y, BORUVKA L, NEUMANN A W. The shape of nonaxisymmetric drops on inclined planar surfaces[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1984, 102(2): 424-434
- [16] XU Z N, WANG S Y. A highly accurate dynamic contact angle algorithm for drops on inclined surface based on ellipse-fitting[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2015, 86(2):065105
- [17] MAGLIO M, LEGENDRE D. Numerical simulation of sliding drops on an inclined solid surface [M] // Computational and Experimental Fluid Mechanics with Applications to Physics, Engineering and the Environment, Cham: Springer, 2014:47-69
- [18] 江雷, 冯琳. 仿生智能纳米界面材料[M]. 北京:化学 工业出版社, 2007: 96-99

# Numerical simulation of droplet shape on hydrophilic microstructure inclined surface

DONG Jian<sup>\*\*\*</sup>, HU Guanghui<sup>\*</sup>, GUO Youhai<sup>\*</sup>, BIAN Yinbo<sup>\*</sup>, ZHAO Yiping<sup>\*</sup>, LI Zhixin<sup>\*</sup> (<sup>\*</sup>College of Mechanical Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310023) (<sup>\*\*</sup>State Key Laboratory of Transducer Technology, Shanghai 200050)

#### Abstract

Based on the principle of minimum energy, this paper establishes a mathematical model of droplets on the inclined surface of hydrophilic microstructures in the gravitational field. When the total energy of the system reaches the minimum value, the droplet reaches the final equilibrium state. Finite difference method and nonlinear optimization algorithm are used to numerically simulate the droplet shape on the inclined surface. The effects of surface inclination, droplet volume and microstructure size on droplet morphology are discussed, and the numerical results are verified by experimental results. The results show that the increase of inclination angle and droplet volume will increase the forward contact angle of the droplet, reduce the backward contact angle, and increase the length of the three-phase contact line and the height of the droplet. When the relative height of the microstructures is large and the relative spacing is small, the surface shows a tendency of super-hydrophilicity. In this situation, the length of the three-phase line of the droplet is long and the height of the droplet is low. This research is promising to guide the design of a reasonable hydrophilic surface, or be applied to the control of droplets in a microfluidic chip.

Key words: droplet shape, inclined surface, microstructure, hydrophilic, principle of minimum energy