

R32/R1234ze(E)界面冷凝的分子动力学研究

邓欣欣¹, 杨利², 吴闯¹, 刘朝¹

(1. 重庆大学能源与动力工程学院, 400030, 重庆; 2. 西安热工研究院有限公司, 710054, 西安)

摘要: 采用分子动力学模拟方法研究了 R32/R1234ze(E) 混合工质在金属壁面上的冷凝行为, 分析了 5 种质量分数对混合工质传热性能和冷凝行为的影响机制, 从传热热阻、空间分布和分子间作用力的角度, 对比了不同质量分数的混合工质冷凝行为。结果表明: 在 5 种不同 R32 质量分数的混合工质体系中, 混合工质的冷凝率随着 R32 含量的降低而降低; 在模拟初期的混合工质液膜中, R32 的冷凝量大于 R1234ze(E) 的冷凝量; 在相同质量的情况下, R32 含量越高的体系, 其凝结时放出的热量更大; 在固液界面处, 纯 R1234ze(E) 体系的密度峰值最大, 固体表面对 R1234ze(E) 分子的作用力强于 R32; 混合工质中 R1234ze(E) 含量越高的体系, 其固液界面的温度跳跃越小, 但气液相界面的温度跳跃越大。热阻分析的结果表明, 总热阻随着混合工质中 R32 含量的降低而增加, 其中不同质量比体系中的固液界面热阻随 R32 含量的降低而降低, 而液体热阻和气液相界面的热阻则随着混合工质中 R32 含量的减小而增大, 气液相界面热阻占总热阻的主要部分是总热阻有较大差异的主要原因。

关键词: 混合工质; R32; R1234ze(E); 冷凝; 分子动力学

中图分类号: TK124 **文献标志码:** A

DOI: 10.7652/xjtub202203017 **文章编号:** 0253-987X(2022)03-0173-07



OSID 码

Molecular Dynamics Study on the Condensation at the R32/R1234ze(E) Interface

DENG Xinxin¹, YANG Li², WU Chuang¹, LIU Chao¹

(1. School of Energy and Power Engineering, Chongqing University, Chongqing 400030, China;

2. Xi'an TPRI Energy Conservation Technology Co. Ltd., Xi'an 710054, China)

Abstract: The condensation process of R32/R1234ze(E) mixture on metal wall was studied by molecular dynamics simulation method. The influence mechanism of five kinds of mixing mass fraction on the heat transfer performance and condensation behaviors of the mixed working fluids was analyzed. The condensation behaviors of the mixed working fluids with different mass fraction were compared from the perspectives of heat transfer resistance, spatial distribution and intermolecular forces. The results show that the condensation rate of the mixed working fluids decreases with the decrease of R32 mass fraction. The condensation amount of R32 is greater than that of R1234ze(E) in the working fluid mixture film at the beginning of the simulation. The higher the R32 mass fraction is, the more the heat is released during condensation process. At the solid-liquid interface, the density peak of the pure R1234ze(E) system is the highest, and the

收稿日期: 2021-07-23。 作者简介: 邓欣欣(1996—),男,硕士生;吴闯(通信作者),男,讲师。 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51876015);中国博士后科学基金资助项目(2021M693714);重庆市博士后科学基金资助项目(cstc2020jcyj-bshX0073)。

网络出版时间: 2021-10-26

网络出版地址: <http://kns.cnki.net/kcms/detail/61.1069.T.20211022.1714.005.html>

attraction of solid surface for R1234ze(E) molecule is stronger than that for R32. The higher the content of R1234ze(E) in the working fluid mixture, the smaller the temperature jump at the solid-liquid interface, but it is larger at the gas-liquid interface. The results of thermal resistance analysis show that the total thermal resistance increases with the decrease of R32 content in the working fluid mixture. The thermal resistance of solid-liquid interface decreases with the decrease of R32 content in the systems with different R32 mass fraction. The thermal resistances of the liquid and the gas-liquid interface all increase with the decrease of R32 content in the mixture. The thermal resistance at gas-liquid interface is the main part of the total thermal resistance, which is the main cause of the great difference in the total thermal resistance.

Keywords: mixed working fluids; R32; R1234ze(E); condensation; molecular dynamics

氢氟烯烃类(HFOs)工质是具有广泛应用前景的一类工质^[1-2]。这类工质的消耗臭氧潜能值(ODP)为零,全球变暖潜能值(GWP)极低。凭借氢氟烯烃类工质环境友好性,其在有机朗肯循环^[3],制冷循环等热力学循环中已经有所应用。但是,与上一代氢氟烃(HFCs)类工质相比,HFOs工质的热力学性能较差,其潜热值和导热系数偏低。目前,比较好的解决方案就是将HFCs工质与HFOs工质混合,形成HFCs/HFOs混合工质,这类混合工质兼具环保性能和热力学性能。工质的热物性是热力循环性能的关键基础^[4],新工质要应用到循环中去,需要先对其热物性进行研究,因此研究HFCs/HFOs混合工质在表面的传质传热机理显得尤为重要^[5]。

工质冷凝是诸多热力学循环中的一个关键过程,然而由于HFOs的沸点低,很难通过实验观察到混合比例对混合工质在壁面上冷凝的影响机制。随着计算机技术的发展,分子动力学(MD)模拟方法已经被证明是揭示简单流体界面冷凝机理的有力工具^[6-10]。He等利用MD方法研究氩在固体表面上的冷凝行为,结果表明蒸气与壁面的温差越大,凝结驱动力越大,质量通量也越大^[6]。Ranathunga等模拟分析了表面润湿性对水分子冷凝的影响,模拟结果表明表面疏水性的降低会显著增加水分子与表面之间的相互作用力,从而增加水的凝结速率^[11]。

然而,HFCs/HFOs的分子结构比简单流体的结构要复杂得多,且不同比例的混合工质有不同的热物性^[12],所以简单流体的冷凝机制不足以解释HFCs/HFOs混合工质的冷凝行为。Liu等模拟并讨论了冷凝温度、压力等因素对R1234yf等HFOs工质的冷凝速率的影响^[13]。Alam等用MD方法模拟了R1123/R134a混合工质的均质成核行为^[14]。但是,关于HFCs/HFOs混合工质在壁面上的冷凝行为以及混合比例对冷凝行为的影响机制鲜有报

道,因此本文采用分子动力学模拟方法,通过改变混合工质的组成,以研究不同R32质量分数对混合有机工质界面冷凝行为的影响。

1 模拟细节

1.1 模型细节

如图1所示,模拟体系在 x 、 y 和 z 三个方向上的长度分别为10.84、10.84和27.6 nm,且体系在 x 和 y 方向应用周期性边界条件, z 方向应用非周期性边界条件,顶部边界设有反弹墙。模拟盒由壁面和有机工质蒸气组成,其中壁面含有27 000个铜原子,厚度为2.71 nm。同时,壁面由下到上可分成固定层、控温层和导热层^[15]。固定层可以防止壁面的漂移,控温层则用于控制壁面的温度,而传热层能将吸收有机工质蒸气的热量。有机工质气体由R32/R1234ze(E)组成。本文采用了5种不同R32质量分数的混合有机工质体系,不同混合体系的总质量相等,具体组成如表1所示。

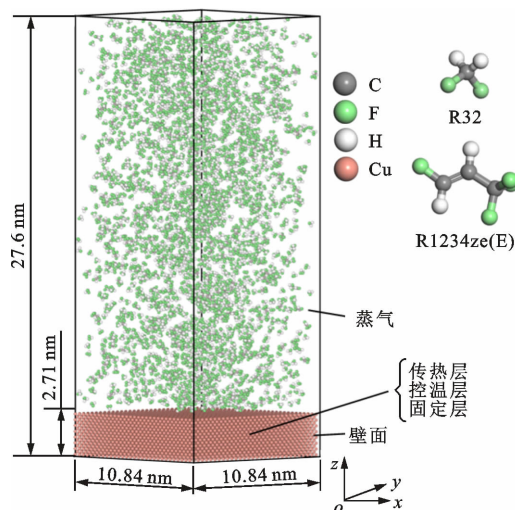


图1 初始模型图

Fig. 1 Initial simulation model

表1 混合工质体系分子数

Table 1 Number of molecules in the mixed working fluids systems

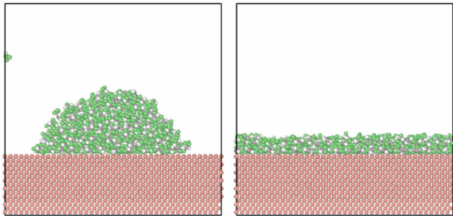
工质	分子数				
	纯	67%	50%	33%	纯
	R32	R32	R32	R32	R1234ze(E)
R32	3 288	2 192	1 644	1 096	0
R1234ze(E)	0	500	750	1 000	1 500

1.2 势能模型

势能模型是分子动力学模拟的关键。本文采用 Rabbe 等提出的氢氟烯烃势能模型和势函数参数来描述有机工质 R32/R1234ze(E) 的相互作用^[16-17], 该模型已经被广泛应用到有机工质热物性研究中^[18-21]

$$U = \sum_b k_b (b - b_0)^2 + \sum_\theta k_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum_\chi k_\chi [1 + \cos(n\chi - \delta)] + \sum_i \sum_{j>i} \left\{ 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \right\} \quad (1)$$

式中: b 、 θ 和 χ 分别代表键长、键角和二面角; r_{ij} 为原子*i*和*j*之间的距离; q_i/q_j 为原子的电荷; ϵ_0 为介电常数; ϵ_{ij} 和 σ_{ij} 分别表示势阱深度和原子间势能为0的距离。利用 Lennard-Jones 势(LJ 12-6)描述铜-铜和铜-流体之间的相互作用^[22]。铜原子所采用的 LJ 参数为 $\epsilon_{Cu} = 0.409\ 4\ \text{eV}$, $\sigma_{Cu} = 0.023\ 38\ \text{nm}$ 。采用 Lorentz-Berthelot 法则计算固体和流体之间的相互作用参数 $\epsilon_{sf} = \alpha \sqrt{\epsilon_s \epsilon_f}$, 其中 α 为固液相互作用系数,通过改变 α ,可以改变固体和流体的相互作用强度,从而实现润湿性的调控。图 2 所示为 R1234ze(E)在不同固液相互作用系数下的润湿行为,R1234ze(E)液滴在 α 为 0.5 时完全铺展,所以在此固液相互作用系数下,壁面表现为亲液表面。以往的研究表明,亲液表面可以促进固液间的能量



(a) $\alpha=0.1$ (b) $\alpha=0.5$

图2 不同固-液相互作用系数时的润湿行为
Fig. 2 Wetting behaviors at different solid-liquid interaction coefficients

传递^[23],因此在本文中 α 取0.5。

1.3 模拟过程

本研究采用 LAMMPS^[24] 模拟 R32/R1234ze(E)混合工质在亲液表面上的凝结相变行为,并分析不同质量比对冷凝过程的影响。模拟过程可以分成平衡过程和冷凝过程两个阶段。在平衡过程中,采用 NVT 系综(原子数、体积和温度为定值)和 Nose-Hoover 恒温器^[25]将整个体系温度控制在 350 K,模拟时间为 1 ns,且将 α 设为 0.05,以减少平衡过程中壁面对混合工质气体的影响;在冷凝模拟过程中,撤掉整体热浴,对整个体系采用 NVE 系综(原子数、体积和能量为定值), α 设为 0.5,使表面为亲液表面,促进能量传递,同时采用 Langevin 热浴^[26]将温度控制层的温度降至 200 K 以触发冷凝,模拟时间为 1 ns。每10 000步输出和存储一次原子信息,每50 000步对粒子信息进行平均。在整个模拟过程中,所采用的时间步长和截断半径分别为 1 fs 和 1.2 nm。利用 PPPM 方法^[27]计算长程库仑相互作用,精度为 10^{-4} 。

2 结果与讨论

2.1 密度验证

为了保证计算模型的准确性,首先计算了混合工质在 200 K、1 MPa 工况下的液体密度,并将模拟结果与 REFPROP 中的数据进行对比。图 3 所示为混合工质液态密度模拟结果与 REFPROP 数据的对比情况,结果表明两者的相对误差在 1.8% 以内,说明计算模型是可靠的。

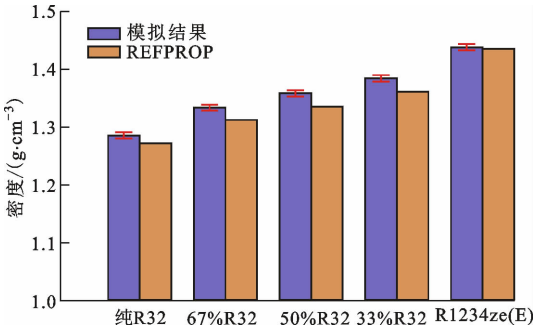


图3 混合工质液态密度模拟结果与 REFPROP 数据对比
Fig. 3 Comparison between simulation results of liquid density of mixed working fluids and REFPROP data

2.2 冷凝过程

当冷凝过程开始时,壁面温度降至 200 K,而混合工质的温度为 350 K,因此热量会从工质传至壁面。以 R32 质量分数为 50% 的混合工质体系为例,

当壁面温度降低后,高温的工质蒸气接触到壁面温度就会降低,从而凝结在壁面之上形成液膜,如图4所示。随着模拟的进行,凝结而成的液膜越来越厚,直到工质蒸气几乎被完全消耗。

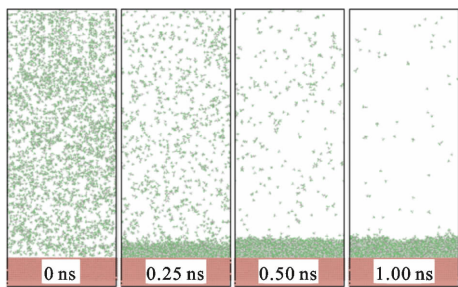


图4 混合工质界面冷凝模拟快照

Fig. 4 Simulation snapshots of condensation process

文献[28]表明液态氢氟烯烃的分子间距为0.55 nm左右,因此当分子间距小于0.55 nm时,可以认为该分子处于液态。图5所示为不同混合工质的冷凝率随时间的变化情况。本文冷凝率定义为液相工质分子数与工质总分子数之比。由图5可以看出,在模拟初期冷凝率迅速上升。这是因为此时的温度梯度较大,冷凝的驱动力也较大。当模拟进行到0.25 ns时,冷凝率的斜率开始减小,因为此时壁上已经形成了较厚的液膜,冷凝过程受到抑制,所以冷凝的速率开始减小。当模拟时间到0.5 ns之后,蒸气分子几乎被消耗殆尽,所以冷凝率的斜率慢慢减小。另一方面,值得注意的是,在5种不同R32质量分数的体系中,R32含量越高的体系冷凝率越大,R32的存在促进了R1234ze(E)的冷凝。图6所示为混合工质液膜的组分随模拟时间的变化趋势,可以看出在模拟初期,液膜中R32的含量大于初始模型中的R32含量,说明此时混合工质液膜中R32的冷凝量大于R1234ze(E)的冷凝量。随模拟的进行,两者的质量比值逐渐趋于初始模型中的质量比。

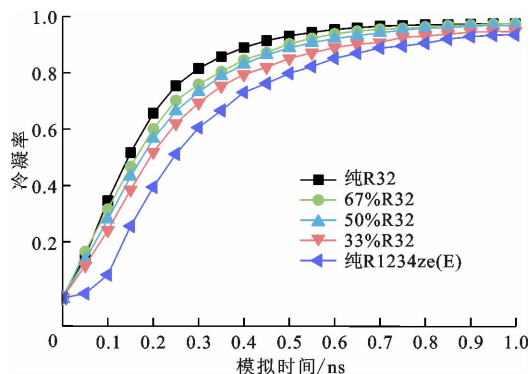


图5 工质冷凝率随模拟时间的变化

Fig. 5 Variation of condensation rate with simulation time

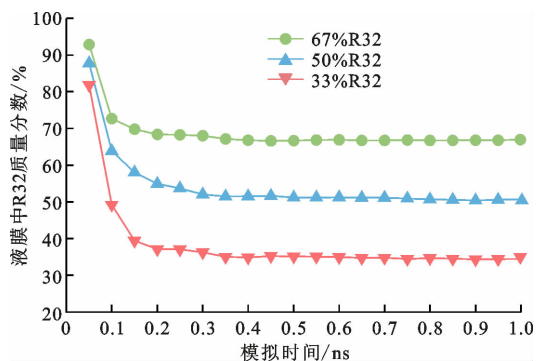


图6 混合工质液膜组分随模拟时间的变化

Fig. 6 Variation of liquid film components with simulation time

在冷凝过程中,采用 Langevin 热浴法对控温层进行温度控制,可以统计得到控温层所累积的能量,而这部分能量来自于传热层和混合工质蒸气。因此,控温层的累积能量减去壁面由于降温导致的能量减小量即为壁面与混合工质之间的热交换量。图7显示了壁面吸热量随模拟时间的变化情况,可以看出吸热量的变化趋势和冷凝率的变化趋势类似。在模拟的初期,吸热量迅速增加,随着混合工质蒸气分子的不断消耗,吸热量增加的速率开始慢慢减小。另一方面,由图7可知,对于相同质量的5种混合工质体系,R32含量越高的体系,凝结时放出的热量更多。

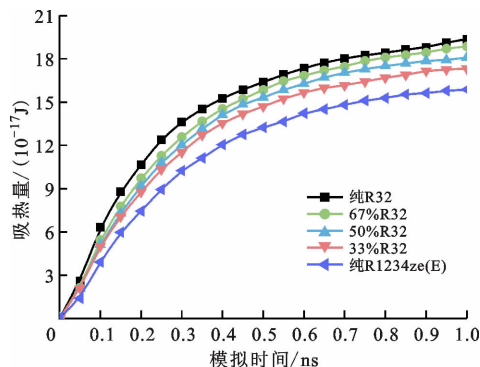


图7 壁面吸热量随模拟时间的变化

Fig. 7 Variation of heat absorption with simulation time

图8所示为不同混合工质的温度随时间的变化情况。由图可知,在0.2 ns之前,混合工质的温度迅速下降,且不同体系的温度变化相差不大,而在0.2 ns之后,各体系温度下降的速率开始变慢,且R32含量越高的体系,最终温度越高。根据图4和图5,在这个阶段,壁上已经聚集了较厚的液膜,蒸气分子也比较少,所以此时的热量传递过程主要发生在固液界面和液膜内部。因此,这一现象可能

和固液界面热阻和液体的导热热阻有关。

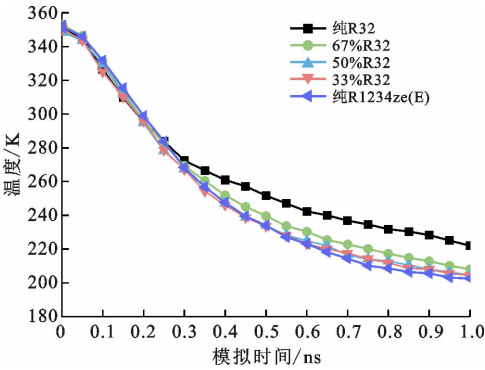


图 8 工质温度随模拟时间的变化
Fig. 8 Variation of liquid film temperature with simulation time

2.3 热阻分析

界面热阻是影响换热过程的重要因素,尤其是在界面相变过程中,存在固体-液体界面和液体-气体界面,因此本节主要对整个换热过程中的各部分热阻进行分析。对于所研究的换热体系,传热层的导热热阻可以忽略不计,因此总热阻可分成固-液界面热阻、液体导热热阻、气-液相界面热阻。总热阻和各部分热阻可由下列公式得到

R_{tot} = (T_S - T_V)/q'' = R_{SL} + R_L + R_{LV} \tag{2}

R_{SL} = (T_S - T_{SL})/q'' \tag{3}

R_L = (T_{SL} - T_{LV})/q'' \tag{4}

R_{LV} = (T_{LV} - T_V)/q'' \tag{5}

式中:R_{tot}为总热阻;q''为热流密度,可由图 7 中吸热量的斜率得到;T_S 和 T_V 分别为固体表面温度和蒸气温度;R_{SL} 和 T_{SL} 分别为固-液界面热阻和固-液界面的液体温度;R_L、T_{LV} 和 T_{LV} 分别代表液体导热热阻、气-液相界面的液体温度以及气-液相界面热阻。各部分温度可通过模拟体系在 z 方向的一维温度分布得到。

为了分析各界面热阻对传热过程的影响,选取模拟中期 0.5 ns 这一时间点进行分析。图 9 所示为体系在 z 方向的温度分布情况。由图可知,在固-液界面和气-液相界面均存在温度跳跃,其中在固-液界面(3 nm 左右),R32 含量越大的混合体系温度跳跃越大。从图 10 中可以看出,混合工质在固-液界面存在密度峰值,且该密度峰值随着 R32 含量的减小而增大。由此可推测,固体表面对 R1234ze(E) 分子的作用力强于 R32,而在气-液相界面(4.6~5.0 nm 左右),存在与固-液界面相反的情况,R32 含量越大的混合体系温度跳跃越小且密度更大。

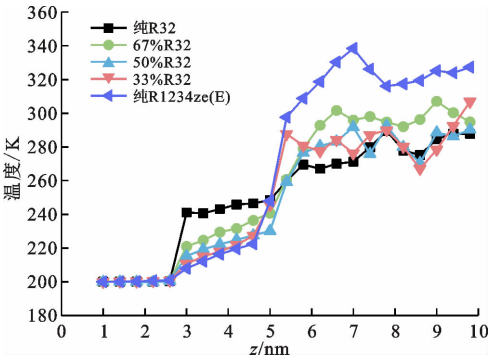


图 9 混合工质在 z 方向的温度分布
Fig. 9 Temperature distributions of five systems in z-direction

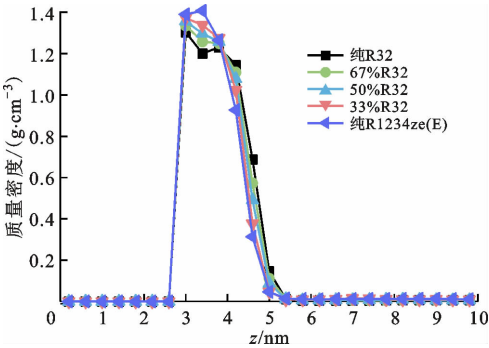


图 10 混合工质在 z 方向的密度分布
Fig. 10 Density distributions of the mixed working fluids in z-direction

根据式(2)~(5),得到如图 11 所示的总热阻和各热阻分布情况。由图可知,5 种工质体系的总热阻从小到大的顺序为纯 R32、67% R32、50% R32、33% R32、纯 R1234ze(E),即 R32 的含量越高,总热阻越小,而固-液界面热阻随着 R32 含量的减小而减小,液体的导热热阻整体上随着 R32 含量的减小而升高,因为 R32 的液体导热系数大于 R1234ze(E)。值得注意的是,混合工质气-液相界

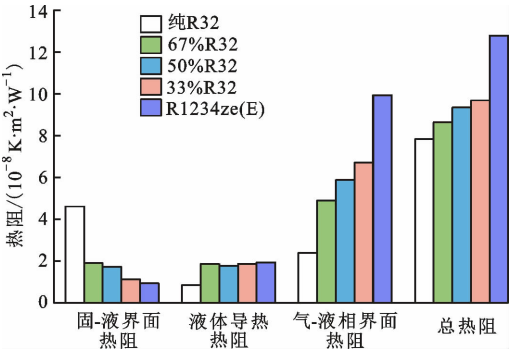


图 11 混合工质的总热阻和各热阻分布
Fig. 11 Total thermal resistance and the thermal resistance of each part

面的热阻占总热阻的主要部分,并且气-液相界面热阻随着混合工质中 R32 含量的减小而增大。这说明在不同混合工质体系中,气-液相界面热阻的差异导致了体系总热阻的较大差异。

3 结 论

本文通过分子动力学模拟方法研究了 R32/R1234ze(E)混合工质在固体表面上的冷凝过程,分析了不同 R32 质量分数对混合工质冷凝行为的影响。从冷凝率、吸热量、温度分布和热阻等方面进行了详细讨论,得到如下主要结论。

(1)在 5 种不同 R32 质量分数的混合工质体系中,纯 R32 体系的冷凝速度最快,冷凝率最大,且混合工质的冷凝率随着 R32 含量的降低而降低。

(2)纯 R1234ze(E)在固-液界面的密度峰值最大,且 R1234ze(E)含量越高的体系,固-液界面的温度跳跃越小,但气-液相界面的温度跳跃越大。

(3)5 种混合工质体系的总热阻从小到大的顺序为纯 R32、67% R32、50% R32、33% R32、纯 R1234ze(E)。气-液相界面的热阻占总热阻的主要部分,是总热阻有较大差异的原因,并且其随着混合工质中 R32 含量的减小而增大。

参考文献:

- [1] INVERNIZZI C M, IORA P, PREIßINGER M, et al. HFOs as substitute for R-134a as working fluids in ORC power plants: a thermodynamic assessment and thermal stability analysis [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2016, 103: 790-797.
- [2] WANG Chichuan. An overview for the heat transfer performance of HFO-1234yf [J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2013, 19: 444-453.
- [3] QUOILIN S, DECLAYE S, TCHANKE B F, et al. Thermo-economic optimization of waste heat recovery Organic Rankine Cycles [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2011, 31(14/15): 2885-2893.
- [4] ZHANG Cheng, LIU Chao, XU Xiaoxiao, et al. Effects of superheat and internal heat exchanger on thermo-economic performance of organic Rankine cycle based on fluid type and heat sources [J]. *Energy*, 2018, 159: 482-495.
- [5] CAI Shouyin, LI Qibin, LIU Chao, et al. Evaporation of R32/R152a mixtures on the Pt surface: a molecular dynamics study [J]. *International Journal of Refrigeration*, 2020, 113: 156-163.
- [6] HE Yaling, SUN Jie, LI Yinshi, et al. A molecular dynamics study on growth of condensation film on a solid surface [J]. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 2009, 9(3/5): 262-268.
- [7] SHENG Qiang, SUN Jie, WANG Qian, et al. On the onset of surface condensation: formation and transition mechanisms of condensation mode [J]. *Scientific Reports*, 2016, 6: 30764.
- [8] XU Bo, CHEN Zhenqian. Condensation on composite V-shaped surface with different gravity in nanoscale [J]. *Microgravity Science and Technology*, 2019, 31(5): 603-613.
- [9] LI Qibin, XIAO Yitian, SHI Xiaoyang, et al. Rapid evaporation of water on graphene/graphene-oxide: a molecular dynamics study [J]. *Nanomaterials*, 2017, 7(9): 265.
- [10] ZHOU Yingjie, LI Qibin, WANG Qiang. Energy storage analysis of UIO-66 and water mixed nanofluids: an experimental and theoretical study [J]. *Energies*, 2019, 12(13): 2521.
- [11] RANATHUNGA D T S, SHAMIR A, DAI Xianming, et al. Molecular dynamics simulations of water condensation on surfaces with tunable wettability [J]. *Langmuir*, 2020, 36(26): 7383-7391.
- [12] 陈晓雪, 刘朝, 李期斌, 等. 混合工质 (R227ea/R245fa) 有机朗肯循环的动态特性研究 [J]. *工程热物理学报*, 2020, 41(7): 1604-1611.
- CHEN Xiaoxue, LIU Chao, LI Qibin, et al. Dynamic study of organic Rankine cycle using mixtures (R227ea/R245fa) as working fluid [J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2020, 41(7): 1604-1611.
- [13] LIU Xiangyang, WANG Tao, HE Maogang. Investigation on the condensation process of HFO refrigerants by molecular dynamics simulation [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2019, 288: 111034.
- [14] ALAM M S, JEONG J H. Molecular dynamics simulations of homogeneous condensation and thermophysical properties of HFO1123 and its binary blends with HFC134a at 273.15 K to 298.15 K [J]. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2021, 35(5): 2247-2258.
- [15] 李期斌, 唐启忠, 刘朝, 等. 铜/金纳米涂层在温度梯度下的分子动力学模拟 [J]. *工程热物理学报*, 2016, 37(3): 466-470.
- LI Qibin, TANG Qizhong, LIU Chao, et al. Properties of Cu/Au thin films under temperature gradient: a molecular dynamics study [J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2016, 37(3): 466-470.
- [16] RAABE G, MAGINN E J. A force field for 3, 3, 3-

- fluoro-1-propenes, including HFO-1234yf [J]. *Journal of Physical Chemistry: B*, 2010, 114(31): 10133-10142.
- [17] RAABE G. Molecular simulation studies in hydrofluoroolefine (HFO) working fluids and their blends [J]. *Science and Technology for the Built Environment*, 2016, 22(8): 1077-1089.
- [18] DI Jiawei, YANG Zhen, DUAN Yuanyuan. Molecular dynamics simulation on spreading of mixture nanodroplets on a smooth and homogeneous surface [J]. *AIP Advances*, 2021, 11(4): 045104.
- [19] WANG Tao, LIU Xiangyang, CHU Jianchun, et al. Molecular dynamics simulation of diffusion and interaction of [bmim][Tf₂N] + HFO-1234yf mixture [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2020, 312: 113390.
- [20] WU Xinghui, YANG Zhen, DUAN Yuanyuan. Evaporation of R32/R1234yf mixture nanodroplets on a smooth substrate: molecular dynamics simulation [J]. *Chemical Physics Letters*, 2019, 733: 136672.
- [21] WU Xinghui, YANG Zhen, DUAN Yuanyuan. Molecular dynamics analysis on the wetting properties of R32, R1234yf, and their mixture on pillar-type nanostructured substrates [J]. *Langmuir*, 2020, 36(1): 55-63.
- [22] 李期斌, 刘朝, 高虹, 等. 纳米通道壁面晶面结构对吸附影响的分子动力学模拟 [J]. *工程热物理学报*, 2011, 32(4): 553-556.
- LI Qibin, LIU Chao, GAO Hong, et al. Molecular dynamics simulation of nanochannel adsorption with effects of wall lattice-fluid interactions [J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2011, 32(4): 553-556.
- [23] SHAHMARDI A, TAMMISOLA O, CHINAPPI M, et al. Effects of surface nanostructure and wettability on pool boiling: a molecular dynamics study [J]. *International Journal of Thermal Sciences*, 2021, 167: 106980.
- [24] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19.
- [25] EVANS D J, HOLIAN B L. The nose-hoover thermostat [J]. *Journal of Chemical Physics*, 1985, 83(8): 4069-4074.
- [26] LI Qibin, PENG Xianghe, PENG Tiefeng, et al. Molecular dynamics simulation of Cu/Au thin films under temperature gradient [J]. *Applied Surface Science: Part B*, 2015, 357: 1823-1829.
- [27] HOCKNEY R W, GOEL S P, EASTWOOD J W. Quiet high-resolution computer models of a plasma [J]. *Journal of Computational Physics*, 1974, 14(2): 148-158.
- [28] RAABE G. Molecular dynamics studies on liquid-phase dynamics and structures of four different fluoro-propenes and their binary mixtures with R-32 and CO₂ [J]. *The Journal of Physical Chemistry: B*, 2014, 118(1): 240-254.

(编辑 荆树蓉)