

基于电场作用下水蒸发速率影响特性的研究

罗 啸, 尚永志, 刘 巍, 卢 平, 刘晨晗

(南京师范大学能源与机械工程学院先进热管理技术与功能材料实验室, 江苏 南京 210023)

[摘要] 光分子效应理论指出光子在液气蒸发界面处形成梯度电场, 产生的电场力破坏水分子团簇间的氢键, 促进水蒸发速率突破理论蒸发极限. 为了验证光分子效应, 本文采用分子动力学方法研究外加梯度电场作用下水蒸发特性. 液气相平衡态模拟结果显示, 温度越高液气混合蒸发区域的厚度越大. 自蒸发模拟表明蒸发速率随着温度的提升呈非线性变化, 且当温度接近沸点时, 蒸发速率增加得更快; 在电场作用下, 水蒸发速率得到大幅提升, 且随着温度的上升, 梯度电场对水蒸发速率的提升效果明显削弱.

[关键词] 水蒸发速率, 光分子效应, 梯度电场, 分子动力学

[中图分类号] TK121 [文献标志码] A [文章编号] 1001-4616(2025)01-0001-05

Research on the Influence of Water Evaporation Rate Under the Action of Electric Field

Luo Xiao, Shang Yongzhi, Liu Wei, Lu Ping, Liu Chenhan

(Advanced Thermal Management Technology and Functional Materials Laboratory, School of Energy
and Mechanical Engineering, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China)

Abstract: The theory of photomolecular effect states that photons form a gradient electric field at the liquid gas evaporation interface, and the generated electric field force breaks the hydrogen bonds between water molecule clusters, promoting the water evaporation rate to exceed the theoretical evaporation limit. In order to verify the photomolecular effect, this paper uses molecular dynamics methods to study the water evaporation characteristics under the action of an external gradient electric field. The simulation results of liquid gas equilibrium state show that the thickness of the evaporation zone in liquid gas mixture increases with temperature. Self evaporation simulation shows that the evaporation rate varies nonlinearly with the increase of temperature. When the temperature approaches the boiling point, the evaporation rate increases faster. Under the action of an electric field, the rate of water evaporation is significantly increased, and with the increase of temperature, the effect of gradient electric field on the rate of water evaporation is significantly weakened.

Key words: water evaporation rate, photomolecular effect, gradient electric field, molecular dynamics

水资源短缺是全人类都在面临的严峻问题. 我国水资源总量居世界第六位, 但人均水资源占有量仅为世界平均水平的 28%. 地球表面约 71% 被海水覆盖, 为海水淡化提供了无限发展潜能. 由于运行成本低和能源可持续等优势, 太阳能水蒸发从众多海水淡化方案中脱颖而出. 其中, 太阳能驱动界面蒸发具有广泛的应用前景, 相关研究主要集中在太阳能吸收器、浮动蒸发结构、热管理设计以及降低蒸发焓等方面^[1]. 随着太阳能驱动界面蒸发器的深入研究, 光分子效应理论^[2-3]应运而生. 具体而言, 光子在液气蒸发界面处形成梯度电场, 由此产生的电场力破坏水分子团簇间的氢键, 促进水蒸发速率突破理论蒸发极限. 虽然光分子效应已被实验初步证实, 但是其对水蒸发的影响机制尚不明确且缺乏相关研究.

本文基于分子动力学理论, 采用平衡态分子动力学、液气相平衡态模拟和自蒸发模拟系统深入研究水蒸发过程, 并在蒸发界面施加梯度电场模拟光分子效应, 探究光分子效应水蒸发机制.

收稿日期: 2024-10-08.

基金项目: 国家自然科学基金项目(52206092)、江苏省科学技术厅双碳专项(BK20220032).

通讯作者: 刘晨晗, 博士, 教授, 研究方向: 微尺度传热. E-mail: chenhanliu@njnu.edu.cn

1 分子动力学模拟方法

分子动力学^[4-5](molecular dynamics, MD)是目前广泛应用于计算物理、化学、材料科学等领域的一种计算机模拟技术,通过数值模拟研究物质的分子系统在微观尺度上的动态行为. 它将组成系统的微观粒子(分子或原子)视为经典粒子,将所研究的系统视为经典多体系统. 分子动力学工作流程如图 1 所示. 在选定描述系统内粒子间相互作用的势函数及系统外加约束条件后,求解所有粒子的 Newton 运动方程,记录各时刻系统内粒子的位置和动量,从而得到系统随时间演进的微观过程,最后基于统计力学理论在原子层面上揭示物质的结构、动态过程以及热力学和动力学性质.

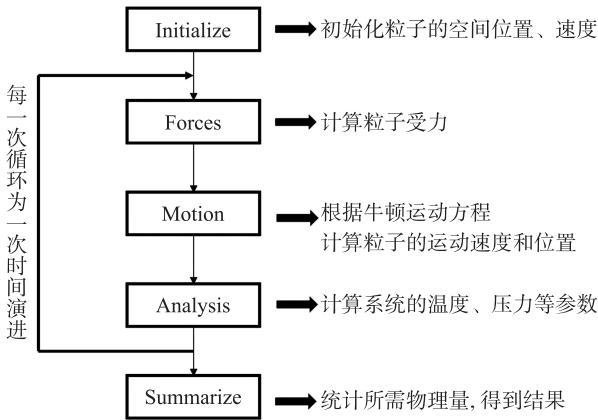


图 1 分子动力学模拟流程图

Fig. 1 Molecular dynamics simulation flowchart

1.1 液气相平衡模拟

对于水蒸发的分子动力学模拟,采用 Tip4p/2005 水分子模型. 液-气相变过渡区域中心位置和宽度等几何参数对于确定液相和气相的边界位置非常重要. 图 2 展示了液相和气相位置以及液面法线方向的水分子质量密度分布. 从图中箭头可看出,水分子的运动状态分为蒸发、冷凝和反射.

质量密度分布(图 2 黑色曲线)表明过渡区域内的密度从液相密度连续减小到气相密度,可用双曲正切函数近似拟合:

$$\rho(z) = \frac{1}{2}(\rho_v + \rho_l) + \frac{1}{2}(\rho_v - \rho_l) \tanh\left(\frac{z - z_0}{\delta}\right), \quad (1)$$

式中, ρ_l 是液相密度, ρ_v 是气相密度, z_0 是过渡区域的中心位置, δ 是过渡区域厚度.

d 定义为界面处的密度从液体密度的 90% 下降到液体密度的 10% 的距离,与过渡区域厚度 δ 有关,即 $d = 2.197 \, 2\delta$. 该等式来自于 Yang 等^[6]论文中的拟合曲线.

1.2 自蒸发模拟

以液气相平衡模拟为基础,获得气相界面位置和液相边界位置,从而确定液相区域和蒸发界面区域的范围. 本文选择液相和蒸气界面位置的方式与 Kobayashi 等^[7]在氙气蒸发研究中和 Skarbalius 等^[8]在水蒸发研究中的方式相同,将蒸气边界平面放置在 $z^* = 2.5$ 以及液相边界平面放置在 $z^* = -1.5$,其中 z^* 是液面附近过渡区域的归一化坐标:

$$z^* = \frac{z - z_0}{d}. \quad (2)$$

在液相区域施加热浴控制液相区域温度保持恒定以模拟光热效应,界面水层则不施加热浴,控制能量保持恒定. 模拟设置如图 3 所示,在水体外增加了水体厚度两倍的真空层,使得水分能离开蒸发界面区

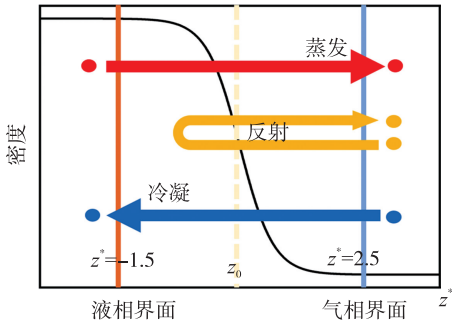


图 2 液气相平衡时水分子蒸发凝结反射示意图

Fig. 2 Schematic diagram of water molecule evaporation and condensation reflection in liquid gas phase equilibrium

域,进入气相区域.当水分子越过气相界面进入气相区域时会被立即删除,从而达到模拟水蒸发的效果.

以水分子自蒸发至真空层模拟为基础,在蒸发界面施加梯度电场.以 d 的宽度作为施加电场的区域,由式(1)的双曲正切函数的 δ 获取.为了统一不同温度下施加电场区域的范围,本文将电场梯度变化区域的范围设置为 4.5 \AA ,满足光分子效应理论中对于蒸发界面宽度的定义.

1.3 光分子效应模拟

在太阳能蒸发中,光热效应是受普遍认可的蒸发机制.假设太阳能蒸发完全由光热效应驱动,水蒸发速率的理论极限可根据式(3)^[3]计算:

$$J = q / [L + c_p(T_s - T_w)], \quad (3)$$

式中, q 是太阳能通量或其他形式的输入功率, L 是潜热, c_p 是恒压比热, T_s 和 T_w 分别是蒸发表面温度和整体水温.取 $T_s = 40 \text{ }^\circ\text{C}$ 和 $T_w = 20 \text{ }^\circ\text{C}$, q 为标准太阳能 (1 kW/m^2),并假设所有太阳能都转化为热量作用于界面水蒸发,则水蒸发速率极限为 $1.45 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$ ^[3,9].

在特定的太阳能界面蒸发器中,蒸发速率可超过以上所计算的水蒸发速率理论极限.例如,Zhang 等^[10]利用二维碳纳米管复合聚丙烯酰胺水凝胶获得了 $4 \sim 5 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$ 的水蒸发速率.Chen 等^[11]在多孔碳泡沫三维太阳能界面蒸发器中发现蒸发速率超过 $10 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$.为了解释超过太阳能理论蒸发极限的情况,Tu 等^[2-3]提出了光分子效应理论:如图4(a)所示,水分子团簇会被光子在蒸发界面处裂解.在光分子效应作用下,即使没有太阳能吸收器的水凝胶在太阳能或可见光照射下也会导致蒸发速率超过蒸发极限^[3].

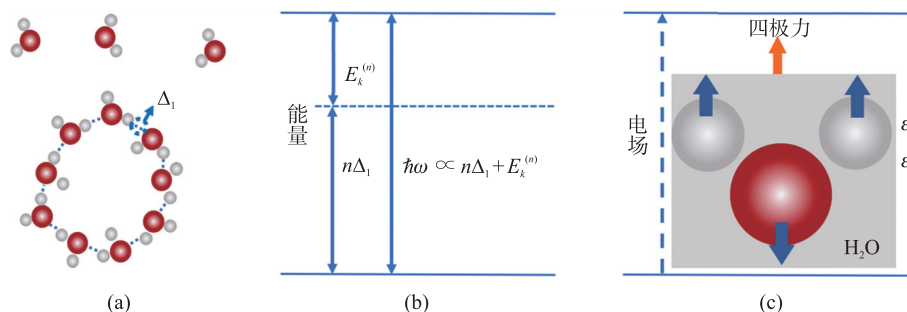


图4 (a)光分子效应作用机制,(b)光分子效应能量转换机制,(c)电场作用下水分子受力机制

Fig. 4 (a)Mechanism of photomolecular effect, (b)energy conversion mechanism of photomolecular effect,

(c)force mechanism of water molecules under electric field effect

光分子效应与光热效应机制不同.在空气-液体界面处,可见光谱中光子被强烈吸收.该过程模仿了光电效应,但光分子效应不涉及电子跃迁,且能在水本身不能吸收的光谱范围内发生.

光分子效应提出了光子能量与水分子团簇间氢键的能量转化.如图4(b)所示,假设光子能量为 $\hbar\omega$,氢键能量为 Δ_1 ,那么一个光子的能量可以破坏 n 个氢键,多余的能量转化为水分子逃逸出蒸发界面的动能 E_k .由于光是一种电磁波,光子在蒸发界面会形成电场,场强会发生梯度变化,从液相向气相逐渐增强.

如图4(c)所示,由于水分子中氧原子带负电荷,在电场中会受到一个指向液相区域方向的力.两个氢原子带正电荷,在电场中会受到一个指向气相区域方向的力.电场场强从液相向气相由低到高变化,水分子蒸发时,氧原子和氢原子受到的电场力不平衡,施加给氢原子的电场力大于施加给氧原子的电场力,加快了水分子逃逸出蒸发界面的速度,从而在宏观表现出蒸发速率提升的效果.

2 结果与讨论

2.1 液气相平衡模拟

在 300 K 、 330 K 、 360 K 和 390 K 的温度下对 $5 \text{ nm} \times 5 \text{ nm} \times 4 \text{ nm}$ 的薄水层模型的液气相平衡时的密度

分布进行了计算模拟,模拟结果如图 5 所示.

根据质量密度分布可计算得到 300 K、330 K、360 K 和 390 K 所对应式(1)的蒸发界面区域中心坐标 z_0 和蒸发界面区域厚度 δ 以及式(2)中的 $z^* = 2.5$ 和 $z^* = -1.5$, 相关数值如表 1 所示.

表 1 密度分布的双曲正弦函数参数以及归一化坐标参数

Table 1 Hyperbolic sine function parameters and normalized coordinate parameters for density distribution

温度/K	$d/\text{\AA}$	$\delta/\text{\AA}$	$z_0/\text{\AA}$	$z^* = 2.5/\text{\AA}$	$z^* = -1.5/\text{\AA}$
300	4.713	2.145	41.239	53.022	34.170
330	4.681	2.132	41.360	53.062	34.339
360	4.602	2.094	41.690	53.195	34.787
390	4.514	2.054	42.100	53.385	35.329

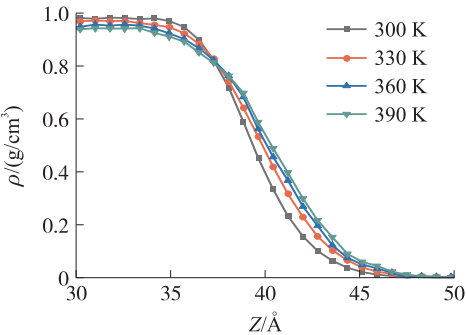


图 5 不同温度下薄水层模型的密度分布
Fig. 5 Density distribution of thin water layer models at different temperatures

从图 5 和表 1 可看出随着温度的升高,蒸发界面区域的厚度越来越小. 液相区域边界和气相区域位置的边界变化较小,且远小于一个水分子的大小. 故在水分子蒸发至真空层的分子动力学模拟中,液相界面的坐标设置为 34 Å,气相界面的坐标设置为 53 Å.

2.2 自蒸发模拟

根据 2.1 获取的液相界面和气相界面坐标设置水自蒸发至真空层的液相区域和蒸发界面区域的大小. 在 330 K 温度下,水分子自蒸发至真空层的分子动力学模拟中分子轨迹如图 6 所示. 在模拟初始阶段,6 号水分子由于模拟体系的不稳定,水分子间相互碰撞导致大量的水分子进入气相区域被删除,这段时间内蒸发的水分子不计入蒸发过程. 2 号水分子从液相区域底部移动至蒸发界面区域后,在液相界面反复碰撞,最后未被蒸发至气相区域. 1、3 和 5 号水分子是液相区域中的水分子,最后蒸发至气相区域后被删除. 4 号水分子是蒸发界面区域的水分子,在蒸发界面区域和液相区域反复碰撞后,运动至气相区域后被删除.

对水分子自蒸发至真空层模拟中的水分子个数 N 随时间变化进行了统计,如图 7 所示. 300 K、330 K、360 K 和 390 K 温度下水蒸发的水分子数与时间的函数关系的斜率表示蒸发速率,斜率越陡意味着蒸发越快. 温度为 300 K 时水分子减少的数量最少,表明在该温度下水蒸发最慢. 随着温度的增高,蒸发速率逐渐提高. 由于 390 K 高于水的沸点,水分子快速离开液相区域,与实验吻合.

根据水分子丢失个数与时间的函数关系(图 7)可计算出不同温度下水蒸发速率的具体数值. 在温度为 300 K 时,蒸发速率非常低,为 1.3 kg/(m²·s);随着温度升高到 330 K 和 360 K,蒸发速率逐渐增大至 15.1 kg/(m²·s)和 55.7 kg/(m²·s). 在温度达到 390 K 时,蒸发速率陡然提升,为 221.2 kg/(m²·s). 该曲线显示温度和蒸发速率之间呈非线性关系. 当温度接近沸点时,蒸发速率增加得更快.

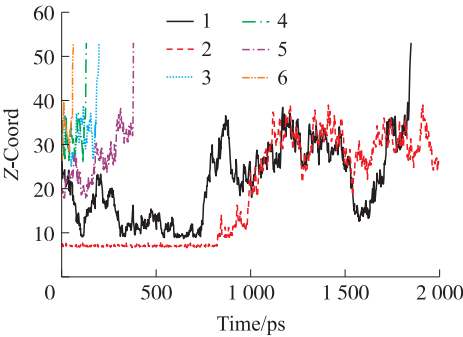


图 6 水分子蒸发轨迹
Fig. 6 Water molecule evaporation trajectory

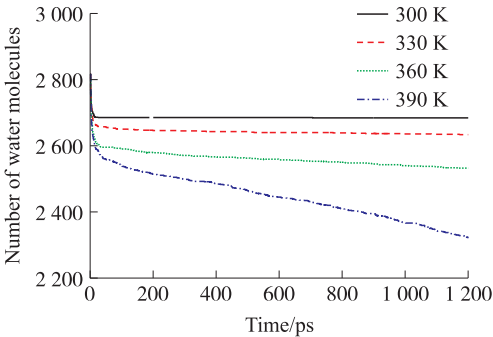


图 7 不同温度下水分子个数变化
Fig. 7 Changes in the number of water molecules at different temperatures

2.3 光分子效应模拟

光分子效应理论提出液体水中的水分子团簇在可见光的照射下,会被光子在蒸发界面处裂解. 光在

蒸发界面形成场强变化的电场,但并未给出电场场强变化的形式.本文中设置了正弦函数形式的电场梯度,并将液相和气相的电场强度分别设置为 0.01 V/\AA 和 0.1 V/\AA ,如图 8 所示.

$0.01 \sim 0.1 \text{ V/\AA}$ 梯度电场作用下水分子数量变化如图 9(a) 所示,需要说明的是电场在自蒸发进行到 200 ps 时施加.在 330 K 、 360 K 和 390 K 温度下,电场作用大幅提升了蒸发速率,导致液相区域的水分子数目降低速度过快,从而使得液相区域水体崩溃,故只统计了崩溃前的蒸发速率,如图 9(b) 所示.在温度为 300 K 时,蒸发速率为 $10.9 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$,与不加电场相比提升了 838.5% .随着温度升高到 330 K 和 360 K ,蒸发速率逐渐增大,分别为 $24.6 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ 和 $89.4 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$,分别提升了 162.9% 和 160.5% .在温度达到 390 K 时,达到常压下水的沸点,蒸发速率为 $290.1 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$,提升了 131.2% .随着温度的上升,电场作用对水蒸发速率的提升呈现削弱的效果,与光分子效应中提出的光分子蒸发速率随温度的提升而降低相吻合.

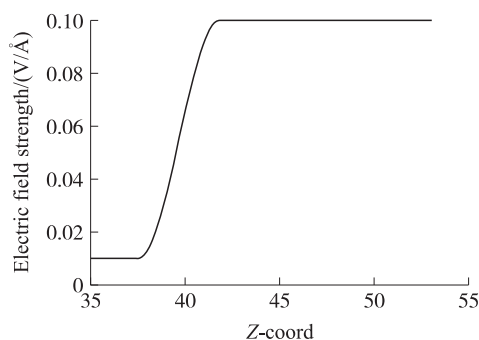


图 8 电场形式与梯度变化

Fig. 8 Electric field pattern and gradient variation

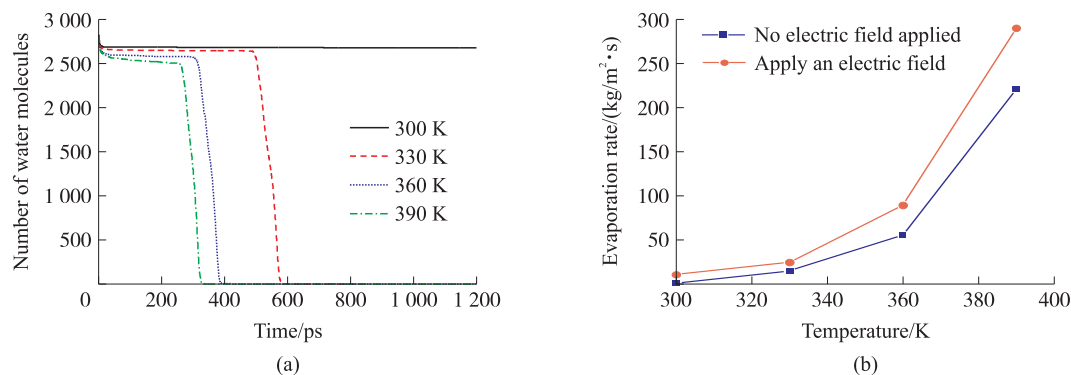


图 9 (a) 在电场作用下不同温度下水分子个数变化, (b) 施加电场前后不同温度下水蒸发速率

Fig. 9 (a) Changes in the number of water molecules at different temperatures under the action of an electric field,

(b) water evaporation rates at different temperatures before and after applying an electric field

3 结论

基于分子动力学模拟,本文研究了梯度电场作用下水蒸发特性,结论如下:

(1) 液气相平衡模拟中,水分子质量密度呈现双曲正切函数分布.随着温度的升高,蒸发界面区域的厚度越来越小.

(2) 自蒸发模拟中,温度和蒸发速率之间呈非线性关系.随着温度的升高,蒸发速率提升的更快,且当温度接近沸点时,蒸发速率相对于温度的变化率显著增加,表明存在相变.

(3) 梯度电场作用使得水蒸发速率得到大幅提升,且随着温度的上升,电场作用对水蒸发速率的提升效果明显减弱.

[参考文献]

- [1] TAO P, NI G, SONG C, et al. Solar-driven interfacial evaporation[J]. Nature energy, 2018, 3(12): 1031–1041.
- [2] TU Y, CHEN G. Photomolecular effect: visible light absorption at water-vapor interface[J/OL]. arXiv Preprint arXiv:2202.10646, 2022.
- [3] TU Y, ZHOU J, LIN S, et al. Photomolecular effect leading to water evaporation exceeding thermal limit[J/OL]. arXiv Preprint arXiv:2201.10385, 2022.

(下转第 148 页)

- [11] 洪泽洋,周明星. 江西省全国青少年校园足球特色学校分布特征研究[J]. 冰雪体育创新研究,2021(3):64-65.
- [12] 陈学东. 天津市校园足球特色学校发展研究[J]. 广州体育学院学报,2021,41(1):108-112.
- [13] 李常甘,李浩泉. 2015 年全国青少年校园足球特色学校分布特征再研究[J]. 体育世界,2020(1):195-200.
- [14] 李常甘,李浩泉. 2015—2017 年全国青少年校园足球学校分布特征[J]. 安顺学院学报,2020,22(5):129-134.
- [15] 云玲,秋鸣,吴楼. 青少年校园足球特色学校空间解构:格局、成因与通路[J]. 山东体育学院学报,2023,39(3):108-118.
- [16] 孙洁,孙中昶,郭华东,等. 中国城市 2020 年建成区数据集[J]. 中国科学数据,2022,7(1):1-15.
- [17] 常媛媛,赵馨,刘耀龙. 黄河流域体育非物质文化遗产空间集聚特征与影响因素分析[J]. 北京体育大学学报,2021,44(11):137-150.
- [18] 王金伟,郭嘉欣,刘乙,等. 中国滑雪场空间分布特征及其影响因素[J]. 地理研究,2022,41(2):390-405.
- [19] 赵治治,庞剑,王鑫,等. 我国校园足球特色学校退出机制的理论分析[J]. 上海体育学院学报,2018,42(4):26-30.
- [20] 张新,刘家明,朱鹤,等. 北京郊区参与型体育旅游资源时空演化特征及影响因素[J]. 资源科学,2020,42(11):2196-2209.
- [21] 方泰,姜付高,张修河,等. 基于 GIS 的全国青少年校园足球试点县(区)空间分布与优化研究[J]. 辽宁体育科技,2019,41(2):122-128.
- [22] 北京市校园足球协会. 北京市校园足球特色学校调研评估报告[R]. 2019-01-21.

[责任编辑:陆炳新]

(上接第 5 页)

- [4] LEIMKUHLER B, MATTHEWS C. Molecular dynamics[J]. Interdisciplinary applied mathematics, 2015, 39:443.
- [5] ERCOLESSI F. A molecular dynamics primer[R]. Spring college in computational physics. Trieste:ICTP, 1997.
- [6] YANG T, PAN C. Molecular dynamics simulation of a thin water layer evaporation and evaporation coefficient[J]. International journal of heat and mass transfer, 2005, 48(17):3516-3526.
- [7] KOBAYASHI K, HORI K, KON M, et al. Molecular dynamics study on evaporation and reflection of monatomic molecules to construct kinetic boundary condition in vapor-liquid equilibria[J]. Heat and mass transfer, 2016, 52:1851-1859.
- [8] SKARBALIUS G, DŽIUGYS A, MISIULIS E, et al. Molecular dynamics study on water evaporation/condensation parameters[J]. Microfluidics and nanofluidics, 2021, 25(10):81.
- [9] LI X, LI J, LU J, et al. Enhancement of interfacial solar vapor generation by environmental energy[J]. Joule, 2018, 2(7):1331-1338.
- [10] ZHANG X, PENG Y, SHI L, et al. Highly efficient solar evaporator based on a hydrophobic association hydrogel[J]. ACS sustainable chemistry & engineering, 2020, 8(49):18114-18125.
- [11] CHEN G. On the molecular picture and interfacial temperature discontinuity during evaporation and condensation[J]. International journal of heat and mass transfer, 2022, 191:122845.

[责任编辑:杜忆忱]