

纳米流道内液体特性的分子动力学研究

贾妍, 刘恒, 虞烈

(西安交通大学机械电子及信息系统研究所, 710049, 西安)

摘要: 以非平衡分子动力学方法研究了纳米流道内液体的流动特性, 重点探讨上壁面以不同剪切速度运动, 下壁面保持静止且在其附近的温度保持相对稳定时, 两壁面间液体分子的运动特性及作用机理。模拟获得了不同剪切速度下流体的速度分布、密度分布及温度分布, 并分析了速度滑移率、密度分布和最高温度与剪切速度之间的关系。研究表明, 随着剪切速度的增加, 两固体壁面间液体靠近运动平板处的温度呈线性增加, 在距离运动壁面 0.8 倍分子直径范围之内存在着明显的滑移现象, 而在这个区域之外, 液体分子的速度基本呈线性变化, 纳米流道内液体分子密度的非均匀分布和有序化排列结构不受剪切速度的影响, 平均剪切应力随着剪切速度的增加而不断增加。

关键词: 分子动力学; 剪切速度; 纳米流道; 模拟

中图分类号: TH117 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2008)01-0009-04

Molecular Dynamics of the Flow Properties of Liquids in Nanochannel

JIA Yan, LIU Heng, YU Lie

(Institute of Mechatronics and Information System, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: The non-equilibrium molecular dynamics simulation is carried out to investigate the flow properties of liquids confined in nanochannel, especially the flow behaviours and the interaction mechanism of fluid molecules confined between two solid walls as the upper wall moving at different shear velocities, and the temperature of liquids near the stationary lower wall keeping constant. The distributions of velocities, densities and temperatures are obtained for a variety of shear velocity; the relationships of the slip of velocity, the density and the temperature profiles with the shear velocity are analyzed. The simulated results show that with the unceasing increase of the shear velocity, the temperature of liquids near the moving wall increases continuously. The slip is easily observed if the distance from the moving wall is less than 0.8 molecular diameter, and beyond this range the velocity profiles appear quite linear. The different shear velocities do not affect the distribution of densities and the order structures of liquids in nanochannel. The average shear stress is enhanced with the increasing shear velocity.

Keywords: molecular dynamics; shear velocity; nanochannel; simulation

目前, 应用分子动力学模拟方法研究纳米级流体的流动特性已取得了许多成果, Thompson 和 Robbins^[1]采用 Lennard-Jones(L-J)液体(液态氩)模拟了 2 个平板间的剪切流动, 着重研究了液体在壁面附近形成的有序结构及平板间流体的速度剖面。Thompson 和 Troian^[2]模拟了纳米流道内液体

的无滑移流动和滑移流动, 揭示了滑移长度和速度剪切率之间的关系。Bitsanis 和 Magda^[3]则采用 L-J 流体对固体边界附近的牛顿流体进行了详细的研究, 得出了在剪切作用下液体的速度剖面、密度剖面和温度剖面, 同时计算出液体的剪切应力和等效黏度。Cieplak 等^[4]研究了流体在纳米流道内的密度分

布现象,研究表明,滑移和壁面附近流体的组织结构有着密切的关系。

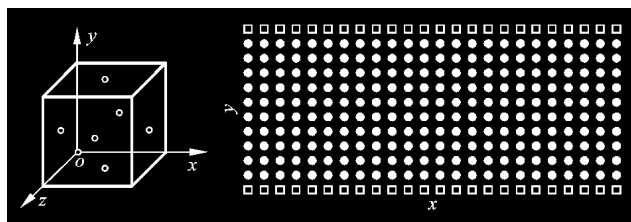
本文在模拟开始之前,首先假设在固体壁面吸附一层液体分子,流体中的液体分子与固体壁面的作用可以看作液体分子与附着在壁面上的液体分子之间的相互作用。然后采用非平衡分子动力学方法研究在不同剪切速度下,纳米流道内流体的运动特性,重点研究上壁面以不同剪切速度运动时,两壁面间液体分子的运动特性及作用机理。与以往处理方法不同之处在于,首先当上壁面开始以速度 $^{[5]}v$ 沿 x 方向运动时,如果有液体分子穿过上壁面,则此时液体分子速度在 x 方向的分量还应加上 v 。其次,以前关于流体在固体壁面之间的运动特性的研究,主要是建立在系统处于恒温或者恒压的基础之上的,但在实际应用中的有些情况下很难使整个系统的温度保持稳定,比如轴承转子的运动,就很难保证运动过程中润滑油膜整体温度稳定不变。因此,在模拟过程中,仅考虑静止壁面附近的液体分子温度处于稳定状态,即在实际应用中相当于给静止壁面增加了一个冷却作用,使靠近静止壁面的液体层的温度保持稳定。

1 基本原理与模拟系统

模拟系统由2个平行的固体壁面和壁面间的流体分子构成,如图1所示。液体采用液态氩,液态氩分子间的相互作用势采用L-J势,即

$$\phi(r_{ij}) = 4\epsilon((\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6) \quad (1)$$

式中: r_{ij} 为第 i 个分子与第 j 个分子之间的距离; σ 为分子特征长度,也可以理解为分子的直径; ϵ 为分子间相互作用强度的特征能量值。



(a)单位元胞中的分子分布
(b)系统在 x 、 y 平面的投影
●:流体分子; □:附着在固体壁面上的液体分子
图1 模拟系统示意图

设系统中液体分子与附着在固体壁面上液态氩分子之间的作用势也采用L-J势,但是此时势函数中的特征能量和特征长度分别为 ϵ_{wf} 和 σ_{wf} ,并且 $\epsilon_{wf}/\epsilon=1$, $\sigma_{wf}/\sigma=1$ 。计算中使用的模拟参数分别为:液态

氩的特征长度 $\sigma=0.34$ nm,特征能量 $\epsilon=1.65 \times 10^{-21}$ J,玻尔兹曼常数 $k_B=1.381 \times 10^{-23}$ J/K,系统温度 $T=132$ K,氩原子的质量 $m=6.96 \times 10^{-26}$ kg,数密度 $^{[1,3]}\rho=0.8$ 。为了方便计算,整个模拟过程中数据采用归一化处理:时间 $\tau=(m\sigma/\epsilon)^{1/2}$;速度 $v=\sigma/\tau$;加速度 $a=\sigma/\tau^2$;温度 $T=\epsilon/k_B$ 。

系统在 xyz 方向的尺寸为 $20.4\sigma \times 9.35\sigma \times 8.5\sigma$,该系统包含1 200个液态氩分子和240个附着在固体壁面上的液态氩分子。在初始时刻,流体分子按照面心立方晶格结构排列,分子间的距离按照给定的密度值确定,根据已知温度确定分子的初始速度 v_0 ,方向则随机给出。当粒子初始位置、速度和粒子上的作用力确定后,根据牛顿运动定律,液体分子的运动方程为 $F_i=ma_i$ ($i=1,2,\dots,N$)。通过积分运动方程,可以得出任意时刻液体分子的速度和位置,积分过程选用蛙跳法。积分过程中的时间步长 $\Delta t=0.005\tau$,为节约计算时间,在计算分子间作用力时,取截断半径 $r_c=2.5\sigma$,即当2个粒子间的距离大于截断半径时,其相互作用可以忽略不计。

在模拟过程中,为减少有限尺寸对结果的影响,系统在 x 和 z 方向采用周期性边界条件,即沿 x 和 z 方向模拟系统被其本身的映像系统所包围,而在 y 方向由于2个固体壁面的存在,因此采用Ashurst和Hoover $^{[6]}$ 提出的弹性碰撞。模拟开始时必须对系统进行平衡处理,即2个固体壁面静止不动,使系统趋于稳定,此过程大约需要运行100万步。当系统中液态分子的速度分布符合麦克斯韦-玻尔兹曼速度分布时,则认为系统达到平衡状态,随后让上壁面以不同的速度开始运动。当上壁面以不同剪切速度开始运动时,系统大约需运行5万步才能重新达到平衡,然后开始记录分子运动。为了计算分子运动的平均值,首先把两固体壁面间的空间沿 y 方向划分成若干个子区间,计算出液态分子在不同时刻于各个子区间的区域平均值,再将这些平均值对时间加以平均,就得到液态分子运动的平均值。本文在初始条件相同的情况下,分别对剪切速度为 $0.2\sigma\tau^{-1}$ 、 $0.4\sigma\tau^{-1}$ 、 $0.6\sigma\tau^{-1}$ 、 $0.8\sigma\tau^{-1}$ 和 $1.0\sigma\tau^{-1}$ 的情况进行了模拟。

2 结果与讨论

2.1 速度分布

各种剪切速度下流体的速度分布如图2所示。根据经典流体动力学理论,在剪切流中流体速度沿膜厚方向的分布是一条线性变化的斜线,但从图2

的速度分布可以明显看出,在5种不同剪切速度下,速度沿膜厚方向的变化并不是完全符合经典流体力学理论.在靠近静止壁面附近,液体分子的平均速度均保持为0;在靠近运动壁面附近,液体的流动速度小于壁面的运动速度而出现滑移现象.值得注意的是,运动壁面对液体滑移的影响范围在 0.8σ 之内,速度滑移主要发生在这个区域,在这个区域之外液体分子的速度基本呈线性变化.

如图3所示,根据王慧等^[7]提出的滑移率的定义,得

$$S = (v_w - v_f)/v_w \quad (2)$$

式中: v_w 为壁面速度; v_f 为和壁面相邻区域流体分子的平均速度.从图3中可以看出,随着剪切速度的增加,壁面的滑移率也不断增加,当剪切速度较大时,滑移率的增加比较缓慢,同时当剪切速度大于 $0.8\sigma\tau^{-1}$ 时,滑移率反而出现下降的趋势.

2.2 温度分布

如图4所示,在靠近静止壁面附近,各种剪切速度下液体的温度保持相对稳定,在靠近运动壁面附近液体温度最高,并且这种特性在各种剪切速度下均一致.这是由于液体与2个壁面接触时,其液体的温度与壁面温度保持一致,在靠近静止壁面附近因

冷却作用使得壁面的温度保持稳定.如图5所示,在靠近运动平板附近,由于外力作用使得上平板保持稳定的运动,在此过程中运动壁面不断从外界吸取能量,其结果引起温度升高,且随着剪切速度的提高,上平板从外界吸取的能量越多,其表面温度上升得也越高.从图5中可以看出,随着剪切速度的提高,运动平板附近的液体温度基本呈线性升高.

2.3 密度分布与剪切应力

如图6所示,比较几种不同剪切速度下密度的分布情况,可以发现液体内部沿膜厚方向液体分子的分布与剪切速度的大小没有关系,同时从密度分布图中可以看出,由于壁面和液体分子的作用,使得靠近壁面处的分子分布出现明显的分层现象,大约有5~6个明显的分层,靠近壁面液体分子的密度明显大于远离壁面液体分子的密度,在液体内部各层分子的平均密度基本维持系统的平均密度.

如图7所示,由于在剪切过程中固体壁面主要受到沿 x 方向的剪切作用,因此仅对 x 方向的平均剪切应力进行研究.在实际剪切过程中,液体不但每时每刻在各层受到的剪切应力不相同,而且不同时刻在同一层液体受到的剪切应力也不相同.本文中的平均剪切应力指的是某剪切速度下液体在不同时

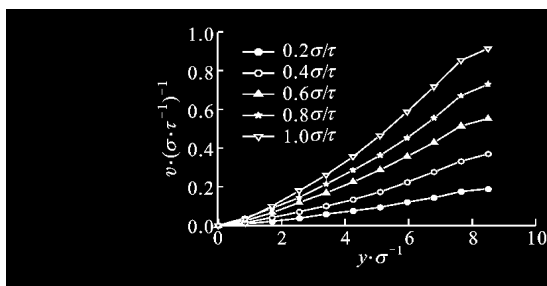


图2 流体的速度分布

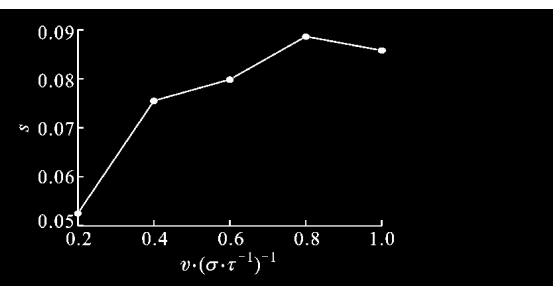


图3 速度滑移率与剪切速度的关系

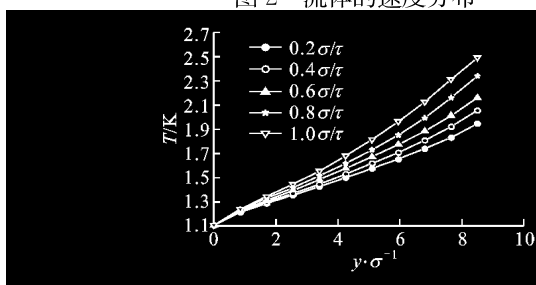


图4 不同剪切速度下流体的温度分布

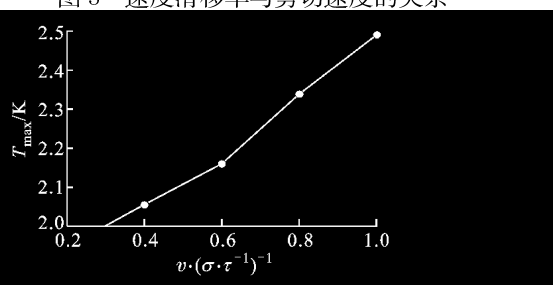


图5 温度与剪切速度的关系

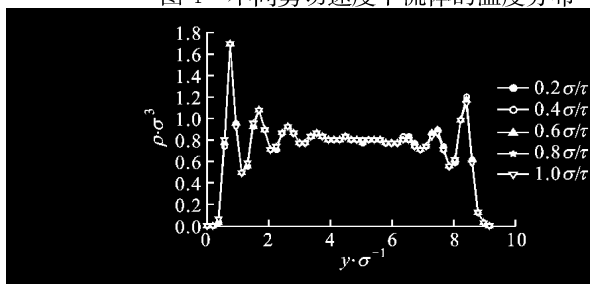


图6 流体的密度分布

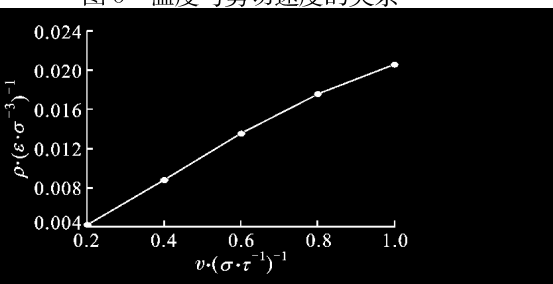


图7 平均剪切应力分布

刻、不同分层下剪切应力的时间和空间的平均值. 从图7中可以看出, 平均剪切应力随着剪切速度的增加呈线性不断增加, 说明剪切速度越大, 摩擦阻力也越大, 这与宏观现象是相一致的.

3 结 论

本文应用非平衡分子动力学方法, 对纳米流道内液体在不同剪切速度下的流动特性进行了研究, 主要结论如下.

(1) 随着剪切速度的增加, 两固体壁面间液体靠近运动平板处的温度呈线性增加.

(2) 在运动壁面附近存在着明显的滑移现象, 滑移率随着剪切速度的增加而增加. 运动壁面对液体滑移的影响范围大约在一个分子直径之内, 速度滑移主要发生在这个区域, 在这个区域之外液体分子的速度基本呈线性变化.

(3) 纳米流道内液体分子密度的非均匀分布和有序化排列结构不受剪切速度的影响.

(4) 平均剪切应力随着剪切速度的增加不断呈线性增加.

参考文献:

- [1] THOMPSON P A, ROBBINS M O. Shear flow near solids: epitaxial order and flow boundary conditions [J]. *Phys Rev: A*, 1990, 41(12): 6830-6837.
- [2] THOMPSON P A, TROIAN S M. A general boundary condition for liquid flow at solid surfaces [J]. *Nature*, 1997, 389(6649): 360-362.
- [3] BITSANIS I, MAGDA J. Molecular dynamics of flow in micro-pores [J]. *J Chem Phys*, 1987, 87(3): 1733-1750.
- [4] CIEPLAK M, KOPLIK J. Boundary conditions at a fluid-solid interface [J]. *Physical Review Letters*, 2001, 86(5): 803-806.
- [5] 林大为. 分子动力学与纳米系统热现象之研究[D]. 台南: 成功大学机械工程学系, 2004.
- [6] ASHURST W T, HOOVER W G. Dense-fluid shear viscosity via non-equilibrium molecular dynamics [J]. *Phys Rev: A*, 1975, 11(2): 658-678.
- [7] 王慧, 胡元中. 超薄润滑膜界面滑移现象的分子动力学研究 [J]. *清华大学学报*, 2000, 40(4): 107-110.
- WANG Hui, HU Yuanzhong. Molecular dynamics study of interfacial slip behavior of ultra thin lubricating films [J]. *Journal of Tsinghua University*, 2000, 40(4): 107-110.

(编辑 管咏梅)