

纳米通道内液态微流动密度分布特性数值模拟研究*

胡海豹[†] 鲍路瑶 黄苏和

(西北工业大学航海学院, 西安 710072)

(2013年1月17日收到; 2013年2月27日收到修改稿)

微通道内流动因表面积/体积比值极大, 造成许多微尺度效应, 进而使微通道内出现完全不同于宏观流动的流体密度分布特性. 本文以纳米通道内液态 Poiseuille 流为对象, 采用非平衡分子动力学模拟方法研究了流体原子间相互作用强度 ϵ_{LL} , 流体原子间平衡距离 σ_{LL} 以及壁面原子与流体原子间平衡距离 σ_{LS} 对通道内流体密度分布的影响规律. 数值模拟中, 统计系综取微正则系综, 势能函数选用 LJ/126 模型, 壁面设为 Rigid-atom 壁面, 温度校正使用速度定标法, 牛顿运动方程的求解则采用 Verlet 算法. 模拟结果表明, 随 ϵ_{LL} 的减弱, 近壁面区密度分布的振荡幅度则逐渐增大; 而 σ_{LL} 则同时影响流体原子的存在形态和密度分布, 较大的 σ_{LL} 会造成流体原子在整个通道内呈现面心立方结构的类似固体排列, 较小的 σ_{LL} 会使得流体原子呈现不断变化的“团簇”结构; 随 σ_{LS} 的变大, 近壁面区流体密度振荡幅度增大, 且流体密度分布起点离壁面越远. 另外, 本文还从近壁面区流体原子的“俘获-逃逸”行为角度, 初步解释了原子间相互作用强度对密度分布的影响规律.

关键词: 纳米通道, 微流动, 密度分布, 分子动力学

PACS: 47.61.-k, 83.50.Ha, 83.10.Rs

DOI: 10.7498/aps.62.124705

1 引言

近十几年来, 自然科学和工程技术发展的一个重要趋势是朝微型化和纳米化迈进, 因而迫切需要弄清微、纳米尺度条件下的流体流动规律. 在这样的微系统中, 其通道的水力直径极小, 表面积/体积的比值极大, 从而引起了许多微尺度效应, 如表面张力效应、低雷诺数效应、双电层效应、分子力效应等, 这些因素的影响使得用于宏观流体运动分析的 Navier-Stokes (N-S) 方程不再适用.

为探究该类微流动的流动特性, 近年来越来越多的国内外学者开始关注该交叉学科领域. 如 Thompson 等^[1,2] 研究了纳米通道内的 Couette 流动, 给出了固液相互作用强度对流动系统滑移长度和密度分布的影响规律, 并同时指出微通道内流体的密度分布会对流动系统的壁面滑移产生重要的影响; Barrat 和 Bocquet^[3] 采用分子动力学模拟方

法对纳米尺度下液体的 Couette 流和 Poiseuille 流进行了模拟, 发现了壁面“滑移”现象和密度振荡现象的存在; Travis 和 Gubbins^[4] 采用分子动力学模拟方法对微尺度下的 Poiseuille 流进行了系列模拟研究, 并对微流动模拟结果与基于 N-S 方程解算结果的差别进行了深入分析; Song 和 Wang^[5] 研究了不同晶格平面种类等条件下的 Couette 流动和 Poiseuille 流动, 给出了不同条件下固液作用强度对滑移长度和流体密度分布的影响规律. Song 和 Wang^[6] 采用非平衡分子动力学方法模拟了不同壁面润湿性时纳米通道内的 Poiseuille 流, 给出了壁面润湿性对流体流量、滑移速度和滑移长度的影响规律, 并且指出壁面润湿性对流体密度分布也有着重要的影响. Xin 和 Zhang^[7] 采用分子动力学方法研究了液态氩在铜纳米通道内的 Couette 流动, 给出了不同壁面速度对流体的速度分布和流体结构的影响规律. Zhang 等^[8] 利用理论和分子动力学模拟两种方法研究了纳米通道内 Poiseuille 流的流

* 国家自然科学基金(批准号: 51109178)、高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20116102120009)和固体润滑国家重点实验室开放课题(批准号: 1210)资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: huhaibao@nwpu.edu.cn

动特性, 其中分子动力学的模拟结果表明固液相互作用强度会对近壁面区流体密度分布的振荡现象产生重要的影响. 曹炳阳等^[9]模拟了液态氩在铂纳米通道内的 Couette 流动, 获得了流体和通道表面之间浸润性对“滑移”现象的影响, 同时也发现了流体的密度分布在近壁面区存在振荡现象. 顾晓坤和陈民^[10]采用分子动力学方法研究了水在硅通道中的 Couette 剪切流动现象, 给出了通道中流体的速度分布, 并从理论上证实了壁面“滑移”现象的存在.

现有研究报道重点关注了微流动在不同条件下的壁面滑移规律, 但对所发现的密度振荡现象则缺乏深入的研究. 为此, 本文以纳米通道内液态 Poiseuille 流为对象, 采用非平衡分子动力学模拟方法开展了不同条件下通道内介质密度分布特性研究.

2 纳米通道内微流动求解方法

2.1 模拟系统建立

在分子动力学模拟时, 采用铂原子构造微通道壁面, 而液态氩作为通道内流体介质. 这里未选择水作为流体介质, 是因为水是强极性分子, 在模拟时需要考虑非常复杂的分子之间以及分子内部的作用力, 如静电力、扭矩等等, 这样就极大地加大了模型的复杂程度和计算量. 因此本文沿用前人的处理方法^[6,7,9,11,12], 采用液态的氩来代替水. 同时, 为提高计算效率, 本文在不影响物理模型本质的条件下, 采用二维分子动力学方法 (2DMD)^[11]. 图 1 为本文所建立的纳米通道内微流动系统示意图.

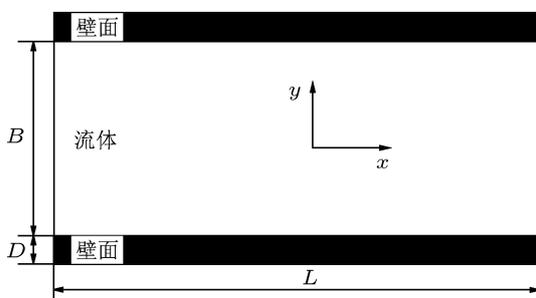


图 1 模拟系统示意图

通道具体参数如下: 通道长度 $L = 172.6648 \text{ \AA}$, 宽度 $B = 62.7872 \text{ \AA}$, 壁厚 $D = 11.7726 \text{ \AA}$. 通道上下壁面均由 312 个铂原子按面心立方结构排列而成,

壁面原子厚度为 7 层, 晶格间距 $a = 3.9242 \text{ \AA}$. 通道中液氩的平衡温度为 85 K, 共包含 512 个氩原子. 通过在流动方向 (x 方向) 上应用周期性边界条件, 以实现模拟无限长通道内微流动. 模拟中, 对通道中的氩原子全部施加 x 方向的驱动力 F , 就等效于施加压力梯度 $dP/dx = -\rho g_x$ ^[13,14], 从而来模拟充分发展 Poiseuille 流动.

2.2 势能函数模型

本文数值模拟采用了非平衡分子动力学模拟方法, 其中原子之间的相互作用选用 LJ/126 势能函数模型来描述, 其表达式如下:

$$U = \begin{cases} 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6] & r < r_c \\ 0, & r \geq r_c \end{cases}, \quad (1)$$

式中, r 是相互作用两原子之间的距离, r_c 是截断半径, ε 和 σ 是 LJ 势能的特征能量和特征长度, 且其值随原子不同而不同.

图 2 所示为 LJ 势能函数曲线图, LJ 势能的最低点位于 $r = 2^{1/6}\sigma$ 处, 所以 σ 的大小反映原子间的平衡距离; ε 为势能最低点与原点的距离, 反映出势能曲线的深度; LJ 势能中, r^{-12} 项为排斥项, r^{-6} 项为吸引项; 当 r 很大时 LJ 势能接近于零. 对于氩原子之间的作用, $\varepsilon_{\text{ArAr}} = 0.01042 \text{ eV}$, $\sigma_{\text{ArAr}} = 3.405 \text{ \AA}$; 对于铂原子之间的作用, $\varepsilon_{\text{PtPt}} = 0.52117 \text{ eV}$, $\sigma_{\text{PtPt}} = 2.5 \text{ \AA}$.

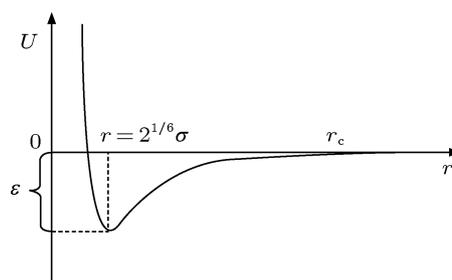


图 2 LJ 势能函数图像

而铂与氩之间的势能参数由 Lorentz-Berthelot 混合法则获得:

$$\sigma_{\text{ArPt}} = \frac{1}{2}(\sigma_{\text{Ar}} + \sigma_{\text{Pt}}), \quad (2)$$

$$\varepsilon_{\text{ArPt}} = \sqrt{(\varepsilon_{\text{Ar}} + \varepsilon_{\text{Pt}})}. \quad (3)$$

氩原子的摩尔质量 $M_{\text{Ar}} = 39.948 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, 铂原子的摩尔质量 $M_{\text{Pt}} = 195.09 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, 截断半径

$$r_c = 2.5\sigma_{\text{ArAr}}$$

2.3 数值模拟步骤及算法

在模拟的初始时刻, 将所有铂原子的速度设定为零, 然后在每一时间步上将所有铂原子的受力置零, 这样就实现了刚性壁面模型且壁面始终保持静止. 氩原子的初始位置按固体氩的晶格结构给出, 初始速度则以液体温度预期值为基础基于高斯分布规律给出. 模拟中, 壁面和流体原子位置和速度的更新均采用微正则系综 (NVE).

模拟过程中, 采用速度定标法将流体的温度控制为预期值. 而速度定标法中计算温度时, 采用场基温控法 (profile-unbiased thermostat)^[15], 即通过减去空间速度场来消除流体宏观运动, 从而保证仅利用流体原子的热运动来计算温度.

模拟中, 纳米通道内流体原子运动满足牛顿运动方程:

$$\begin{cases} \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r}_i = \frac{d}{dt} \mathbf{v}_i = \mathbf{a}_i, & \mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i^0 + \mathbf{a}_i t, \\ \mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i^0 + \mathbf{v}_i^0 t + \frac{1}{2} \mathbf{a}_i t^2. \end{cases} \quad (4)$$

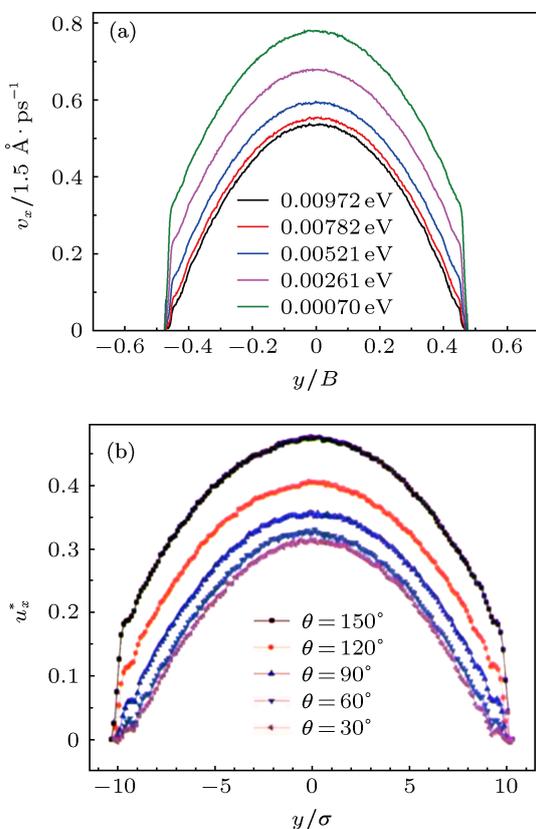


图3 通道内流体的速度分布曲线 (a) 本文获得的速度分布曲线; (b) 文献 [12] 给出的不同接触角时速度分布曲线

另外, 本文在获得流体密度分布和速度分布时, 将整个微通道分为 658 层, 每层厚度 0.138 Å. 待系统平衡后, 通过统计一定时间步数 (本文取 4×10^6 步) 内各层原子信息, 即可获得密度、速度等物理量.

2.4 模拟方法验证

为了验证程序的正确性设置如下参数运行程序: $\epsilon_{\text{ArAr}} = 0.01042 \text{ eV}$, $\sigma_{\text{ArAr}} = 3.405 \text{ \AA}$; $M_{\text{Ar}} = 39.948 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$; $\sigma_{\text{PtAr}} = 2.9544 \text{ \AA}$, 而 $\epsilon_{\text{PtAr}} = 0.00972, 0.007782, 0.00521, 0.00261, 0.00070 \text{ eV}$; 由于壁面为刚性壁面模型, 所以可设置 $\epsilon_{\text{Pt}} = 0 \text{ eV}$, $\sigma_{\text{Pt}} = 0 \text{ \AA}$, $M_{\text{Pt}} = 195.09 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$; 截断半径统一设置为 $r_c = 2.5\sigma_{\text{ArAr}} = 8.5125 \text{ \AA}$.

图 3(a), 图 4(a) 是本文获得的不同流体原子与壁面原子间相互作用强度 ϵ_{PtAr} 时通道内无量纲速度 v_x 和密度 ρ 的分布曲线; 图 3(b), 图 4(b) 是文献 [12] 报道的不同壁面接触角时通道内速度 v_x 及密度 ρ 的分布情况 (不同壁面接触角正对应着不同 ϵ_{PtAr} 值, 具体对应方法见文献 [12]).

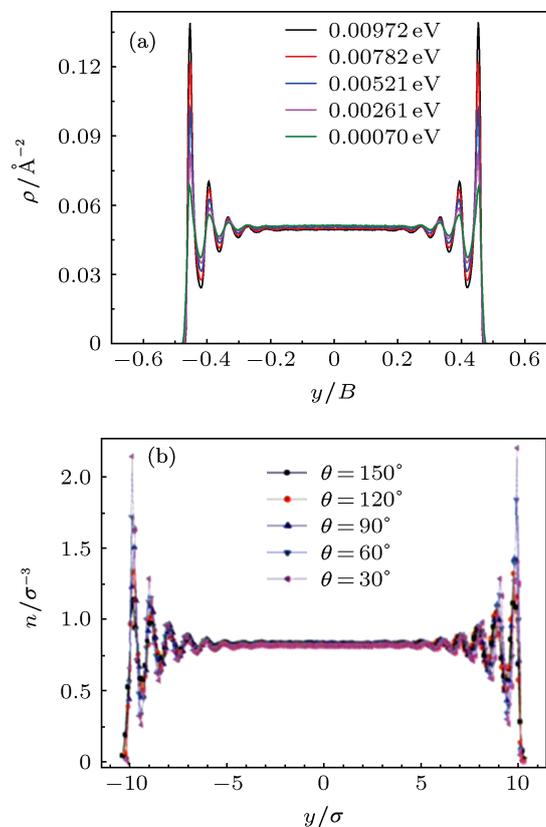


图4 通道内流体的密度分布曲线 (a) 本文获得的密度分布曲线; (b) 文献 [12] 给出的不同接触角时密度分布曲线

由图 3 和图 4(a), (b) 部分的一致性表明, 本文模拟结果与前人报道相符合, 因此, 本文所采用的仿真模型和仿真算法正确、合理.

3 纳米通道内流体密度分布特性

流体密度分布本质上是流体原子的时均位置信息. 而流体原子的运动满足牛顿运动方程, 因此根据牛顿第二定律可知流体原子的位置由原子所受的合外力和原子的质量所决定. 因此在流体原子质量不变的条件下, 各原子间的 LJ 势能参数必会对流体原子的位置产生重要的影响.

表 1 所示是几种常见原子 (分子) 的 LJ 势能参数, 显然不同种类原子或分子间的 LJ 势能参数的取值均不同. 在具体研究中, 如果严格按照真实原子的 LJ 势能参数值来设置模拟系统, 则无法考察单一参数变化对模拟系统特性的影响. 为解决该问题, 分子动力学模拟中, 研究者 [6,7,9,11,12] 广泛采用的方法是以原子/分子间真实 LJ 势能参数为基础, 结合具体问题来设定模拟参数值, 即这些参数值不一定正好对应自然界中某种物质. 这样, 就可以较灵活地控制参数的取值, 从而获得更具一般性的规律.

表 1 常见原子 (分子) 的 LJ 势能参数

原子/分子	ϵ/eV	$\sigma/\text{\AA}$
He	0.0009	2.602
Ne	0.00362	2.755
SF ₆	0.0179	5.252
CCl ₃ F	0.02304	5.757

在前人工作 [1,9,11,12] 中, ϵ_{LS} 对流体密度分布的影响规律已做了较深入的研究. 因此, 本文着重研究以下 LJ 势能参数对流体密度分布的影响规律: 流体原子间相互作用强度 ϵ_{LL} 和流体原子之间平衡距离 σ_{LL} 以及壁面原子和流体原子之间平衡距离 σ_{LS} . 本文根据常见原子的势能参数范围, 选取了如表 2 所示的仿真参数取值.

表 2 仿真中 ϵ_{LL} , σ_{LL} 及 σ_{LS} 的取值

ϵ_{LL}/eV	$\sigma_{LL}/\text{\AA}$	$\sigma_{LS}/\text{\AA}$
0.02042	5.405	4.9544
0.01042	3.405	2.9544
0.00542	1.405	1.9544

3.1 ϵ_{LL} 对密度振荡的影响

图 5 是 ϵ_{LL} 取三个不同值时通道内流体的密度分布图. 图中纵坐标是流体密度 ρ , 横坐标是距通道中心的距离并用通道宽度 B 进行无量纲化 (下同). 从图中可看出, 在通道中心区域 (以下简称为主流区) 流体的密度不随 ϵ_{LL} 的改变而改变; 在靠近通道壁面的区域 (以下简称为近壁面区) 流体在壁面原子的势能作用下, 其密度呈现衰减的周期性振荡分布, 并且随着 ϵ_{LL} 的减小密度分布的振荡程度逐渐增大.

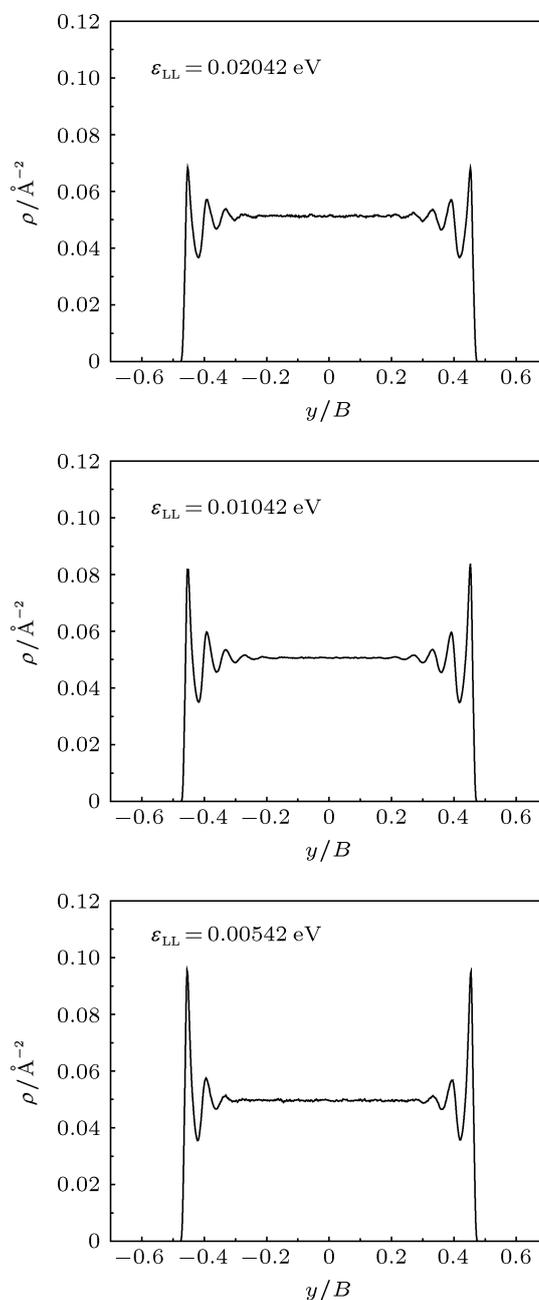


图 5 不同 ϵ_{LL} 时流体密度分布

流体密度分布本质上是反映流体原子的时均位置信息. 为进一步对比不同流体原子间相互作用强度对流体密度分布的影响, 作者又详细考察了系统平衡后瞬时原子位置分布情况. 结果发现, 不同 ϵ_{LL} 时, 瞬时液体原子在通道内的位置分布均类似于随机均匀分布 (见图 6), 且在壁面附近也不能发现明显分布差异. 作者认为这与壁面附近密度振荡幅度有限, 且密度振荡区域非常小有关.

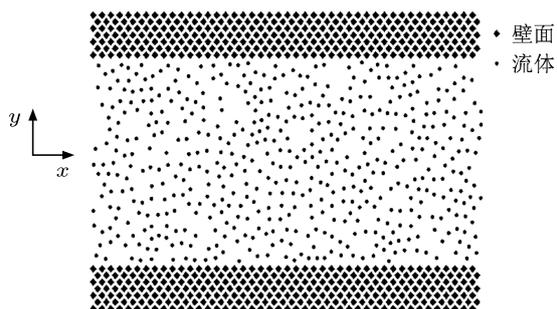


图 6 系统平衡后瞬时原子分布图 ($\epsilon_{LL} = 0.01042$ eV)

为解释上述规律, 本文从近壁面区流体原子的“俘获 - 逃逸”行为角度进行了深入分析. 根据原子物理理论, 在流体原子间相互作用不变的条件下, 较大的固液相互作用强度 (ϵ_{LS}) 将会促使壁面原子将更多的流体原子“俘获”至它的势阱中. 这就意味着, 当增大固、液原子间相互作用强度 ϵ_{LS} , 近壁面区内流体原子的个数就会增加, 从而导致流体的密度分布在近壁面区出现更大的振荡程度. 而本文中, 氩原子间相互作用强度 ϵ_{LL} 的减小表示氩原子间势能作用的减弱, 也就意味着氩原子更容易受到壁面铂原子作用力的影响, 即客观上改变了固、液原子间相互作用强度的力量比重. 这样起初未被“俘获”的氩原子由于热运动等原因进入壁面原子的势阱后, 由于液体原子间相互作用力的减弱就无法再从势阱中成功“逃逸”出来, 这样壁面原子势阱中的氩原子就会逐渐增加. 最终, 由于近壁面区内氩原子的个数增加, 使得流体密度分布在近壁面区振荡程度增大.

3.2 σ_{LL} 对密度振荡的影响

图 7 所示为 $\sigma_{LL} = 5.405$ Å 时通道内流体仿真结果, 其中 7(a) 为通道内流体密度分布曲线, 而图 7(b) 为系统平衡后的瞬时原子分布. 从 7(a) 中可

以发现, 流体在整个通道内呈现了奇怪的“分层现象”^[9], 而图 7(b) 则正好可清楚看出其中的原因. 当 σ_{LL} 较大时, 通道内介质不再以液体流动的形式存在而是已经变成了面心立方结构排列的类似固体状态, 所有液体原子仅在其稳定位置附近做上下、左右振动, 且其振动幅度比固体晶格上的原子大得多. 另外, 该状态下液体原子所形成晶格常数正好约等于此时 σ_{LL} 值 (5.405 Å). 由此可见, 流体原子之间平衡距离 σ_{LL} 影响流体原子的存在形态, 较大的 σ_{LL} 会造成流体原子在整个通道内呈现类似固体式排列.

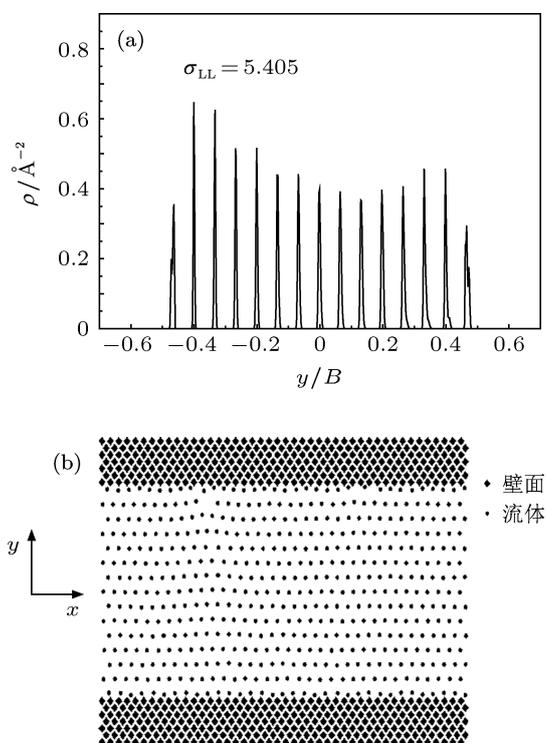


图 7 $\sigma_{LL} = 5.405$ Å 时的仿真结果 (a) 流体密度分布曲线; (b) 系统平衡后瞬时原子分布图

图 8 所示为 $\sigma_{LL} = 3.405$ Å 时通道内流体仿真结果, 其中图 8(a) 为通道内流体密度分布曲线, 而图 8(b) 为系统平衡后的瞬时原子分布. 从图 8(a) 中可以发现, 在整个通道内流体密度呈对称的周期性衰减振荡, 并在主流区逐渐收敛于稳定值. 而从图 8(b) 中则能看出, 液体原子在通道内大部分区域上仍旧为近似随机的均匀分布, 与不同 ϵ_{LL} 时通道内瞬时液体原子的分布规律相一致. 另外还发现, $\sigma_{LL} = 3.405$ Å 时通道内速度分布曲线与图 3 也基本一致.

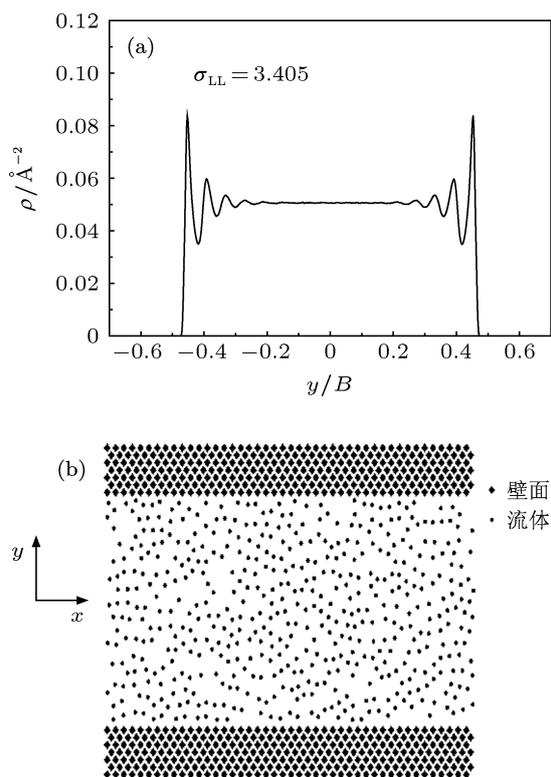


图8 $\sigma_{LL} = 3.405 \text{ \AA}$ 时的仿真结果 (a) 流体密度分布曲线; (b) 系统平衡后的瞬时原子分布图

图9所示为 $\sigma_{LL} = 1.405 \text{ \AA}$ 时通道内流体仿真结果, 其中图9(a)为通道内流体密度分布曲线, 而图9(b)为系统平衡后的瞬时原子分布. 从图9(a)中可以发现, 流体密度分布不再像 $\sigma_{LL} = 3.405 \text{ \AA}$ 时那样会在近壁面区发生振荡, 而是在整个通道内密度几乎均保持定值, 该现象也可从图9(b)来分析: 当 σ_{LL} 较小时, 许多流体原子结合成“团簇”结构一起在通道内运动; 同时通过对不同瞬时原子分布图能进一步看出, 这些“团簇”结构在运动时还会发生解体, 与此同时新的“团簇”又会在通道内的其他位置出现; 另外, 这种“团簇”运动行为会出现在通道内的任何位置, 且伴随整个模拟过程. 本文认为正是由于这种“团簇”结构的存在以及其特殊的运动方式, 最终导致反映原子时均位置信息的流体密度在整个通道内取值不变.

另外, 为展示该“团簇”结构状态时对应的速度分布规律, 这里给出了 $\sigma_{LL} = 1.405 \text{ \AA}$ 时通道内速度分布曲线(图10所示). 从中可以发现, 该特殊状态下, 通道内速度分布仍呈现近似的二次曲线型分布, 但其中包含了较大的高频速度波动信息, 类似于宏观管道内湍流状态下测量点处速度信息中包含有平均速度和脉动速度两部分. 由此作者推测, 一定流动条件下, 微通道内出现的“团簇”结构状态, 可

产生类似湍流涡结构的掺混和输运作用, 使得微流动内流速、密度等分布更趋于平均.

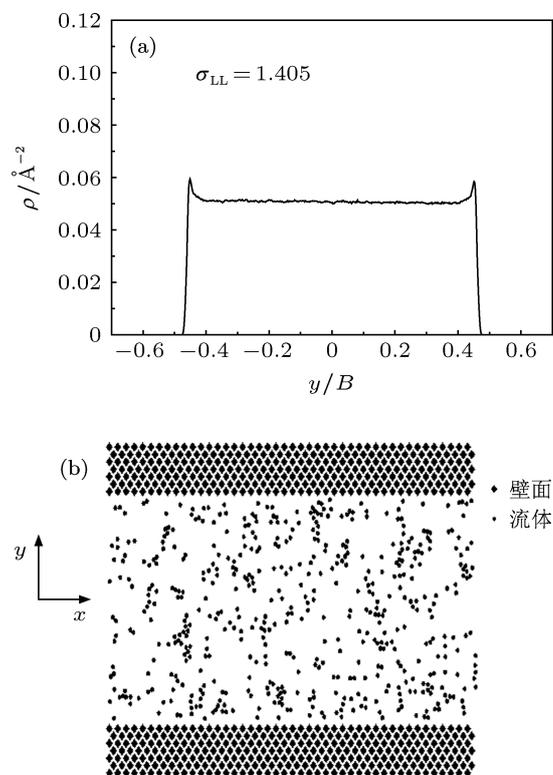


图9 $\sigma_{LL} = 1.405 \text{ \AA}$ 时的仿真结果 (a) 流体密度分布曲线; (b) 系统平衡后的瞬时原子分布图

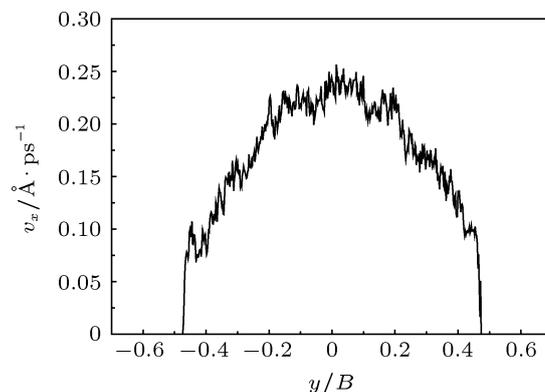


图10 $\sigma_{LL} = 1.405 \text{ \AA}$ 时通道内速度分布曲线

3.3 σ_{LS} 对密度振荡的影响

图11为不同 σ_{LS} 时流体的密度分布曲线图. 从中可见, σ_{LS} 的变化仍然不影响主流区流体密度的取值, 但 σ_{LS} 越大近壁面区流体的密度振荡就越剧烈. 同时由于 σ_{LS} 反映壁面原子和流体原子之间的平衡距离, 因此, σ_{LS} 越大流体密度分布的起点离壁面就越远. 并且考察三种不同 σ_{LS} 取值时, 系统

平衡后流动系统的瞬时原子分布与速度分布后还发现, 三种 σ_{LS} 取值时系统的瞬时原子分布图均与

图 6 相似, 而速度分布则与图 3 相似.

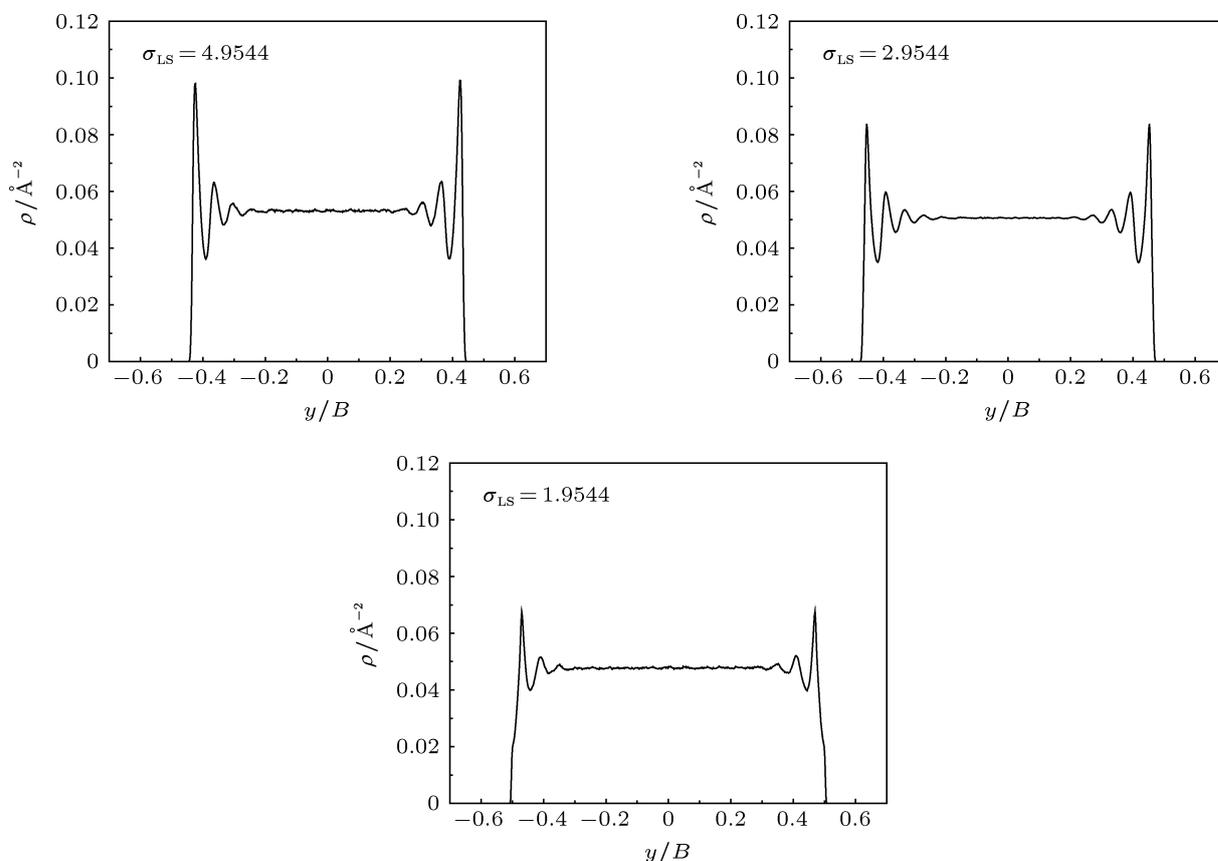


图 11 不同 σ_{LS} 时流体的密度分布

4 结论

1) 随流体原子间相互作用强度 ϵ_{LL} 的减小, 流体原子间相互作用逐渐减弱并导致流体原子从壁面原子的势阱中“逃逸”的能力降低, 并最终导致近壁面区流体密度分布振荡程度逐渐增大.

2) 流体原子间平衡距离 σ_{LL} 对通道内流体原子的存在形态和密度分布均有着重大影响. 较大的 σ_{LL} 会造成流体原子在整个通道内呈现面心立方结构的类似固体排列, 致使密度分层分布; 而较小的 σ_{LL} 会使得流体原子呈现不断变化的“团簇”结构, 并导致通道内流体密度恒定.

3) 壁面原子和流体原子间平衡距离 σ_{LS} 的变

化不影响主流区流体密度值, 但 σ_{LS} 越大近壁面区流体密度振荡就越剧烈, 且流体密度分布的起点离壁面也越远.

4) 随着流体原子间平衡距离等物理参数的变化, 本文发现微管道内流动中流体原子瞬时位置存在着近似随机的均匀分布和“团簇”结构分布两种典型状态, 且后者可产生类似湍流结构的掺混和输运作用.

另外, 由于 LJ 势能的表达式中原子之间平衡距离 σ 在其引力项和斥力项中都存在, 所以它的变化对 LJ 势能函数的影响要比特征能量 ϵ 复杂得多. 因此, 原子平衡距离 σ 对流体密度分布的影响机制还有待于进一步研究.

- [1] Thompson P A, Robbins M O 1990 *Phys. Rev. A* **41** 6830
- [2] Thompson P A, Troian S M 1997 *Nature* **389** 360
- [3] Barrat J, Bocquet L 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 4671
- [4] Travis K P, Gubbins K E 2000 *J. Chem. Phys.* **112** 1984
- [5] Soong C Y, Yen T H, Tzeng P Y 2007 *Phys. Rev. E* **76** 036303
- [6] Song F Q, Wang J D 2010 *J. Hydrodyn.* **22** 513
- [7] Xin Y, Zhang L T 2010 *Phys. Rev. E* **82** 056313
- [8] Zhang H W, Zhang Z Q, Ye H F 2012 *Microfluid Nanofluid* **12** 107
- [9] Cao B Y, Chen M, Guo Z Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5305 (in Chinese)
[曹炳阳, 陈民, 过增元 2006 物理学报 **55** 5305]
- [10] Gu X K, Chen M 2010 *J. Engin. Thermophys.* **31** 1724 (in Chinese)
[顾晓坤, 陈民 2010 工程热物理学报 **31** 1724]
- [11] Cao B Y 2005 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Tsinghua University) (in Chinese) [曹炳阳 2005 博士学位论文 (北京: 清华大学)]
- [12] Xiang H, Jiang P X, Liu Q X 2008 *Progress in Natural Science* **18** 1346 (in Chinese) [向恒, 姜培学, 刘其鑫 2008 自然科学进展 **18** 1346]
- [13] Travis K P, Todd B D, Evans D J 1997 *Physica A* **240** 315
- [14] Travis K P, Gubbins K E 2000 *J. Chem. Phys.* **113** 1984
- [15] Evans D J, Morriss G P 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 2172

Simulation studies on fluid density distribution of micro-flows in a nano-channel*

Hu Hai-Bao[†] Bao Lu-Yao Huang Su-He

(College of Marine, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(Received 17 January 2013; revised manuscript received 27 February 2013)

Abstract

The flow in microchannel involves many microscale effects, because of its large ratio of superficial area to volume. And it further causes the density profiles of flow in microchannel to be greatly different from in the macro-channel. In this paper we investigate the effects of three factors (ϵ_{LL} , σ_{LL} , σ_{LS}) on density profile of micro-flow via the Poiseuille flow in a nanochannel using none-equilibrium molecular dynamics simulation method. In our study, we selected NVE as the statical ensemble, LJ/126 model as the potential energy function. We also adopt the Rigid-atom model to describe the wall and the temperature thermostat through using the time/rescale methods. The motion equations are solved using Verlet algorithm. The results show that as the interaction between flow atoms decreases, the oscillation degree of density profiles near the wall increases. The balance distance (σ_{LL}) between flow atoms affects the existence state and density profiles of flow in the micro channel: the greater σ_{LL} causes the flow atoms to be arranged as the fcc structure liking a solid, while smaller σ_{LL} results in the flow atoms moving as a changeable "cluster". The balance distance (σ_{LS}) between wall atoms and flow atoms also has a significant influence on flow density. As σ_{LS} increases, the oscillation degrees of density profile near the wall and the distance between the starting point of density profile and wall increase. Besides, we analyze the mechanism of effects of the interaction between the flow atoms on density distribution based on the "capture-escape" behavior of atoms adjoining the wall.

Keywords: nanochannel, micro-flow, density distribution, molecular dynamics simulation

PACS: 47.61.-k, 83.50.Ha, 83.10.Rs

DOI: 10.7498/aps.62.124705

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51109178), the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20116102120009), and the Open Project of State Key Laboratory of Solid Lubrication, China (Grant No. 1210).

[†] Corresponding author. E-mail: huhaiobao@nwpu.edu.cn