

# 粗糙纳通道内流体流动与传热的分子动力学模拟研究\*

张程宾 许兆林 陈永平†

(能源热转换及其过程测控教育部重点实验室, 东南大学能源与环境学院, 南京 210096)

(2014年4月24日收到; 2014年5月25日收到修改稿)

为研究粗糙表面对纳尺度流体流动和传热及其流固界面速度滑移与温度阶跃的影响, 本文建立了粗糙纳通道内流体流动和传热耦合过程的分子动力学模型, 模拟研究了粗糙通道内流体的微观结构、速度和温度分布、速度滑移和温度阶跃并与光滑通道进行了比较, 并分析了固液相互作用强度和壁面刚度对界面处速度滑移和温度阶跃的影响规律. 研究表明, 在外力作用下, 纳通道主流区域的速度分布呈抛物线分布, 由于流体流动导致的黏性耗散使得纳通道内的温度分布呈四次方分布. 并且, 在固体壁面处存在速度滑移与温度阶跃. 表面粗糙度的存在使得流体剪切流动产生了额外的黏性耗散, 使得粗糙纳通道内的流体速度水平小于光滑通道, 温度水平高于光滑通道, 并且粗糙表面的速度滑移与温度阶跃均小于光滑通道. 另外, 固液相互作用强度的增大和壁面刚度的减小均可导致界面处速度滑移和温度阶跃程度降低.

**关键词:** 速度滑移, 温度阶跃, 流固界面, 粗糙度

**PACS:** 47.61.-k, 68.08.-p, 68.35.Ct

**DOI:** 10.7498/aps.63.214706

## 1 引言

近年来, 表面对微纳结构内流体流动和传热性能的影响机理研究日益受到人们的重视<sup>[1-6]</sup>. 在微纳结构中, 物质输运和能量传递均发生在一个受限的微小空间中, 由于微纳尺度效应导致出现了许多不同于常规尺度的流体流动和传热现象<sup>[7-11]</sup>. 流体在纳通道中流动时, 流固界面处会出现速度滑移<sup>[12-16]</sup>; 而当热流通过流固界面时, 界面处则会出现温度阶跃<sup>[17-20]</sup>.

现有研究表明, 流固界面的速度滑移和温度阶跃主要取决于固液相互作用强度、流固密度比、固体结构和表面粗糙度等因素. Thompson等<sup>[12]</sup>和Priezjev等<sup>[21]</sup>基于纳通道内的Couette流研究了固液相互作用强度和流固密度比等因素对界面处速度滑移的影响规律. 研究表明, 固液相互作用强度增强或者流固密度比增大将导致界面的速度

滑移程度减少, 甚至出现负滑移. Kim等<sup>[22]</sup>通过对两平行平板间热传导过程的分子动力学模拟, 研究了固液相互作用强度、热振荡频率和壁面温度等因素对界面处温度阶跃的影响. Li等<sup>[23]</sup>则通过纳通道内Poiseuille流的分子动力学模拟研究了固液相互作用强度、壁面温度和外部驱动力等因素对界面热阻的影响. Soong等<sup>[24]</sup>研究了晶格平面等因素对纳通道内流体流动的影响机理, 发现固体结构对界面处流体速度滑移有着显著的影响.

对于纳尺度流体流动与传热过程, 通道固体表面上的速度滑移和温度阶跃从本质上讲是受液体和固体之间的相互作用所支配. 实际上, 固体表面即使在原子尺度下也不可能是完全光滑的. 作为固体表面一重要的特性参数, 表面粗糙分布将直接影响着固-液界面速度滑移和温度阶跃特性. Niavarani和Priezjev<sup>[25]</sup>研究了粗糙表面上聚合物滑移流动的流变学特性, 研究表明, 当粗糙表面的波长大于聚合物链回转半径时, 有效滑移长度随着

\* 国家自然科学基金(批准号: 11190015, 51306033)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: ypchen@seu.edu.cn

粗糙曲线波动幅度的增加而单调减小. Sofos 等 [26] 研究了表面粗糙对纳通道内液体流动的影响, 研究表明, 粗糙凹坑内流体原子运动能力受到削弱, 导致了粗糙表面速度滑移减少. Yang 等 [27] 利用分子动力学模拟计算了表面粗糙度对界面处速度滑移的影响, 研究发现表面粗糙度会抑制界面处流体的速度滑移. Schmatko 等 [28] 通过实验研究了表面粗糙度对界面处速度滑移的影响, 得到了与 Yang 等 [27] 相同的结论, 即增大粗糙高度会减小界面处的速度滑移程度. 粗糙表面对界面传热及温度阶跃的影响研究则相对较少. Wang 和 Koblinski [29] 研究了表面的润湿性和粗糙度对固液界面热传导的影响, 研究表明, 对于粗糙固液界面, 表面亲水性转换将导致界面热阻出现突变.

已有的分子动力学模拟研究对于界面速度滑移和温度阶跃规律的分析揭示大多是分开独立进行的, 未将纳通道内流体流动与传热耦合过程加以充分考虑. 在研究流固界面速度滑移时, 流体多采用热浴维持在恒定温度的条件 [12]; 在研究流固界面温度阶跃时, 主要采用两受限平板间静止流体的热传导模型 [29] 和非静止流体 Couette 流动 [17,19], Poiseuille 流动 [18,20] 模型. 实际上, 在微结构中, 流体流动与传热总是耦合进行的, 因微尺度效应导致速度滑移和温度阶跃共同存在于流固界面处, 并对纳通道内的流体流动和传热产生重要影响.

综上所述, 尽管针对纳通道内流体流动与热量传递耦合过程及其伴随的速度滑移和温度阶跃的理论研究已有一定数量的研究报道, 但是表面粗糙对纳通道内流体流动与热量传递耦合过程的影响作用机理尚不明晰. 考虑到实际的通道表面结构都是粗糙的, 粗糙度的存在使得流固相互耦合作用、

纳通道内流体流动与传热耦合过程更为复杂. 为此, 本文建立了粗糙纳通道内流体流动与传热耦合过程的分子动力学模型, 模拟研究了粗糙纳通道内流体的速度分布、温度分布和密度分布以及流固界面处的速度滑移和温度阶跃并与光滑纳通道进行比较, 旨在揭示粗糙表面结构对纳通道流体流动与传热耦合过程及其界面速度滑移和温度阶跃的影响.

## 2 分子动力学模拟

本文模拟的纳通道内液体流动系统如图 1 所示. 通道尺寸为  $L_x \times L_y \times L_z = 22\sigma \times 21\sigma \times 6\sigma$ , 液体处于两块平行固体壁面之间. 上下两固体壁面均为粗糙结构, 两壁面间隔  $H = 15\sigma$ , 固体壁面是由原子按照面心立方结构 (fcc) 组成的, 壁面厚度为  $3\sigma$ . 液体在外力  $F_e$  驱动下沿  $x$  方向流动.  $x$  和  $z$  方向均采用周期性边界条件.

液体分子之间的相互作用采用 Lennard-Jones(LJ) 势能模型

$$V(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

其中,  $r$  为分子间的距离,  $\epsilon$  为势能参数,  $\sigma$  为距离参数. 固体原子与液体分子之间的相互作用仍采用 Lennard-Jones (LJ) 势能模型. 数值计算中, 液体分子之间的势能参数取  $\epsilon_{ll} = \epsilon$ . 固体原子与液体分子之间的势能参数  $\epsilon_{ls}$  分别取  $0.1\epsilon$ ,  $0.5\epsilon$ ,  $\epsilon$ ,  $1.5\epsilon$  和  $2.0\epsilon$  来研究固液相互作用强度对界面处速度滑移与温度阶跃的影响. 液体分子之间和固液分子之间的距离参数均取为  $\sigma$ . 为减少计算量, 取截断半径  $r_c = 2.5\sigma$ .

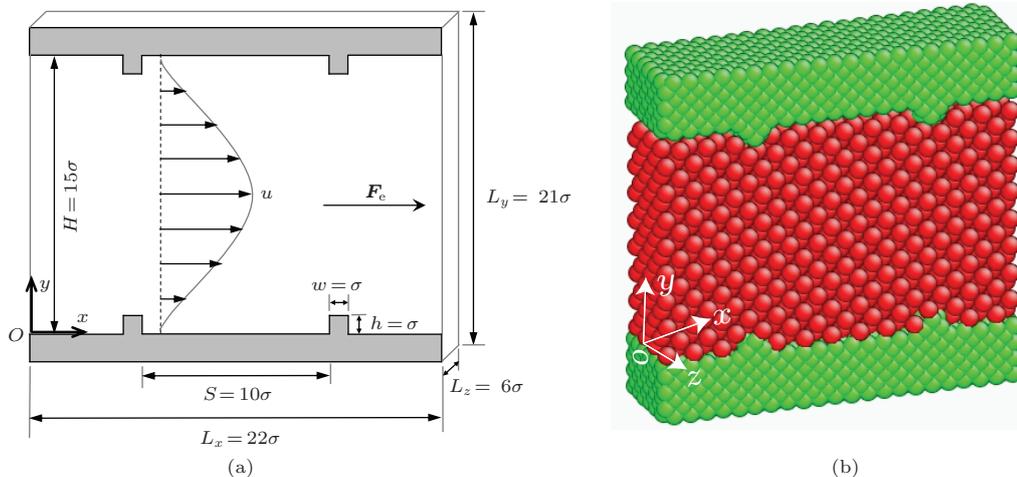


图 1 (网刊彩色) 粗糙纳通道示意图 (a) 粗糙结构; (b) 模拟系统

在模拟过程中, 流体密度设为  $\rho_l \sigma^3 = 0.8$ , 固体壁面密度设为  $\rho_s = 5\rho_l$ ,  $\rho_l$  为流体数密度. 需要指出的是, 固体的高密度是由于较小 fcc 晶格常数导致的较多壁面原子数所引起. 流体晶格常数为 1.71, 固体壁面晶格常数为 1. 在模拟中, 光滑纳通道内的流体分子数为 1456 个, 固体分子数为 3696 个; 粗糙纳通道内的流体原子数为 1428 个, 固体原子数为 3840 个. 固体壁面原子通过弹簧力作用束缚在初始位置, 弹簧力  $\mathbf{F} = -K[\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_{eq}]$ , 其中  $\mathbf{r}(t)$  为固体壁面分子在  $t$  时刻的矢量位置,  $\mathbf{r}_{eq}$  为固体壁面原子的初始矢量位置,  $K$  为固体壁面的刚度,  $K$  值大小反映了固体壁面原子热振动程度, 决定了固体壁面特性 [30].

采用 Velocity-Verlet 算法求解粒子的运动方程, 时间步长取为  $\Delta t = 0.005\tau$ , 其中  $\tau = (m \cdot \sigma^2 \cdot \epsilon^{-1})^{1/2}$  为 LJ 势能的特征时间. 首先, 在微正则系综 (nve) 下对模拟系统的初始结构进行弛豫, 温度为  $T = 0.7\epsilon \cdot k_B^{-1}$ , 经过 100 万步后, 模拟系统达到平衡状态. 然后采用 Nose-Hoover 热浴将上、下壁面温度均维持在  $T = 0.7\epsilon \cdot k_B^{-1}$ . 接着对液体分子施加  $x$  方向的外力  $\mathbf{F}_e$  来驱动其在通道内形成流动,  $\mathbf{F}_e$  大小为  $0.04\sigma \cdot \epsilon^{-1}$ . 经过约 200 万步后, 模拟系统达到热稳定状态后, 继续模拟 400 万步并统计结果.

在本文中, 纳通道内流体温度分布是通过将模拟盒沿  $y$  向且平行于  $x-z$  平面平均分为  $N_{bin}$  层切片来统计计算, 其中第  $k$  ( $1 \leq k \leq N_{bin}$ ) 层切片的流体温度计算式为

$$T_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^{N_k} \frac{2}{3k_B} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} m (v_{n,i} - \bar{v}_i)^2, \quad (2)$$

式中,  $N_k$  为第  $k$  层切片内流体分子数,  $k_B$  为 Boltzmann 常数,  $m$  为流体分子的质量,  $v_{n,i}$  为第  $n$  个流体分子在  $i$  ( $= x, y, z$ ) 方向的速度,  $\bar{v}_i$  为宏观流体的平均速度. 在统计计算通道内流体速度和温度分布时, 将整个通道内流体区域均匀划分为 26 层; 在统计计算通道内流体密度分布时, 将整个通道内流体区域均匀划分为 183 层.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 分子运动轨迹

为分析粗糙壁面与液体分子之间的相互作用, 图 2 给出了粗糙纳通道内液体分子的运动轨迹. 由图可知, 粗糙壁面附近的液体分子 (例如分子 1-2, 5-6) 会陷在粗糙表面的凹缝间隙里而难于摆脱壁

面的束缚, 这些分子运动缓慢, 运动距离短. 离开壁面一定距离的液体分子 (例如分子 3) 具有一定的运动能力, 运动范围较粗糙壁面附近的液体分子大. 而距离壁面较远的液体分子 (例如分子 4) 受到壁面的束缚较小, 能够在通道内随机运动.

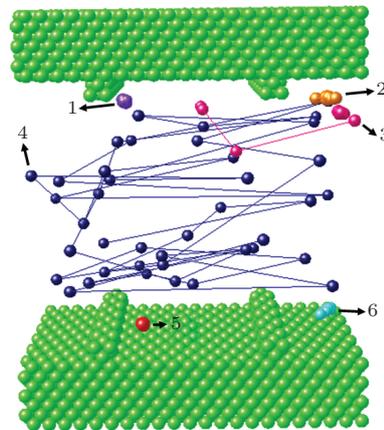


图 2 (网刊彩色) 粗糙纳通道内液体分子的运动轨迹 ( $\epsilon_{ls} = 0.5\epsilon$ ,  $K = 1000\epsilon \cdot \sigma^{-2}$ )

#### 3.2 液体微观结构

纳通道内的流体密度分布所呈现的组织形态直接体现了流体微观结构特征. 光滑通道和粗糙通道内垂直于固体壁面的流体密度分布如图 3 所示. 由图可知, 无论光滑通道还是粗糙通道, 在近壁面区域内, 由于表面效应的存在使得流体密度分布均出现了有序振荡现象, 表明流体产生了分层分布 [31], 液体密度是不均匀的. 而在通道中心的主流区, 流体受壁面的影响较小而趋近于宏观流体密度.

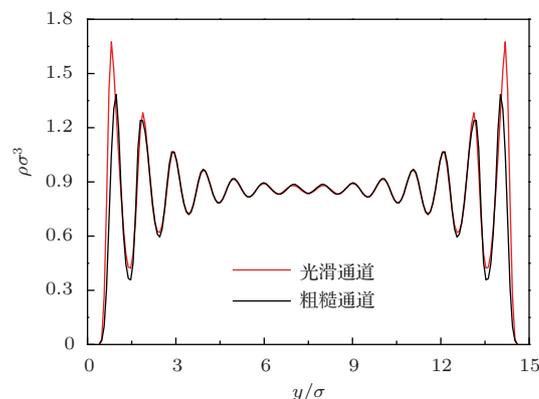


图 3 (网刊彩色) 纳通道内流体的密度分布 ( $\epsilon_{ls} = 0.5\epsilon$ ,  $K = 500\epsilon \cdot \sigma^{-2}$ )

此外, 固体表面粗糙度的存在影响了近壁面流体的微观结构. 如图所示, 光滑和粗糙通道中壁面

附近的密度波峰存在差别,光滑壁面的流体密度要大于粗糙壁面的流体密度.在非常靠近壁面时,由于固体分子强烈的斥力作用,流体分布难以到达这个区域,该区域厚度大概为 $0.4\sigma$ .表面粗糙元的存在(高度为 $\sigma$ )造成粗糙元附近 $0.4\sigma$ 距离内不会有原子,这是使得粗糙壁面附近的流体密度低于光滑壁面的主要原因.

### 3.3 速度分布和温度分布

表面粗糙度的存在导致近壁面区域内流体密度分布产生了变化,这将影响固体壁面与液体之间的动量传递.图4给出了光滑和粗糙通道内流体沿 $x$ 方向流动的速度分布,由图可知,在通道中心的主流区,无论光滑还是粗糙通道,流体的速度分布仍呈抛物线分布,这与基于连续性假设求解Navier-Stokes方程得到的Poiseuille流动的速度分布是一致的.在壁面处,流体速度则存在滑移.

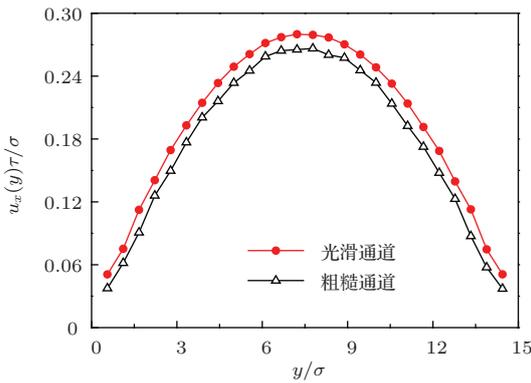


图4 (网刊彩色) 纳通道内流体的速度分布 ( $\epsilon_{ls} = 0.5\epsilon$ ,  $K = 1000\epsilon \cdot \sigma^{-2}$ )

从图中还可以看出,粗糙纳通道内的流体速度水平要小于光滑通道内的流体速度.这主要是因为表面粗糙度的存在使得流体剪切流动产生了额外的黏性耗散.此外,表面粗糙度的存在使界面处速度滑移减小,这主要是由于粗糙表面的作用使得流体分子难以从粗糙凹缝间隙里逃脱进入主流区域.

流体在外力作用下沿纳通道流动时,黏性摩擦会产生热量,这些热量将从流固界面传递到固体中.纳通道内流体温度分布的不均匀性现象反映了纳通道内流体剪切流动产生的黏性耗散对流体传热的影响.图5给出了光滑和粗糙纳通道内流体的温度分布.在通道中心区域的流体温度呈四次方分布.粗糙通道内流体温度分布拟合函数为 $k_B T(y)/\epsilon = 1.0143 + 0.0049y + 9.38 \times 10^{-4}y^2 -$

$1.58 \times 10^{-4}y^3 + 4.92 \times 10^{-6}y^4$ ,光滑通道内温度分布则为 $k_B T(y)/\epsilon = 0.9566 + 0.0067y + 4.14 \times 10^{-4}y^2 - 1.14 \times 10^{-4}y^3 + 3.82 \times 10^{-6}y^4$ .另外,在壁面处,由于流固界面处存在界面热阻从而产生温度阶跃现象.

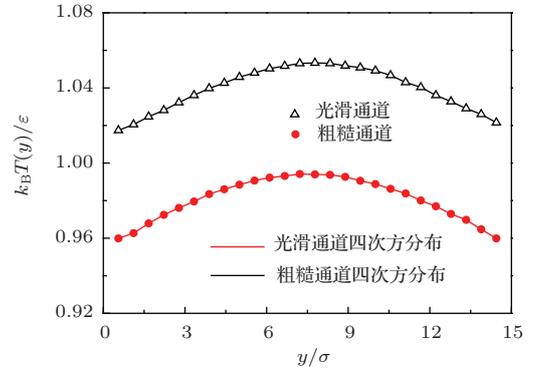


图5 (网刊彩色) 纳通道内流体的温度分布 ( $\epsilon_{ls} = 0.5\epsilon$ ,  $K = 1000\epsilon \cdot \sigma^{-2}$ )

由图中可看出,纳通道内流体的温度呈现中心区域高而固壁附近温度低的现象,这是主要因为纳通道内流体间的黏性摩擦以及界面处流体和壁面之间的摩擦会产生热量,使得流体中心区域的温度升高,产生的热量通过流固界面进入恒温壁面.并且,粗糙通道内流体的整体温度水平高于光滑通道,这是因为粗糙表面的存在增强了近壁面处液体的不规则流动,使得流体和壁面之间的摩擦产生更多的热量,进一步提升了通道内流体温度水平.

纳通道内流体剪切流动产生的黏性耗散可导致流体温度提升,平衡后纳通道内流体温度整体水平由驱动力、固液相互作用强度、表面粗糙度、通道壁面温度等因素决定,并且在一定条件下温度的提升幅度可能非常明显.本文中,在图5所示的条件下,平衡后流体温度水平比固体壁面高约 $0.3\epsilon k_B^{-1}$ .在前人研究中,也有多个高温差报道,比如文献[20]所报道的纳通道内Poiseuille流动平衡后流体温度与固体壁面温度之间的最大差距可达 $0.5\epsilon k_B^{-1}$ ;文献[18]中纳通道内Poiseuille流动平衡后流体温度与固体壁面温度之间的最大差距则高达250 K.

### 3.4 速度滑移和温度阶跃

流固界面处速度滑移程度通常采用速度滑移长度 $l_s$ 加以描述.根据线性Navier边界模型[30],速度滑移长度 $l_s$ 定义为

$$l_s = \frac{u_s}{\partial u / \partial z|_s}, \quad (3)$$

式中,  $u_s$  是壁面处流体的速度,  $(\partial u/\partial z)|_s$  是壁面处流体的速度梯度. 当  $l_s > 0$  时, 为滑移边界条件; 当  $l_s = 0$  时, 为无滑移边界条件; 当  $l_s < 0$  时, 为锁定边界条件. 如图 6(a) 所示, 拟合通道中心区域流体的速度分布并外推至壁面速度处, 所得位置与粗糙壁面中心线的距离即为速度滑移长度  $l_s$ .

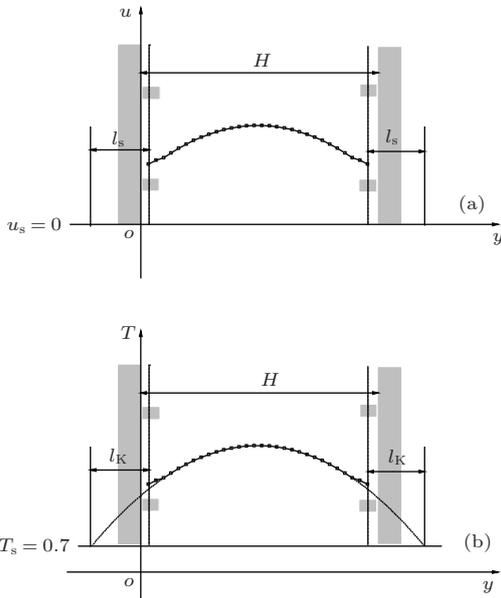


图 6 速度滑移和温度阶跃的定量描述 (a) 速度滑移长度; (b) 温度阶跃长度

与速度滑移长度的定义类似, 可以采用温度阶跃长度  $l_K$  来量化温度阶跃程度, 温度阶跃长度  $l_K$  定义为<sup>[17]</sup>

$$l_K = \frac{\Delta T}{\partial T/\partial z|_s}, \quad (4)$$

式中,  $\Delta T = T_1 - T_s$  为固体壁面处的温度阶跃,  $(\partial T/\partial z)|_s$  为固体壁面处流体的温度梯度. 如图 6(b) 所示, 类似于速度滑移长度  $l_s$ , 可拟合流体中心区域的温度分布并外推至壁面温度处, 所得位置与粗糙壁面中心线的距离即为温度阶跃长度  $l_K$ .

### 3.4.1 固液相互作用强度的影响

固液相互作用强度决定了固体原子与液体分子之间的相互作用, 它不但会影响流固界面处的动量与能量传递, 而且会改变近壁面区域内流体分子的分布状态<sup>[31]</sup>. 图 7 给出了壁面刚度一定条件时, 固液相互作用强度  $\epsilon_{ls}$  对光滑和粗糙通道内的速度滑移长度  $l_s$  和温度阶跃长度  $l_K$  的影响. 由图可知, 不管固体壁面是光滑还是粗糙,  $l_s$  和  $l_K$  都随着  $\epsilon_{ls}$  的增大而减小. 当  $\epsilon_{ls}$  较小时, 界面处的速度滑移和温度阶跃比较明显, 当  $\epsilon_{ls}$  较大时, 界面处的速度滑移会出现负值, 形成锁定边界条件. 这是因为,  $\epsilon_{ls}$

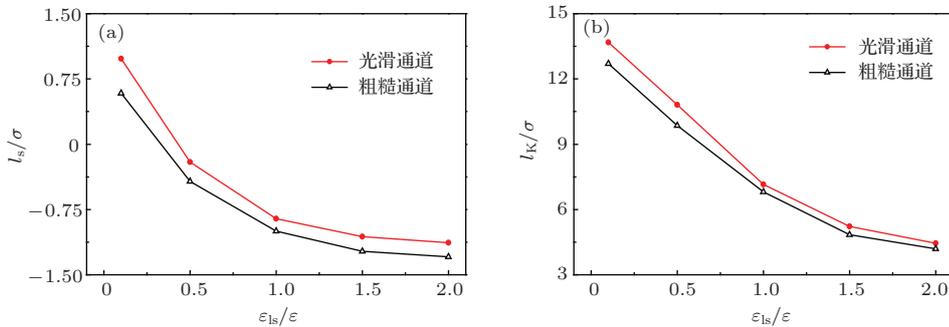


图 7 (网刊彩色) 固液相互作用强度对速度滑移和温度阶跃的影响 ( $K = 1000\epsilon \cdot \sigma^{-2}$ ) (a) 速度滑移; (b) 温度阶跃

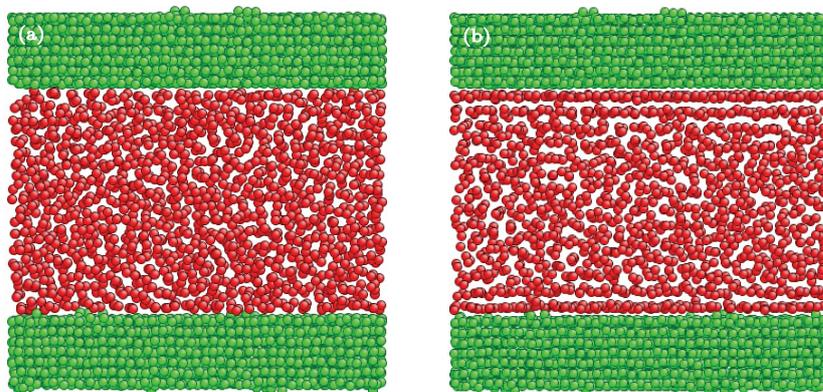


图 8 (网刊彩色) 光滑纳通道内流体分子分布 (a)  $\epsilon_{ls} = 0.1\epsilon$ ; (b)  $\epsilon_{ls} = 2\epsilon$

较小时, 流体分子受壁面影响较小, 难以被壁面束缚住, 如图 8 (a) 所示; 而  $\epsilon_{1s}$  较大时, 临近壁面的液体分子被限制在壁面附近, 形成类似壁面的层状结构分布, 如图 8 (b) 所示, 此时界面处动量和能量传递时的阻力较小, 速度滑移与温度阶跃较小.

此外, 由图 7 还可以看出, 相比于光滑通道, 粗糙通道内壁面处的速度滑移和温度阶跃均较小. 这是由于粗糙度的存在使得通道表面凹坑内的流体分子的运动能量被削弱, 难以摆脱固体壁面的束缚而进入流体中心区域. 这使得流体分子与固体壁面之间的相互作用时间增加, 增强了界面处动量和能量的传递, 因此, 速度滑移与温度阶跃较小.

### 3.4.2 壁面刚度的影响

流固界面处的动量与能量传递取决于流固分子之间的碰撞, 而壁面刚度决定了固体壁面原子热振动频率, 因此改变壁面刚度会影响流固界面处的动量与能量传递. 图 9 给出了壁面刚度  $K$  对速度滑移长度  $l_s$  和温度阶跃长度  $l_K$  的影响. 由图可知, 光滑和粗糙通道内的  $l_s$  和  $l_K$  都随着  $K$  的增大而增大. 这是因为, 固体壁面刚度较大时, 固体原子是更难于在其晶格位置上振动, 难以有效地在界面处发生动量和能量传递, 因而界面的速度滑移和温度阶跃

均较大. 此外, 壁面粗糙度的存在同样会减小界面处的速度滑移和温度阶跃.

## 4 结 论

本文对粗糙纳通道内的流体流动与传热耦合过程进行了非平衡分子动力学模拟, 研究了粗糙通道内分子运动轨迹、密度分布、速度分布、温度分布、速度滑移和温度阶跃并与光滑通道进行了比较, 揭示了粗糙表面结构对纳通道流体流动与传热及其界面速度滑移和温度阶跃的影响规律. 通过分子动力学模拟研究, 得到以下主要研究结论:

1) 粗糙表面的存在对通道内液体分子运动及其微观结构有重要影响. 粗糙壁面附近的液体分子运动能力弱, 难以摆脱粗糙表面凹缝间隙的束缚而进入液体的中心区域, 但距离壁面较远的液体分子则运动能力强, 可在通道内随机运动. 流体密度在近壁面区域内出现有序振荡, 粗糙度的存在使得固体壁面附近流体密度的振荡幅度减小.

2) 在外力作用下纳通道内流体流动中心区域的速度分布呈抛物线分布, 由于流体流动导致的黏性耗散使得纳通道内的温度分布也呈四次方分布. 在固体壁面处存在速度滑移与温度阶跃. 并且, 表面粗糙度的存在使得流体剪切流动产生了额外的黏性耗散, 使得粗糙纳通道内的流体速度水平小于光滑通道, 温度水平高于光滑通道, 并且粗糙表面的速度滑移与温度阶跃均小于光滑通道.

3) 固液相互作用强度和壁面刚度对界面速度滑移和温度阶跃有重要影响. 固液相互作用强度的增大和壁面刚度的减小均可导致界面处速度滑移和温度阶跃程度降低.

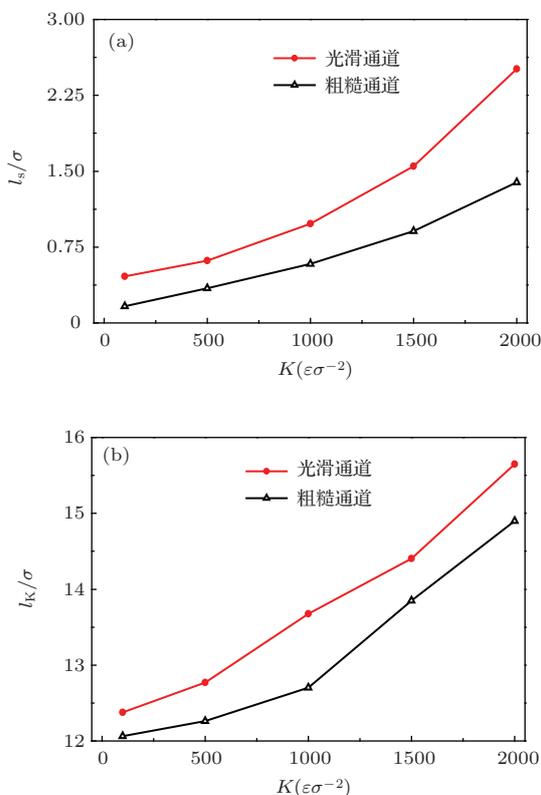


图 9 (网刊彩色) 壁面刚度对速度滑移和温度阶跃的影响 ( $\epsilon_{1s} = 0.1\epsilon$ ) (a) 速度滑移; (b) 温度阶跃

## 参考文献

- [1] Darhuber A A, Troian S M 2005 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **37** 425
- [2] Cracknell R F, Nicholson D, Quirke N 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 2463
- [3] Akhmatskaya B, Todd D, Daivis P J, Evans D J, Gubbins, K E, Pozhar L A 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 4684
- [4] Megahed A M 2013 *Chin. Phys. B* **22** 094701
- [5] Sun D K, Xiang N, Jiang D, Chen K, Yi H, Ni Z H 2013 *Chin. Phys. B* **22** 114704
- [6] Chen Y Y, Yi H H, Li H B 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 184
- [7] Huang Q G, Pan G, Song B W 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 054701 (in Chinese) [黄桥高, 潘光, 宋保维 2014 物理学报 **63** 054701]

- [8] Chen Y P, Zhang C B, Shi M H, Peterson G P 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 074102
- [9] Yan H, Zhang W M, Hu K M, Liu Y, Meng G 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 174701 (in Chinese) [闫寒, 张文明, 胡开明, 刘岩, 孟光 2013 物理学报 **62** 174701]
- [10] Xie H, Liu C, Liu B W 2009 *Acta Phys.-Chim. Sin.* **25** 994 (in Chinese) [解辉, 刘朝, 刘彬武 2009 物理化学学报 **25** 994]
- [11] Ohara T, Torii D 2005 *J. Chem. Phys.* **122** 214717
- [12] Thompson P A, Troian S M 1997 *Nature* **389** 360
- [13] Cieplak M, Koplek J, Banavar J R 2001 *Phys. Rev. L* **86** 803
- [14] Barrat J L, Bocquet L 1999 *Phys. Rev. L* **82** 4671
- [15] Pahlavan A A, Freund J B 2011 *Phys. Rev. E* **83** 021602
- [16] Nagayama G, Cheng P 2004 *Int. J. Heat Mass Transf.* **47** 501
- [17] Kim B H, Beskok A, Cagin T 2008 *Microfluid. Nanofluid.* **5** 551
- [18] Liu C, Fan H B, Zhang K, Yuen M M F, Li Z G 2010 *J. Chem. Phys.* **132** 094703
- [19] Sun J, Wang W, Wang H S 2013 *J. Chem. Phys.* **138** 234703
- [20] Sun J, Wang W, Wang H S 2013 *Phys. Rev. E* **87** 023020
- [21] Priezjev N V 2007 *Phys. Rev. E* **75** 051605
- [22] Kim B H, Beskok A, Cagin T 2008 *J. Chem. Phys.* **129** 174701
- [23] Li Z G 2009 *Phys. Rev. E* **79** 026312
- [24] Soong C Y, Yen T H, Tzeng P Y 2007 *Phys. Rev. E* **76** 036303
- [25] Niavarani A, Priezjev N V 2008 *J. Chem. Phys.* **129** 144902
- [26] Sofos F D, Karakasidis T E, Liakopoulos A 2009 *Phys. Rev. E* **79** 026305
- [27] Yang S C 2006 *Microfluid. Nanofluid.* **2** 501
- [28] Schmatko T, Hervet H, Leger L 2006 *Langmuir* **22** 6843
- [29] Wang Y, Keblinski P 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 073112
- [30] Priezjev N V 2007 *J. Chem. Phys.* **127** 144708
- [31] Thompson P A, Robbins M O 1990 *Phys. Rev. A* **41** 6830

# Molecular dynamics simulation on fluid flow and heat transfer in rough nanochannels\*

Zhang Cheng-Bin Xu Zhao-Lin Chen Yong-Ping<sup>†</sup>

(Key Laboratory of Energy Thermal Conversion and Control, Ministry of Education, School of Energy and Environment, Southeast University, Nanjing 210096, China)

( Received 24 April 2014; revised manuscript received 25 May 2014 )

## Abstract

Fluid flow and heat transfer in a microstructure may depart from the traditional behavior due to the scale effect, and its velocity slip and temperature jump will occur at the fluid-solid interface. A molecular dynamics model of coupled fluid flow and heat transfer in rough nanochannels is developed to investigate the effect of surface roughness on nanoscale fluid flow and heat transfer, as well as velocity slip and temperature jump at the fluid-solid interface. The fluid microscopic structure, velocity and temperature distributions, interfacial velocity slip and temperature jump in a rough nanochannel are evaluated and compared with the corresponding smooth nanochannel. Effects of solid-liquid interaction and wall stiffness on the velocity slip and temperature jump are analyzed. Results indicate that the velocity of the fluid flow under an external force in a nanochannel in a bulk region is of a parabolic distribution, and the viscous dissipation due to shear flow induces the fourth-order temperature profile in the nanochannel. And the velocity slip and temperature jump will occur at the fluid-solid interface. The presence of roughness may introduce an extra viscous dissipation in shear flow, leading to a reduction of overall velocity and an increase in temperature in the nanochannel when compared with the smooth nanochannel. In addition, the degree of velocity slip and temperature jump at a rough liquid-solid interface is smaller than that at a smooth interface. In particular, the increase in fluid-solid interaction strength and reduction in wall stiffness will lead to a small velocity slip and temperature jump.

**Keywords:** velocity slip, temperature jump, fluid-solid interface, roughness

**PACS:** 47.61.-k, 68.08.-p, 68.35.Ct

**DOI:** [10.7498/aps.63.214706](https://doi.org/10.7498/aps.63.214706)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11190015, 51306033).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [ypchen@seu.edu.cn](mailto:ypchen@seu.edu.cn)