

液态锂在铜的微通道中的流动行为

唐琬婷 肖时芳 孙学贵 胡望宇 邓辉球

The flow behavior of liquid Li in Cu micro-channels

Tang Wan-Ting Xiao Shi-Fang Sun Xue-Gui Hu Wang-Yu Deng Hui-Qiu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 104705 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.104705

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.104705>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I10>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

具有聚电解质层圆柱形纳米通道中的电动能量转换效率

Electrokinetic energy conversion efficiency in a polyelectrolyte-grafted nanotube

物理学报.2016, 65(8): 084704 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.084704>

微扩张管道内幕律流体非定常电渗流动

Electroosmotically-driven flow of power-law fluid in a micro-diffuser

物理学报.2016, 65(3): 034702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.034702>

非对称弯曲微流道中粒子惯性聚焦动态过程及流速调控机理研究

Dynamic process and flow-rate regulation mechanism of particle inertial focusing in an asymmetric ally curved microchannel

物理学报.2015, 64(18): 184703 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.184703>

圆截面直流道中微粒黏弹性聚焦机理研究

Viscoelastic focusing of microparticles in circular cross-sectional microchannels

物理学报.2015, 64(15): 154703 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.154703>

含活性剂液滴在倾斜粗糙壁面上的铺展稳定性

Stability of surfactant-laden droplet spreading over an inclined heterogeneous substrate

物理学报.2015, 64(1): 014702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.014702>

# 液态锂在铜的微通道中的流动行为\*

唐琬婷<sup>1)</sup> 肖时芳<sup>1)</sup> 孙学贵<sup>2)</sup> 胡望宇<sup>2)</sup> 邓辉球<sup>1)†</sup>

1) (湖南大学物理与微电子科学学院, 长沙 410082)

2) (湖南大学材料与工程学院, 长沙 410082)

(2015年12月9日收到; 2016年1月27日收到修改稿)

本文采用分子动力学方法模拟了液态锂在铜的微通道内的流动行为. 通过构建铜(111), (100)和(110)晶面的微通道内壁, 研究了液态锂在流固界面上的微观结构以及在铜微通道中的流动速度分布情况, 并探讨了微通道尺寸对液态锂流动行为的影响. 研究表明铜微通道内的液态锂在靠近铜固体壁附近区域呈有序的层状结构分布, 并受铜内壁晶面微观结构的影响. 铜(111)和(100)面内壁附近的液态锂有序层分布结构更明显. 外驱动力作用下的液态锂在微通道内的流动速度呈抛物线分布, 流固界面和流动方向对液态锂的流动速度都会产生影响. 液态锂在铜(111)面内壁上流动的速度最大, 且出现了速度滑移; 在铜(110)面内壁上流动速度最小. 通过对不同尺寸微通道内液态锂流动行为的研究, 发现流动速度的大小随着微通道尺寸的增加而增大, 且最大速度与微通道尺寸呈二次函数关系, 与有关理论计算结果符合得很好.

**关键词:** 液态锂, 微观通道, 流固界面, 分子动力学模拟

**PACS:** 47.61.-k, 67.80.bf, 71.15.Pd

**DOI:** 10.7498/aps.65.104705

## 1 引言

随着自然科学和工程技术朝着微型化和纳米化方向发展, 微纳系统在工业、生物工程和信息技术等各个领域都有重要的应用前景, 其中微纳尺度下液体的流动行为日益受到人们的关注, 相关机理研究变得越来越迫切<sup>[1-3]</sup>. 微观尺度下流体的流动行为与宏观尺度下有许多不同, 多数在宏观尺度下被忽略的因素在微观条件下对流体流动行为有着显著的影响<sup>[4,5]</sup>.

尺寸效应是导致微纳尺度下流体流动行为不同于宏观流体的重要因素之一. Traris等<sup>[6]</sup>利用分子动力学方法模拟了Lennard-Jones流体在尺寸较小的狭缝中的泊肃叶流(Poiseuille flow), 发现尺寸较小时流体的速度分布与经典Navier-Stokes(N-S)流体力学理论预测的抛物线分布结果并不一致, 这是由于经典N-S流体力学理论更适用于微通道尺寸大于10个分子直径的情况. AKhmatskaya

等<sup>[7]</sup>利用非平衡分子动力学方法模拟了Weeks-Chandler-Andersen流体在尺寸较小的狭缝中的流动行为, 发现其黏度分布与Pozhar和Gubbins<sup>[8]</sup>提出的理论计算结果并不相符. 在考虑表面效应和壁面条件的情况下, 流体在微观尺度下的流动规律明显有别于宏观条件下流体的流动规律<sup>[9]</sup>. 近年来微通道内液体流动的速度滑移现象备受关注. 影响速度滑移现象的因素有很多, 固液界面的润湿性是其中一个非常重要的因素. 已有的研究表明, 流体的边界条件取决于固液界面的润湿性以及外界驱动力的大小<sup>[10]</sup>. 对于亲水性界面, 微通道内液体在外力驱动下流动的速度分布仍符合经典流体力学理论上的抛物线分布, 但是当外力很大时流体会克服固液界面对其的阻力, 使得流固界面上从无滑移现象变为滑移现象. 对于疏水性界面, 固液界面间会出现微小的间隙, 并导致流体受到来自固体壁的阻力减小, 其速度呈活塞型分布并伴随有速度滑移现象的出现. Tapan和Desai<sup>[11]</sup>利用分子动力

\* 国际热核聚变实验堆 ITER 计划专项 (批准号: 2013GB114001) 和国家自然科学基金 (批准号: 51371080) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hqdeng@hnu.edu.cn

学方法模拟了外力作用下的NaCl液体在由离子晶体构成的微通道内的流动,发现流固界面的滑移性质取决于与液体接触的固体晶面性质,改变固体晶面会使得液固界面的粗糙程度发生改变,使得液固界面会在滑移现象和不滑移现象之间变化.张程宾等<sup>[12]</sup>模拟了粗糙通道内流体的微观结构、速度和温度分布等,并将速度滑移和温度阶跃结果与光滑通道进行了比较,发现粗糙的流固界面会使得流体内部的剪切流动产生黏滞耗散,使得流体速度减小,不容易产生滑移;另外,固液原子的相互作用增大也会减小速度滑移的可能.类似的结果也在相关的文献中报道过<sup>[13]</sup>.

综上所述,已有很多文献采用分子动力学模拟方法从多方面探讨了微通道内流体的流动行为.多数研究在模拟过程中采用Lennard-Jones等经典模型势模拟一些常见流体(例如水)在微通道内的流动行为,或通过改变势的参数来模拟微观情况下流体的流动行为.但是到目前为止,鲜有液态金属在微通道中流动行为的研究工作.

由于锂具有特殊的电子结构,液态锂是被广为研究的“简单流体”之一.液态锂的静态结构和动力学特性已有大量的研究<sup>[14-18]</sup>.近年来的研究发现,液态锂也可以作为聚变装置中第一壁面对等离子体的候选材料之一,因为其具备许多优越性能<sup>[19]</sup>.例如液态锂壁比固态壁可承受更大的表面热负荷,且无中子辐照损伤;能有效降低高Z杂质对等离子体的污染<sup>[20]</sup>;通过循环使用,能有效地吸附杂质,容易实现热量排除和吸附粒子的更新,故液态锂壁具有一定的自我修复能力和可更新性,对核聚变装置的稳定运行有着至关重要的影响<sup>[21]</sup>.作为新概念设计的液态锂壁,其在基底材料的流动特性备受关注.在目前的聚变装置热沉冷却部件等系统中大量用到铜材料.而液态锂对铜制部件有强烈腐蚀作用,与水会发生剧烈反应引发爆炸,因此液态锂大规模应用过程中的风险问题正在引起高度重视<sup>[22,23]</sup>.考虑到未来液态壁的安全使用问题,在事故情况下液态锂可能通过其支撑结构材料裂纹或缝隙与铜部件发生接触,腐蚀铜部件或者其裂缝管道中流动,因此液态锂在铜的微通道中流动行为的研究具有重要意义.

本文采用改进分析型嵌入原子模型(MAEAM)势<sup>[24]</sup>来描述原子间的相互作用,并利用非平衡分子动力学方法模拟了液态锂在铜的微

通道中的流动行为.通过研究液态锂在铜微通道中流动时的密度分布和速度分布,分析了液态锂的微观结构和影响液态锂流动的因素;探讨了液态锂在微通道中流动的速度和结构与微通道尺寸的关系.

## 2 模型与模拟方法

### 2.1 结构模型

图1为本文模拟微通道内液态锂流动的几何模型,图中上下区域表示铜原子中间区域表示锂原子.液态锂处于两块平行且垂直于 $x$ 轴的铜固体壁面之间,壁面间距为 $H$ .在外力的驱动下,液态锂可沿着 $y$ 轴方向或 $z$ 轴方向流动.为了考察锂-铜流固界面微观结构对液态锂流动特性的影响,本文建立了内壁分别是铜(100),(110)和(111)面的微通道模型(保持微通道宽度为 $H = 7.24$  nm和液态锂的数密度为 $\rho_n = 0.04 \text{ \AA}^{-3}$ ),相关具体参数见表1.为了考察微通道尺寸对液态锂流动的影响,本文建立了宽度 $H$ 分别为4.13, 5.21, 6.28, 7.24, 8.08和9.16 nm的6个微通道模型.在本文模拟过程中,微通道内液态锂的数密度近似保持为 $0.04 \text{ \AA}^{-3}$ , $z$ 和 $y$ 轴方向均采用周期性边界条件.

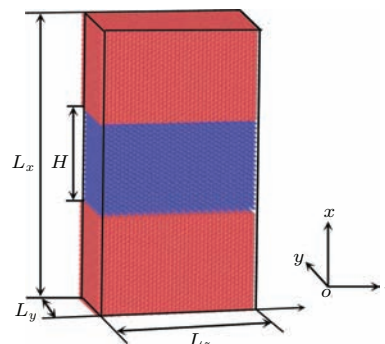


图1 (网刊彩色) 模拟体系的初始构型 上下区域表示铜原子;中间区域表示锂原子

Fig. 1. (color online) The initial configuration of simulation system. Middle region represent Li atoms and others represent Cu atoms.

表1 具体模型参数  
Table 1. The parameters of models in detail.

模型	流固界面	流动方向	$L_x$ /nm	$L_y$ /nm	$L_z$ /nm
A	铜(1 0 0)	$z$ 轴方向	21.64	7.29	7.29
B	铜(1 1 0)	$z$ 或 $y$ 轴方向	21.68	7.22	7.29
C	铜(1 1 1)	$z$ 轴方向	22.5	7.23	7.3

## 2.2 模拟过程

本文采用LAMMPS<sup>[25]</sup>软件模拟了铜的微通道内液态锂的流动行为. 铜-铜、锂-锂和铜-锂原子间的相互作用采用MAEAM势来描述, 势函数形式及相关参数具体见文献<sup>[26—28]</sup>. 在分子动力学模拟过程中, Velocity-Verlet算法用于求解粒子的运动方程, 时间步长取1 fs, 即 $\Delta t = 1$  fs. 体系的初始结构在温度为600 K的正则系综(NVT)下进行弛豫, 0.3 ns后体系达到平衡状态, 固态锂熔化变成液态锂. 然后给每一个锂原子施加一个 $y$ 方向或者 $z$ 方向的大小为0.16 pN的外力, 同时在固体壁上采用Nose-Hoover热浴<sup>[29,30]</sup>, 使得固体壁温度保持在600 K以控制整个体系的温度. 经过0.5 ns后, 体系达到稳定状态, 再统计有关结果.

将模型中的微通道沿着 $x$ 方向且平行于 $yoz$ 平面分成若干等宽的层切片, 统计每一层内原子数密度和速度, 可分别得到液态锂的速度和密度分布. 采用动量流密度 $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ 和质量密度 $\rho_m(\mathbf{r})$ 的比值来计算流动速度<sup>[6]</sup>, 其中动量流密度表示为

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \rho_m(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_i m\mathbf{v}_i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)), \quad (1)$$

式中 $m$ 是流体原子的质量,  $\rho_m(\mathbf{r}, t)$ 和 $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ 分别是 $t$ 时刻位置为 $\mathbf{r}$ 处的质量密度和流动速度;  $\mathbf{v}_i$ 是第 $i$ 个原子的速度. 质量密度表示为

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) = \sum_i m\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) = m\rho_n(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

其中 $\rho_n(\mathbf{r}, t)$ 是 $t$ 时刻位置为 $\mathbf{r}$ 处的数密度. 流体流速的计算式为

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{\sum_i m\mathbf{v}_i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t))}{\sum_i m\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t))}. \quad (3)$$

在统计锂原子的速度时, 整个通道内流体区域被均匀地划分为 $20 \pm 2$ 层; 统计密度分布时, 通道区域被平均分为 $180 \pm 5$ 层.

## 3 结果与讨论

### 3.1 流固界面附近液态锂的密度分布

液态锂的微观结构可由液态锂在微通道内的密度分布来体现. 液态锂在铜的微通道内面对不同流固界面时的密度分布情况如图2所示, 其中阴影

部分表示固体区域. 从图2(a)中可发现, 沿着垂直于流固界面的方向, 液态锂的密度分布在流固界面附近为有序的类似阻尼振荡的组织形态, 而在微通道中心区域则是均匀分布的. 这表明液态锂的分布在流固界面附近呈现出明显的分层结构<sup>[31]</sup>, 原因是液态锂中的锂原子受到了固体壁的晶格结构的强烈影响, 其结构也变得类似于固体铜壁的晶格结构, 被称为“类固体”结构<sup>[32]</sup>. 越靠近通道中心, 锂原子受来自固体壁的影响越小, 液态锂的有序分层现象越不明显, 在微通道中心的液态锂几乎不受固体壁的影响, 密度呈均匀分布. 在由不同铜晶面组成的流固界面内壁的附近, 液态锂原子的分布有一些不同. 与铜(100)晶面内壁相比, 靠近铜(111)晶面内壁的液态锂原子密度分布的第一层波峰更大, 且第一层液态锂原子与固体壁之间形成的真空隙层更宽. 这种密度分布的差异与铜(111)和(100)晶面的原子结构及面密度的差异有关. 铜(111)晶

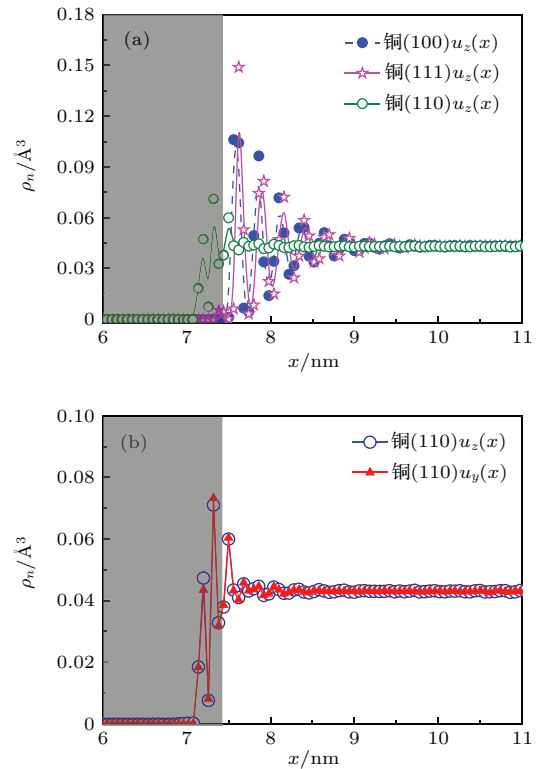


图2 (网刊彩色) 微通道中液态锂的密度分布 (a) 不同流固界面附近液态锂的密度分布; (b) 液态锂在铜(110)面上沿不同方向流动时的密度分布

Fig. 2. (color online) The number density profile of liquid Li in microchannel: (a) The number of density distribution of liquid Li flowed on the different fluid-solid interface; (b) the number of density distribution of liquid Li flowed on the same fluid-solid interface of Cu(110) but with different flow directions.



面原子排布的面密度比铜(100)面的大,对液态锂结构的影响较大,从而导致液态锂原子分布在第一层的峰值较大;较大的面密度使得固体壁铜原子与液态锂之间有较强的斥力作用,使得液态锂与壁之间的真空隙层较宽.图2(a)中液态锂面对铜(111)晶面时,固体区域出现了锂的密度分布,这是因为有微量锂原子扩散到铜固体壁内,如图3(a)中液态锂在铜(111)体系中的快照所示.图2(a)中还比较了流固界面分别为铜(100)和铜(110)晶面时液态锂的密度分布,清楚地发现在铜(110)晶面附近,液态锂的有序分层现象并不明显,密度分布延伸到了铜固体区域内.铜(110)晶面的面密度比铜(100)面的小,锂原子易扩散进入铜固体形成合金层,导致液态锂在微通道内的密度分布分层现象不如前两种情况明显.如图3(b)所示,在铜(110)体系的快照中可清楚地发现锂-铜合金层的存在.图2(b)是液态锂在流固界面铜(110)的微通道内分别沿两个不同方向( $y$ 轴方向和 $z$ 轴方向)流动时的密度分布,发现在同样的流固界面下,液态锂在沿不同方向流动时密度分布几乎没有差异.这表明液态锂在微通道中流动时,密度分布与流动方向无关但与流固界面的原子排布直接相关.

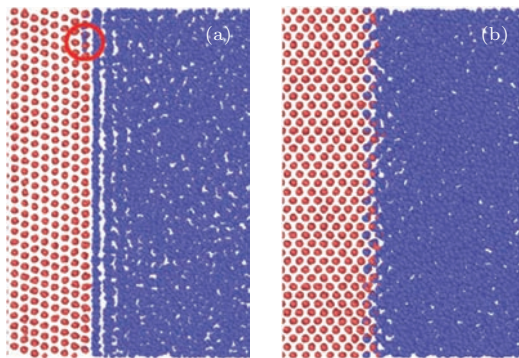


图3 (网刊彩色) 流固界面的快照图 (a) 铜(111); (b) 铜(110)

Fig. 3. (color online) Snapshots of the fluid-solid interface: (a) For Cu(111) face; (b) for Cu(110) face.

### 3.2 微通道中液态锂的速度分布

图4给出了液态锂在微通道内流动速度沿 $x$ 方向( $u(x)$ )的分布.不难发现,液态锂在外力作用下流动时所有的锂原子速度分布均呈现出抛物线型分布,即微通道中心速度最大,流固界面处速度最小,这与流体力学中N-S方程所预测泊肃叶流的速度分布一致.

从图4(a)中可发现,在面对不同的流固界面时液态锂流动的速度不同.液态锂在铜(111)面上

流动的速度最大;而在铜(110)面上流动的速度最小.这可能与不同流固界面上的面密度及液体在流固界面附近的微观结构的不同有关.不同流固界面上的面密度使得界面上的光滑程度存在差异,当流固界面上的面密度越大时,界面越“光滑”,因此液态锂在界面上流动时受到的阻力越小.流固界面附近液体的有序分层结构也会促使液体在微通道中的剪切流动,使得液体的流动速度加快.在单晶铜中,铜(111)晶面上的密度最大,最“光滑”;且由前面的密度分布可知微通道内第一层液态锂与固体壁面间的真空隙层最宽,故液态锂在流动过程中受到来自固体壁的阻力最小,流动速度最大,从而容易出现在通道边界速度不为0的现象.这种现象被称之为速度滑移现象,也称作“正滑移”[33].反之,铜(110)面的面密度最小,最“粗糙”,液态锂受到

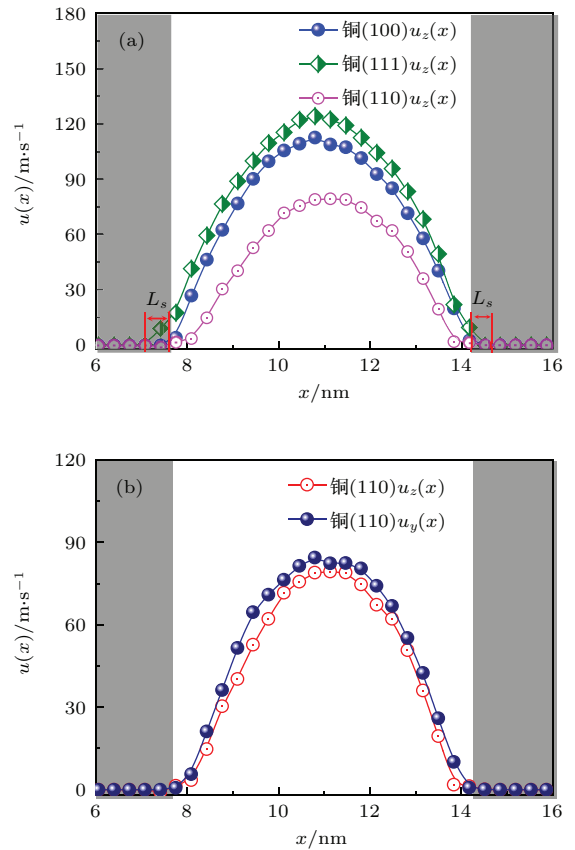


图4 (网刊彩色) 液态锂在微通道中的速度分布 (a) 液态锂在不同流固界面上沿相同方向流动时的速度分布,  $L_s$  为滑移长度[10]; (b) 液态锂在铜(110)晶面上沿不同方向流动时的速度分布

Fig. 4. (color online) The velocity profile of liquid Li in microchannel: (a) The velocities of liquid Li closed to the different liquid-solid interface.  $L_s$  is the slip velocity; (b) the velocities of liquid Li with the same liquid-solid interface of Cu(110) but with different flow direction.

较大的界面阻力, 从而使得液态锂在靠近铜(110)的区域内流动速度几乎为0, 这种现象被认为是速度出现“负滑移”现象<sup>[33]</sup>; 且由于其较低的有序分层分布, 液态锂内部层与层之间的剪切流动相互阻碍作用大, 黏性耗散大, 进而导致整个微通道内的速度比其他两种情况小. 在图4(b)中, 我们比较了液态锂在铜(110)面上沿不同方向流动时的速度分布, 可发现液态锂沿着 $z$ 轴方向运动时的速度比沿着 $y$ 轴方向流动时的小. 这也与铜(110)面的原子排布有关. 图5给出了铜(110)面在 $yo$  $z$ 平面上原子排布示意图. 由图5可看出, 铜(110)面上的原子结构呈矩形排布, 沿 $z$ 轴和 $y$ 轴方向(本文中 $z$ 轴和 $y$ 轴方向分别对应为铜[001]和 $[1\bar{1}0]$ 方向)原子间距不相等, 即 $d_y < d_z$ . 且锂原子在铜(110)面上沿着 $z$ 轴方向的扩散势垒比 $y$ 轴方向的大, 锂原子更容易向势垒较低的方向扩散<sup>[34]</sup>. 从而液态锂原子沿着 $y$ 轴方向流动速度比 $z$ 轴方向的大.

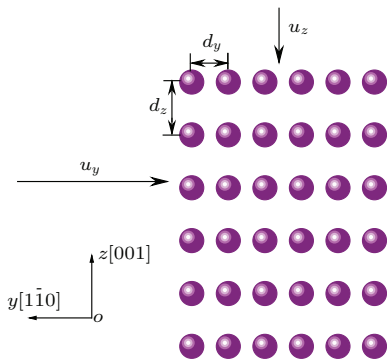


图5 铜(110)面在 $yo$  $z$ 平面原子排布示意图  
Fig. 5. An atoms sketch map of of Cu(110) face on  $yo$  $z$  plane.

### 3.3 通道尺度对液态锂流动的影响

在经典流体力学中, 流体的流动速度可以通过给定流体在固体壁上的边界条件来解N-S方程来获得. 对于在两平板间给流体原子施加平行于两板的外力而形成的泊肃叶流, 给定边界条件求解得N-S方程得到流体的速度与平板间距离 $H$ 的关系<sup>[35,36]</sup>为

$$u_z(x) = -\frac{\rho_n F_e}{2\eta}(x^2 - Hx) + u_s, \quad (4)$$

式中 $z$ 为流动方向,  $x$ 方向垂直于两平板,  $\rho_n$ 是流体的数密度,  $F_e$ 是加在每个流体原子上的外力,  $\eta$ 是流体的黏度,  $H$ 是两板之间的距离,  $u_s$ 是边界上的滑移速度. 由此可知流体在两板中间有最大速度, 且最大速度正比于 $H^2$ . 若流固界面上出现无滑

移现象则(4)式中 $u_s$ 为0; 反之则 $u_s \neq 0$ , 且出现正滑移有 $u_s > 0$ , 出现负滑移有 $u_s < 0$ .

图6给出了液态锂在不同尺寸的微通道内流动时通道中心的速度随尺寸分布, 分别比较了三种流固界面下的模拟计算结果, 并与无滑移边界条件下的理论计算结果进行了对照. 本文得到的液态锂在不同尺寸的通道中心位置的速度与尺寸关系近似呈二次函数的一部分, 符合N-S流体理论的预测. 由图6可观察到在通道尺寸小于7.5 nm时, 液态锂在铜(100)面上流动的最大速度模拟计算结果与理论计算结果符合得很好; 通道尺寸大于7.5 nm时, 理论计算结果略大于模拟计算结果. 由于液态锂在铜(111)的流固界面上流动时出现了正滑移, (4)式中 $u_s > 0$ , 所以图6中液态锂在不同尺寸下铜(111)的微通道内流动的最大速度大于铜(100)微通道内的. 因为液态锂在铜(110)的流固界面上流动时出现的是负滑移, 所以液态锂在不同尺寸下铜(110)的微通道内流动的最大速度比铜(100)微通道内的小. 图7给出了液态锂在不同尺寸的通道中的密度分布, 该图反映了微通道尺寸对液态锂微观结构的影响. 当 $H = 4.13$  nm时, 液态锂在整个通道中呈现有序分层结构, 靠近流固界面处的液态锂的分层结构较明显; 当 $H = 5.21$  nm时, 流固界面附近的液态锂仍然出现比较明显的分层结构, 但靠近中心区域, 分层结构减弱; 当 $H$ 大于6 nm时, 通道中心的有序分层现象基本消失, 密度均匀分布. 通道尺寸较小时, 通道中心的液态锂会受到来自两边固体壁的影响从而呈现有序分层分布. 随着尺寸的增加, 通道中心的液态锂受到来自固体壁的影响越来越小, 密度趋于均匀分布, 液态锂趋向于宏观流体结构.

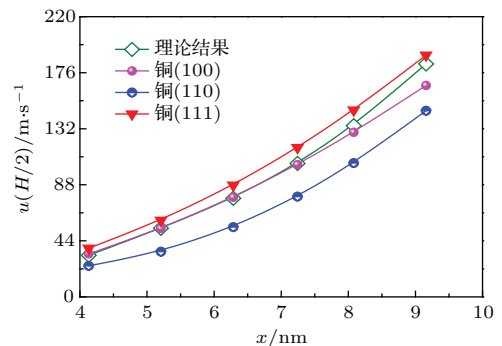


图6 (网刊彩色) 液态锂在微通道内流动的最大速度与微通道宽度 $H$ 的关系

Fig. 6. (color online) The relationship between the maximal velocity of liquid Li in microchannel and the width of microchannel.

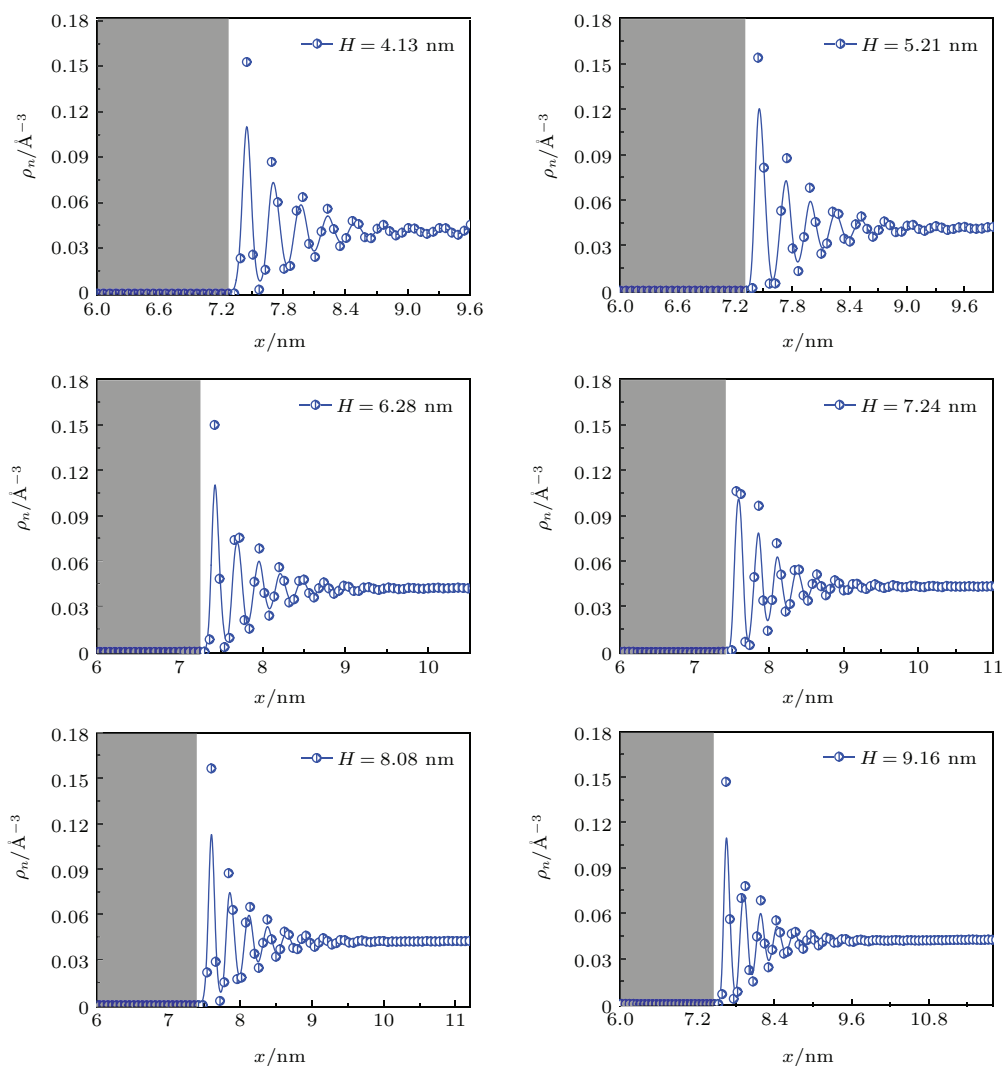


图7 (网刊彩色) 液态锂在不同尺寸的微通道中的密度分布

Fig. 7. (color online) The density profiles of liquid Li in the microchannels with different width.

## 4 结 论

本文利用分子动力学方法对液态锂在铜的微通道中的流动进行了模拟,研究了液态锂在微通道中流动的结构、速度分布和微通道尺寸对液态锂流动的速度和结构的影响.通过模拟研究我们得到了以下结论.

1) 靠近流固界面附近的液态锂结构分层,分层的有序性受到流固界面的影响而流动方向对液态锂的结构分布几乎没有影响.液态锂在铜(111)晶面和铜(100)晶面附近密度有序分层现象最显著;在铜(110)晶面附近密度有序分层现象不明显.面对同样的流固界面铜(110)面液态锂沿两个不同方向流动时,密度分布几乎相同.

2) 流固界面的不同和流固界面原子沿不同方

向的排布均会影响到液态锂在微通道中的流动速度.铜(111)晶面作为流固界面时液态锂流动的速度最大,铜(110)晶面作为流固界面时,液态锂的速度最小.在相同的流固界面上流动时,流动方向的不同也会影响液态锂的流动.因为铜(110)面原子沿着不同方向排布不同,铜(110)面作为流固界面时,沿不同方向流动时速度大小有差异.

3) 微通道的尺寸会影响液态锂流动的速度,液态锂的速度随着通道尺寸的增加而增大,且最大速度与通道宽度 $H$ 的平方成正比.随着通道尺度的增加,通道中间的液态锂结构从有序分层向无序的均匀分布变化.液态锂在铜(100)面的微通道内流动时,最大速度随尺寸分布的模拟结果与无滑移边界条件下的N-S流体理论结果符合较好;液态锂在铜(111)面的微通道内流动时的结果较大,在铜(110)面的微通道内流动时的结果较小.

## 参考文献

- [1] Tang G H, Zhang Y H, Emerson D R 2008 *Phys. Rev. E* **77** 046701
- [2] Cracknell R F, Nicholson D, Quirke N 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 2463
- [3] Tao R, Quan X B, Xu J Z 2001 *J. Eng. Thermophys.* **22** 575 (in Chinese) [陶然, 权晓波, 徐建中 2001 工程热物理学报 **22** 575]
- [4] Bitsanis I, Magda J J, Tirrell M, Davis H T 1987 *J. Chem. Phys.* **87** 1733
- [5] 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]
- [6] Travis K P, Todd B D, Evans D J 1997 *Phys. Rev. E* **55** 4288
- [7] Akhmatkaya E, Todd B D, Daivis P J, Evans D J, Gubbins K E, Pozhar L A 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 4684
- [8] Pozhar L A, Gubbins K E 1993 *J. Chem. Phys.* **99** 8970
- [9] Bitsanis I, Somers S A, Davis H T, Tirrell M 1990 *J. Chem. Phys.* **93** 3427
- [10] Nagayama G, Cheng P 2004 *Int. J. Heat Mass Transfer* **47** 501
- [11] Desai T G 2010 *Chem. Phys. Lett.* **501** 93
- [12] Zhang C B, Xu Z L, Chen Y P 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 214706 (in Chinese) [张程宾, 许兆林, 陈永平 2014 物理学报 **63** 214706]
- [13] Cao B Y, Chen M, Guo Z Y 2006 *Phys. Rev. E* **74** 066311
- [14] Canáles M, Padró J A, Gonzalez L E, Giró A 1993 *J. Phys.: Condens. Matter* **5** 3095
- [15] Canales M, Gouzález L E, Padró J A 1994 *Phys. Rev. E* **50** 3656
- [16] Cui Z, Gao F, Cui Z, Qu J 2012 *Model. Simul. Mater. Sci.* **20** 015014
- [17] Wang Z H, Ni M J 2012 *Heat Mass Transfer* **48** 253
- [18] Allain J P, Coventry M D, Ruzic D N 2007 *Phys. Rev. B* **76** 205434
- [19] Deng B Q, Allain J P, Luo Z M, Peng L L, Yan J C 2007 *Nucl. Instrum. Meth. B* **259** 847
- [20] Li C Y, Allain J P, Deng B Q 2007 *Chin. Phys. B* **16** 3312
- [21] Meng X C, Zuo G Z, Ren J, Sun Z, Xu W, Huang M, Li M H, Deng H Q, Hu J S, Hu W Y 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 212801 (in Chinese) [孟献才, 左桂忠, 任君, 孙震, 徐伟, 黄明, 李美姮, 邓辉球, 胡建生, 胡望宇 2015 物理学报 **64** 212801]
- [22] Li R Q, Tong L L, Cao X W 2013 *Nuclear Fusion and Plasma Physics* **33** 175 (in Chinese) [李若晴, 佟立丽, 曹学武 2013 核聚变与等离子体物理 **33** 175]
- [23] Topilski L N, Masson X, Porfiri M T, Pinna T, Sponton L L, Andersen J, Takase K, Kurihara R, Sardain P, Girard C 2001 *Fusion Eng. Des.* **54** 627
- [24] Zhang B W, Hu W Y, Shu X L 2003 *Theory of Embedded Atom Method and Its Application to Materials Science—Atomic Scale Materials Design Theory* (Changsha: Hunan University Press) p245 (in Chinese) [张邦维, 胡望宇, 舒小林 2003 嵌入原子方法理论及其在材料科学中的应用——原子尺度材料设计理论 (长沙: 湖南大学出版社) 第245页]
- [25] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [26] Zhang J M, Huang Y H, Xu K W, Vincent J 2007 *Chin. Phys. B* **16** 0210
- [27] Gan X L, Xiao S F, Deng H Q, Sun X G, Li X F, Hu W Y 2014 *Fusion Eng. Des.* **89** 2894
- [28] Tang J, Yang J 2015 *J. Nanopart. Res.* **17** 299
- [29] Nosé S 1984 *J. Chem. Phys.* **81** 511
- [30] Hoover W G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1695
- [31] Thompson P A, Robbins M O 1990 *Phys. Rev. A* **41** 6830
- [32] Granick S 1991 *Science* **253** 1374
- [33] Cao B Y, Chen M, Guo Z Y 2006 *Int. J. Eng. Sci.* **44** 927
- [34] Chen X, Sun X G, Deng H Q, Xiao S F, Gan X L, Li X F, Hu W Y 2016 *Comput. Mater. Sci.* **119** 114
- [35] Travis K P, Gubbins K E 2000 *J. Chem. Phys.* **112** 1984
- [36] Cao B Y, Chen M, Guo Z Y 2006 *Int. J. Eng. Sci.* **44** 927



# The flow behavior of liquid Li in Cu micro-channels\*

Tang Wan-Ting<sup>1)</sup> Xiao Shi-Fang<sup>1)</sup> Sun Xue-Gui<sup>2)</sup> Hu Wang-Yu<sup>2)</sup> Deng Hui-Qiu<sup>1)†</sup>

1) (School of Physics and Electronics, Hunan University, Changsha 410082, China)

2) (College of Materials Science and Engineering, Hunan University, Changsha 410082, China)

( Received 9 December 2015; revised manuscript received 27 January 2016 )

## Abstract

The flow properties of liquid in microchannel have received more attention for their wide applications in different fields. Up to now, little work has focused on the flow behaviors of liquid metals. Recently, liquid lithium (Li) has been considered as one of the candidate plasma-facing materials (PFMs) because of its excellent properties in fusion reactor applications. Considering an accident condition, liquid Li may contact Cu components and erode them, which may cause a serious disaster. The study of the flow properties of liquid Li in Cu microchannel is crucial for the safe application of liquid Li working as a PFM. With the method of non-equilibrium molecular dynamics simulations, in this paper we investigate the flow behavior of liquid Li flowing in Cu microchannels. The density and velocity distributions of Li atoms are obtained. The influence of the dimension of Cu microchannel on the flowing behavior of liquid Li is studied. Comparative analyses are made in three different fluid-solid interfaces, i.e., Li-Cu(100), Li-Cu(110) and Li-Cu(111), respectively. Results show that the density distributions of liquid Li near the interface present an orderly stratified structure. Affected by a larger surface density, a more obviously stratification is found when Li atoms are near the fluid-solid interfaces of Li-Cu(100) and Li-Cu(111) and a wider vacuum gap appears between Li atoms and Cu(111) interface. When Li atoms are near the Li-Cu(110) interface, a lower stratification can be found and an alloy layer appears at Li-Cu(110) interface. Because of its lower surface density, Li atoms spread into the bulk Cu more easily. However, the density distributions have little difference when Li atoms are close to the same fluid-solid interface but with different flow directions. The velocity of Li atoms in microchannel has a parabolic distribution. Because there exists a wider vacuum gap and stratified structure, the Li atoms closed to the Li-Cu (111) interface have the largest velocity. Closed to the Li-Cu (110) interface, Li atoms have the smallest velocity because of the alloy layer and the lower stratified structure. Owing to the diversity of the atomic configurations of Cu (110) face, the liquid Li atoms flow with diverse velocities in different directions on the Li-Cu (110) interface. It is also found that the magnitude of flowing velocity of liquid Li is proportional to the square of microchannel dimension and increases with it. When liquid Li is flowing on the Li-Cu(100) interface, the simulation result reveals that the relationship between microchannel dimension and the largest velocity of Li atoms is in good agreement with Navier-Stokes theory result. It is noteworthy that the present result is smaller than the theoretical result when a “negative slip” occurs at the Li-Cu(110) interface. In contrast, the result is greater than the theoretical result in the presence of a “positive slip” at Li-Cu(111) interface.

**Keywords:** liquid lithium, microchannel, fluid-solid interface, molecular dynamics simulation

**PACS:** 47.61.-k, 67.80.bf, 71.15.Pd

**DOI:** 10.7498/aps.65.104705

\* Project supported by the Chinese National Fusion Project for ITER (Grant No. 2013GB114001) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51371080).

† Corresponding author. E-mail: [hqdeng@hnu.edu.cn](mailto:hqdeng@hnu.edu.cn)