

纳米通道内气体剪切流动的分子动力学模拟

张冉 谢文佳 常青 李桦

Molecular dynamics simulations of surface effects on Couette gas flows in nanochannels

Zhang Ran Xie Wen-Jia Chang Qing Li Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 084701 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20172706

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20172706>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I8>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[水滴撞击结冰过程的分子动力学模拟](#)

Molecular dynamics simulation of freezing process of water droplets impinging on cold surface

物理学报.2018, 67(5): 054702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20172174>

[非对称纳米通道内流体流动与传热的分子动力学](#)

Molecular dynamics simulation of fluid flow and heat transfer in an asymmetric nanochannel

物理学报.2017, 66(20): 204704 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.204704>

[分离压和表面黏度的协同作用对液膜排液过程的影响](#)

Synergistic effects of disjoining pressure and surface viscosity on film drainage process

物理学报.2017, 66(19): 194701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.194701>

[随活性剂浓度变化的分离压对垂直液膜排液过程的影响](#)

Effect of concentration-dependent disjoining pressure on drainage process of vertical liquid film

物理学报.2017, 66(18): 184702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.184702>

[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>

# 纳米通道内气体剪切流动的分子动力学模拟\*

张冉 谢文佳 常青 李桦†

(国防科技大学空天科学学院, 长沙 410073)

(2017年12月21日收到; 2018年1月16日收到修改稿)

采用分子动力学模拟方法研究了表面力场对纳米通道内气体剪切流动的影响规律. 结果显示通道内的气体流动分为两个区域: 受壁面力场影响的近壁区域和不受壁面力场影响的主流区域. 近壁区域内, 气体流动特性和气体动力学理论预测差别很大, 密度和速度急剧增大并出现峰值, 正应力变化剧烈且各向异性, 剪切应力在距壁面一个分子直径处出现突变. 主流区域的气体流动特性与气体动力学理论预测相符合, 该区域内的密度、正应力与剪切应力均为恒定值, 速度分布亦符合应力-应变的线性响应关系. 不同通道高度及密度下, 近壁区域的归一化密度、速度及应力分布一致, 表明近壁区域的气体流动特性仅由壁面力场所决定. 随着壁面对气体分子势能作用的增强, 气体分子在近壁区域的密度和速度随之增大, 直至形成吸附层, 导致速度滑移消失. 通过剪切应力与切向动量适应系数 (TMAC) 的关系, 得到不同壁面势能作用下的 TMAC 值, 结果表明壁面对气体分子的势能作用越强, 气体分子越容易在壁面发生漫反射.

**关键词:** 纳米尺度气体流动, 表面力场, 剪切应力, 切向动量适应系数

**PACS:** 47.61.-k, 68.47.-b, 47.45.Gx, 47.11.Mn

**DOI:** 10.7498/aps.67.20172706

## 1 引言

近年来, 随着微纳机电系统 (MEMS/NEMS) 和微流动系统的蓬勃发展, 纳米尺度气体流动现象受到广泛关注<sup>[1-4]</sup>. 根据克努森数 ( $Kn = \lambda/L$ , 其中  $\lambda$  为气体平均分子自由程,  $L$  为流动特征长度) 的大小, 钱学森<sup>[5]</sup> 将流动区域划分为 4 个区域: 连续流区域 ( $Kn < 0.001$ )、滑移流区域 ( $0.001 < Kn < 0.1$ )、过渡流区域 ( $0.1 < Kn < 10$ ) 及自由分子流区域 ( $Kn > 10$ ). 对于纳米尺度气体流动, 一方面, 由于其流动特征长度与分子平均自由程处于同一量级, 流动处于过渡流区域, 稀薄气体效应显著, 连续性假设早已不再适用; 另一方面, 由于流动的面积与体积比明显增大, 壁面作用力对流动的影响更加突出.

对于滑移流区域的微尺度流动, Navier-Stokes 方程仍然是有效的, 但是需要采用确定流动边界滑

移的滑移边界条件. 在经典的 Maxwell 滑移模型基础上, 一些能反映流体与固体界面流动特性的滑移模型<sup>[6,7]</sup> 的出现在很大程度上解决了滑移区微尺度流动模拟的边界条件问题. 然而, 对处于过渡流区域的纳米尺度气体流动, Navier-Stokes 方程附加滑移边界条件的方法已经不再适用. 从气体动力学理论出发的求解玻尔兹曼方程方法<sup>[8-10]</sup> 及直接模拟 Monte Carlo (DSMC) 方法<sup>[11,12]</sup> 被认为是研究过渡流区域气体流动的有效数值模拟方法, 但这两种方法在处理流动边界时都采取了一定的简化, 认为气体分子与壁面碰撞后会处于一种特定的状态, 这类处理方法无一例外都忽视了气体分子与壁面的相互作用力对流动的影响.

分子动力学模拟 (MD) 方法<sup>[13]</sup> 作为一种确定论的模拟方法, 采用分子间势能函数准确地描述气体与气体之间及气体与壁面之间的相互作用. 随着计算机运算能力的提升, MD 方法已经成为微纳尺度流动领域最重要的研究手段之一. MD 方法在

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11472004) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zr07024221@126.com

处理边界条件时不附加任何假设条件, 仅采用气体-壁面势能相互作用模型描述气体与壁面相互作用的特点显示出了其独有的优势. 学者们采用MD方法研究了微纳尺度通道中的液体流动问题<sup>[14,15]</sup>, 发现了流体在壁面附近发生的密度分层、速度滑移及温度跳跃等现象, 极大地拓展了人们对微纳尺度流动的认识.

针对纳米尺度气体流动, 国内外学者采用MD方法做了许多相关的研究. 切向动量适应系数是表征气体分子和表面动量与能量的交换程度的重要参数, 它与表面性质的关系已经被广泛地研究<sup>[16-21]</sup>. 气体分子的切向动量适应系数对表面的条件比较敏感, 壁面材料种类、温度、表面粗糙度都对适应系数有着明显的影响. 曹炳阳等<sup>[22,23]</sup>采用非平衡分子动力学方法对纳米通道内的Couette流动进行了研究, 获得了不同壁面条件下通道内流体的速度及密度分布, 探讨了速度滑移与势能作用强度间的关系. Xie和Liu<sup>[24]</sup>模拟了混合气体在纳米通道中的Poiseuille流动, 发现由于壁面作用力的影响, 通道内不同成分的气体分布不再均匀的特殊现象. Barisik和Beskok<sup>[25,26]</sup>采用小壁分子动力学(SWMD)方法研究了通道内气体的流动规律, 发现近壁区域内气体的速度、密度及压力变化趋势仅由壁面力场决定, 不受通道高度和密度的影响. 但SWMD方法中假定壁面原子静止, 虽然这种简化方法节省了计算量, 却忽视了壁面原子热运动对气体分子的影响. Bao等<sup>[27,28]</sup>针对有限长度的纳米通道内压力驱动流动进行了分子动力学模拟研究, 其模拟结果也发现了壁面力场主导近壁面区域流动特性的现象. 从前人的研究来看, 壁面力场是主导纳米通道中气体流动规律的一个主导因素, 但其影响近壁区域的流动特性的物理机理还需要进一步研究. 在壁面作用力的影响区域, 同时也是气体分子和壁面发生相互作用的区域, 气体与壁面的碰撞和气体分子在表面的吸附对纳米元器件的力学性能有着显著的影响<sup>[29-31]</sup>. 因此, 了解该区域内气体的流动特性对纳米元器件的设计和优化具有重要的意义.

本文采用MD模拟方法, 针对三维纳米通道内的Couette气体流动展开模拟, 改变气体-壁面相互作用势能强度, 获得流场内速度、密度、正应力及剪切应力分布, 并着重探讨壁面力场对近壁区域气体流动的影响规律. 进一步根据剪切应力与克努森数

的关系, 获得了不同气体与表面相互势能强度下的切向动量适应系数.

## 2 三维分子动力学模拟

### 2.1 物理模型

Couette流动的几何结构如图1所示, 单原子气体氩均匀分布在距离为 $H$ 的两无限平板之间, 在流动系统的流向( $X$ )和展向( $Y$ )施加周期性边界条件.

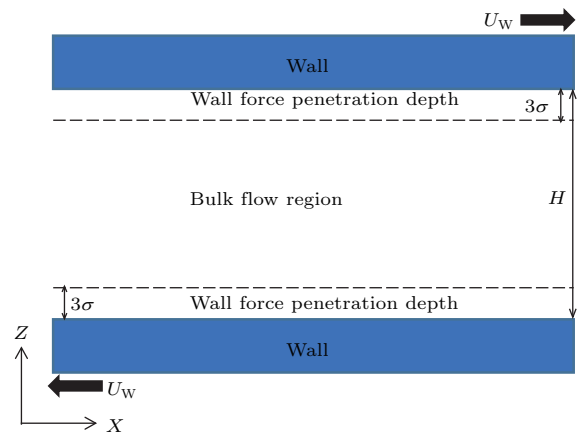


图1 Couette流动示意图, 近壁区域处于距壁面第一层原子 $3.0\sigma_{Ar}$ 范围内, 流场其余区域为主流区

Fig. 1. Schematic of the simulation of the Couette flow. The flowfield is composed of near wall region and bulk flow region.

上下壁面以相同的速度 $U_w$ 沿流向做相对运动, 为了避免流动出现压缩性现象,  $U_w$ 选取 $0.2Ma$ . 对于单原子气体氩, 其马赫数 $Ma = \sqrt{\gamma k_B T / m_{Ar}}$ , 其中氩原子气体比热比 $\gamma = 5/3$ , 玻尔兹曼常数 $k_B = 1.3806 \times 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$ , 气体温度 $T = 298 \text{ K}$ , 氩原子质量 $m_{Ar} = 6.63 \times 10^{-26} \text{ kg}$ .

模拟中, 采用截断Lennard-Jones (L-J) 6—12势能函数<sup>[31]</sup>模拟气体-气体及气体-壁面间的势能相互作用, 公式如下:

$$V_{\text{truncated}}(r_{ij}) = 4C\varepsilon \left\{ \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] - \left[ \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^6 \right] \right\}. \quad (1)$$

为了方便计算及分析, 本文中壁面原子的质量及势能参数与气体分子一致, 即 $\sigma_{Ar-Ar} = \sigma_{Ar-Surface}$ ,  $\varepsilon_{Ar-Ar} = \varepsilon_{Ar-Surface}$ , 氩原子直径 $\sigma_{Ar} =$

$3.405 \times 10^{-10}$  m, 势能参数  $\varepsilon_{Ar} = 1.67 \times 10^{-21}$  J,  $r_{ij}$  为分子间的中心距离.  $C$  为气体与壁面之间的势能相互作用系数, 下文简称为壁面势能系数, 通过调节其大小可以改变气体分子与壁面原子之间的相互作用强度, 考察不同种类气体和壁面材料之间势能作用强弱对流动的影响. 公式中势能截断半径  $r_c$  为  $3.0\sigma_{Ar}$ , 超过该距离的势能作用相对于气体分子的动能可以忽略不计. 模拟过程中采用元胞关联法 (link cell method) 处理分子间的势能作用力的计算.

对于壁面原子, 其排布按 FCC (100) 晶格排布, 晶格常数为  $1.6\sigma_{Ar}$ . 考虑壁面温度对气体分子运动的影响, 壁面模型采用爱因斯坦固体模型<sup>[33]</sup>, 该模型认为每个壁面原子都以相同的频率在各自的平衡点附近做简谐振动, 本文中壁面原子简谐振动的弹性系数为  $36.75$  N/m.

## 2.2 模拟控制细节与统计方法

将流场区域沿  $Z$  轴划分为若干相同高度 ( $0.34$  nm) 的子区域, 采用统计平均的方法获得各子区域的平均速度, 将其标记为对应气体分子的宏观速度. 在计算温度的过程中, 去除每个气体分子的宏观速度, 从而获得气体的真实温度. 模拟系综选取正则系综 (NVT), 采用 Nose-Hoover 热浴处理方法<sup>[34]</sup> 将系统温度控制在  $298$  K. 模拟开始时, 气体分子均匀分布在流场中, 气体分子的初始速度根据给定温度下的平衡态分布抽样获得. 速度积分采用 Velocity-Verlet 算法, 时间步长  $\Delta t = 0.002\tau$  ( $\approx 4$  fs), 系统运行  $2 \times 10^6$  步后达到稳定, 稳定后采用较长的时间 ( $3 \times 10^7 \Delta t$ ) 对宏观物理量 (数密度, 速度及压力张量) 进行时间平均. 将模拟盒子沿  $Z$  方向且平行于  $XY$  平面划分为等间距 ( $\Delta H$ ) 的若干层, 用于统计流场中各宏观物理量的分布, 为了获取近壁面区域的流动细节, 层间距取较小的高度 ( $0.2\sigma = 0.068$  nm).

## 2.3 压力张量的计算

本文采用了 Irving-Kirwood (I-K) 公式<sup>[35,36]</sup> 计算系统中气体的应力张量, 对于一个包含  $N$  个气体分子, 体积为  $V_{ol}$  的粒子系统, 其表达式为

$$s_{kl} = \frac{1}{V_{ol}} \left\langle \sum_{i=1}^N m_i (V_k^i - \bar{V}_k^i)(V_l^i - \bar{V}_l^i) + w_{kl} \right\rangle,$$

$$w_{kl} = \frac{1}{2} \sum_{i=1, j=1, i \neq j}^N (r_k^j - r_k^i) f_l^{ij}, \quad (2)$$

式中等式右边第一项为应力张量的动力学项,  $w_{kl}$  为分子间作用力产生的位力项. 动力学项中,  $m_i$  为粒子  $i$  质量,  $k$  和  $l$  分别代表笛卡尔坐标系中的不同方向,  $V_k^i$  和  $V_l^i$  分别为粒子  $i$  在  $k$  和  $l$  方向上对应的速度分量,  $\bar{V}_k^i$  和  $\bar{V}_l^i$  分别为粒子  $i$  所在位置所对应的  $k$  和  $l$  方向上气体的平均速度. 对于位力项,  $(r_k^j - r_k^i)$  为粒子  $i$  与  $j$  之间的距离矢量在  $k$  方向上的分量,  $f_l^{ij}$  则是粒子  $j$  在  $l$  方向上对  $i$  粒子的分子间作用力分量. 应力张量为三阶反对称张量, 可表示为

$$\Pi_{ij} = \begin{bmatrix} s_{xx} & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{yx} & s_{yy} & s_{yz} \\ s_{zx} & s_{zy} & s_{zz} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

其中  $s_{xx}, s_{yy}, s_{zz}$  为正应力, 其余各项为剪切应力, 对处于静止的平衡态理想气体 (无宏观速度, 忽略分子间作用力), 剪切应力为零, 根据理想气体定律, 气体的压力  $P$  和正应力的关系为

$$\frac{s_{xx} + s_{yy} + s_{zz}}{3} = \frac{1}{3V_{ol}} \left\langle \sum_{i=1}^N m_i (V_k^i)^2 \right\rangle = \frac{Nk_B T}{V_{ol}} = P. \quad (4)$$

不难看出, I-K 公式是对理想气体状态公式的修正, 它考虑了气体分子间相互作用力对气体应力张量的贡献. 对于稠密气体和液体而言, 由于流体分子间间距较小, 分子间的相互作用变得不可忽视, 此外, 壁面附近的流体分子不可避免地会受到表面力场影响, 因此在计算压力张量时必须要考虑分子间位力项的贡献. Couette 流动为剪切应力驱动流动, 剪切应力  $\tau = s_{xz} = -s_{zx} \neq 0$ , 其余剪切应力均为零.

## 2.4 模拟区域设置

分子平均自由程 ( $\lambda$ ) 是衡量气体稀薄程度的重要参数, 假设气体分子为硬球分子, 其气体动力学定义<sup>[11]</sup> 为

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi\sigma_{HS}n}, \quad (5)$$

式中  $\sigma_{HS}$  为硬球分子直径,  $n$  为分子数密度, Murat Barisik<sup>[28]</sup> 采用 MD 方法计算了纳米通道内气体氩在  $298$  K 时的硬球分子直径为  $1.06\sigma_{Ar}$ .

流动在某个方向上采用周期性边界条件时, 为了保证气体分子间的碰撞充分, 该方向上的模拟尺度至少应为一个分子平均自由程. 本文中的模拟盒子在  $X, Y$  方向的长度均为  $\lambda$ , 即模拟盒子的体积为  $\lambda \cdot \lambda \cdot H$ . Couette 流动的特征长度为通道的高度  $H$ , 流动的克努森数  $Kn = \lambda/H$ , 针对过渡流领域的气体流动, 线性玻尔兹曼方程的求解 [11,12] 中广泛采用了修正克努森数 ( $k = (\sqrt{\pi}/2)Kn$ ) 的概念, 为了方便分子动力学模拟结果与之对比, 本文中也采用了这种表示方法.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 $k = 5.0$ 时 Couette 流动的模拟结果与分析

Couette 流动是以相同的速度沿相反方向分别移动上下壁面驱动气体流动而获得的. 固定温度下, 通道中不同的密度会导致气体分子平均自由程的变化, 通过改变通道的高度使流动的克努森数保持一致. 为了考察壁面力场对不同通道高度流动的影响设置第一组算例, 模拟条件细节见表 1.

图 2 显示了  $k = 5.0$  时不同通道高度下的 Couette 流动系统快照图. 为了方便研究近壁面区域气体的流动特性, 将  $Z$  轴坐标原点移到壁面第一层原子的圆心位置. 由于流场密度相对于通道中心为对称分布, 且在主流区域趋于定值, 在图中只截取了距下壁面 2 nm 范围内流场的密度分布. 图 3(a) 为

表 1 固定克努森数下 Couette 流动模拟条件

Table 1. Simulation details of Couette flows under determined  $k$ .

$\rho/\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$\lambda/\text{nm}$	$H/\text{nm}$	$Kn$	$k$
3.73	30.75	5.45	5.64	5.0
1.86	61.51	10.90	5.64	5.0
1.25	91.80	16.35	5.61	5.0

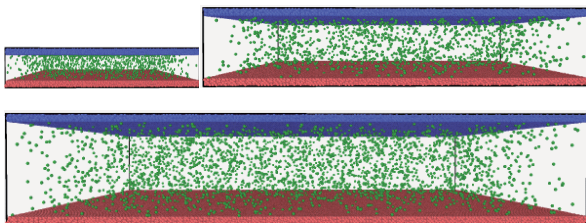


图 2  $k = 5.0$  时不同通道高度下的 Couette 系统快照图  
Fig. 2. Snapshots of various height channel simulation domains at  $k = 5.0$ .

$k = 5.0$  时, 三个高度分别为 5.45, 10.90, 16.35 nm 的纳米通道中流场的密度分布. 图中  $Z = 0$  nm 处的圆圈代表壁面第一层原子,  $Z = 1.02$  nm 处的虚线为近壁区域与主流区的分界线. 本文后续的其他图中也采用了相同的表示方法. 由图 3(a) 可知, 随着气体分子进入近壁区域后, 在离壁面约 0.8 nm 处, 气体分子密度开始增大, 在 0.31 nm 处达到峰值后急剧下降, 直至变为零. 壁面力场是导致气体分子密度出现上述分布规律的主要原因. 由于壁面力场的作用, 气体分子在壁面附近停留的时间变长, 导致气体分子在壁面附近出现集聚现象. 随着气体分子距离壁面越来越近, 气体分子受到的壁面吸引力逐渐增大, 气体密度出现快速增大的趋势. 当气体分子距离壁面很近时, 壁面原子对气体的吸引力转变为排斥力, 气体密度随之减小. 图 3(b) 为

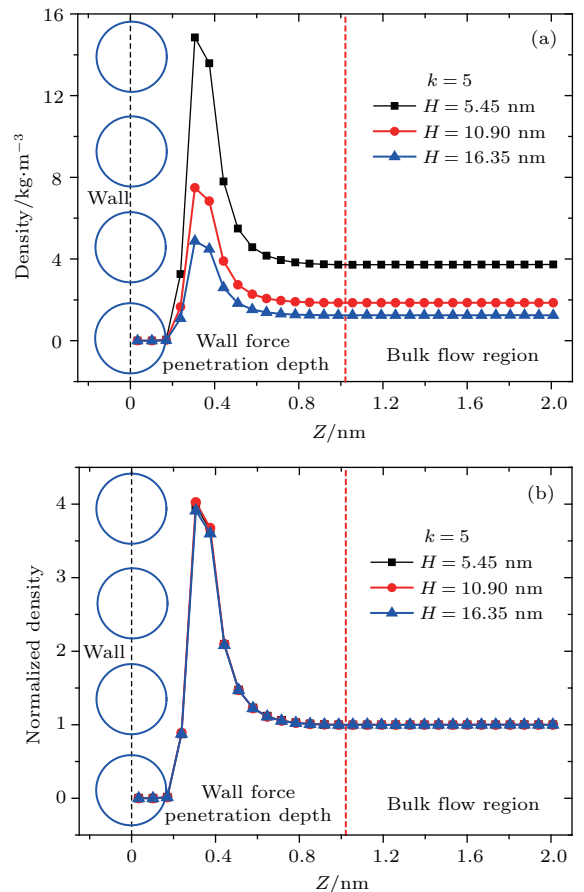


图 3 (a) 不同通道高度的流场密度分布; (b) 分别采用通道中心密度对各个流场的密度进行归一化处理得到的归一化密度分布

Fig. 3. (a) Density and (b) normalized density distributions for  $k = 5.0$  flows inside 5.35, 10.9, and 16.35 nm height channels, respectively. Normalizations are made using the channel center densities of 3.73, 1.86, 1.25  $\text{kg}/\text{m}^3$ .

采用各通道中心的密度 (3.73, 1.86, 1.25 kg/m<sup>3</sup>) 分别对各个流场的密度进行归一化处理后得到的归一化密度分布, 发现尽管通道内的密度不同, 但是归一化密度的分布却是一致的, 这说明近壁面区域的密度分布变化规律是壁面力场作用的结果, 密度的变化趋势只取决于气体与壁面的相互作用势能模型, 而与通道高度和气体密度无关.

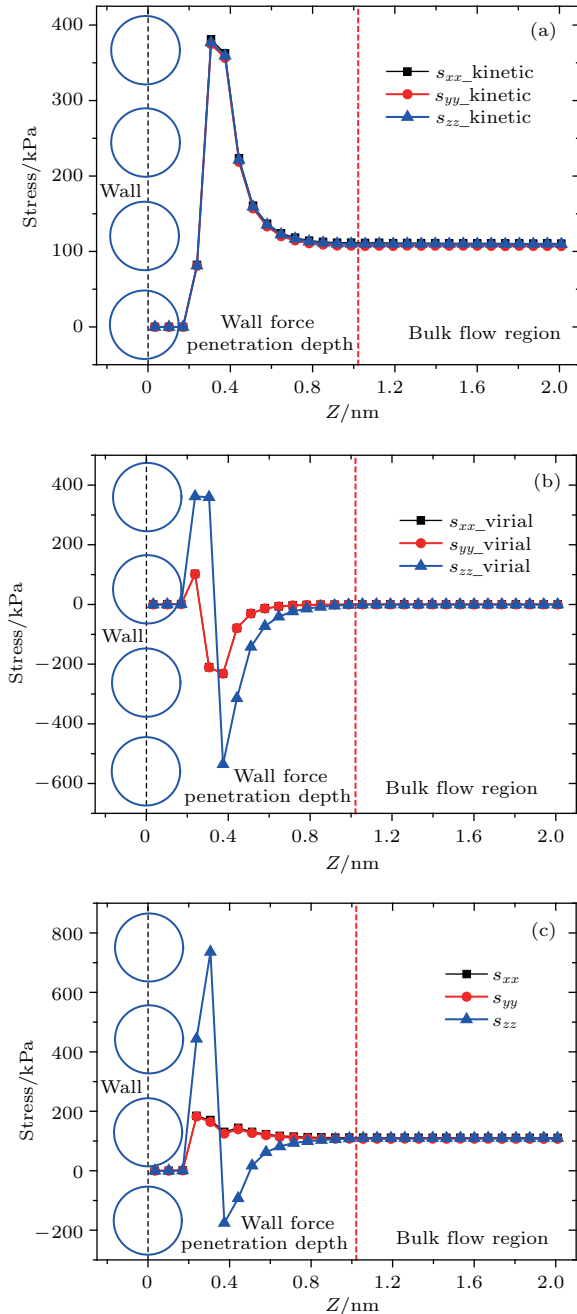


图4 通道高度为 10.90 nm, 密度为 1.86 kg/m<sup>3</sup> 情况下流场内的 (a) 正应力的动力学分量分布, (b) 正应力的位力分量分布, (c) 正应力分布

Fig. 4. Kinetic (a) and virial (b) components of the normal stress distribution (c) for  $k = 5.0$  flows inside 10.9 nm height channels with the density of 1.86 kg/m<sup>3</sup>.

为了了解 Couette 流动中正应力的分布规律, 对通道高度为 10.9 nm, 密度为 1.86 kg/m<sup>3</sup> 条件下通道内的正应力分布进行详细的分析. 图 4(a)—图 4(c) 分别为动力学项、位力项及二者相叠加后得到的正应力各分量分布曲线. 由图可知, 在通道的主流区, 由于气体密度相对较小, 导致气体分子间距较大, 同时又不受壁面作用力的影响, 正应力的位力项趋近于零, 正应力主要由动力学项贡献. 在近壁面区域, 由于壁面作用力的影响, 位力项增大到和动力学项同一量级. 此时, 位力项和动力学项共同决定了近壁面区域的正应力分布. 正应力分布在近壁区域呈现出各向异性的特征, 其  $s_{xx}$ ,  $s_{yy}$  分量分布一致, 但与  $s_{zz}$  分量的分布不同. 表面力场的各向异性分布通过影响位力项的分布进而导致正应力各向异性.

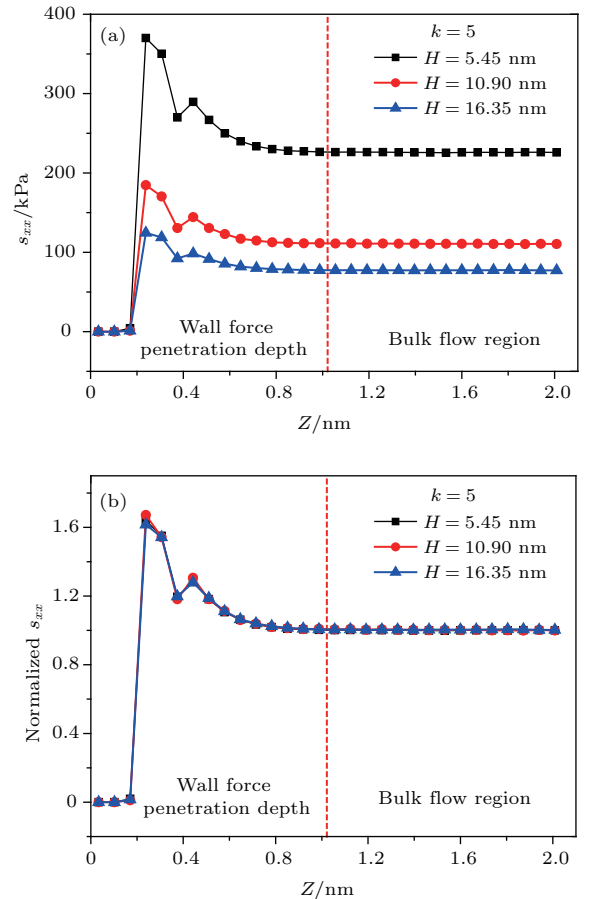


图5 (a) 不同通道高度的流场内正应力  $s_{xx}$  分量分布; (b) 分别采用通道中心压力对各个流场的正应力进行归一化处理得到归一化正应力  $s_{xx}$  分量分布

Fig. 5. (a)  $s_{xx}$  and (b) normalized  $s_{xx}$  distributions for  $k = 5.0$  flows inside 5.35, 10.9, and 16.35 nm height channels, respectively. Normalizations are made using the channel center normal stress of 222.87, 109.2, 76.23 kPa.

图 5(a) 与图 6(a) 分别为不同通道高度(5.45, 10.90, 16.35 nm)下正应力的  $s_{xx}$  及  $s_{zz}$  分量的分布曲线, 分别采用各通道中心区域的压力(222.87, 109.2, 76.23 kPa)对正应力各分量进行归一化处理得到图 5(b) 与图 6(b) 所示的归一化正应力分布. 结果显示近壁区域内不同通道高度下的正应力分布趋势一致, 这表明相同克努森数条件下, 正应力分布规律是由表面力场决定的, 与通道高度和密度无关.

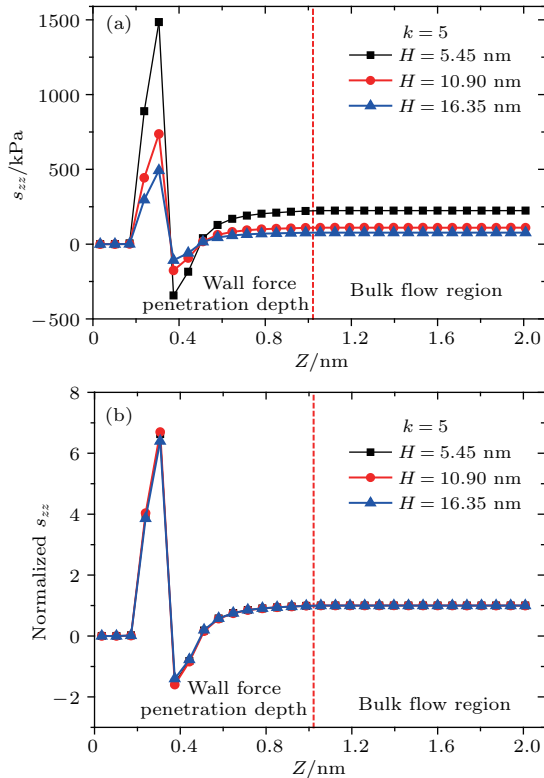


图 6 (a) 不同通道高度的流场内正应力的  $s_{zz}$  分量分布; (b) 分别采用通道中心压力对各个流场的正应力进行归一化处理得到的归一化正应力的  $s_{zz}$  分量分布

Fig. 6. (a)  $s_{zz}$  and (b) normalized  $s_{zz}$  distributions for  $k = 5.0$  flows inside 5.35, 10.9 and 16.35 nm height channels, respectively. Normalizations are made using the channel center normal stress of 222.87, 109.2, 76.23 kPa.

采用壁面速度  $U_w$ (63.48 m/s) 及通道高度  $H$ (5.45, 10.90, 16.35 nm) 分别对流动速度分布和高度进行归一化处理, 得到  $k = 5.0$  时各流场的无量纲速度分布如图 7 所示. 由于流场速度分布为反对称分布, 在图中只展示了通道下半部分的无量纲速度分布. 此外, 给出了 TMAC 为 0.76 和 1.00 时的线性玻尔兹曼方程 (LBE) 的理论解 [11] 与模拟结果相对比. 结果显示不同通道高度下的无量纲速度分布在主流区域呈线性分布且趋于重合, 与 TMAC

为 0.76 时的理论解符合得比较好. 壁面作用力的影响范围为 1.02 nm, 由于通道的高度不同, 导致近壁面区域所占通道的比例也不同. 因此, 通道越窄, 壁面作用力对流动的影响也就越大. 和理论预测的结果不同, 近壁面区域内气体的速度迅速增大并在表面达到最大值 (约  $0.75U_w$ ), 呈现出与解析解截然不同的分布规律. 为了更加详细地阐明壁面作用力的影响, 截取了距下壁面 2 nm 范围内流场的速度分布如图 8 所示. 从图中可以看到, 尽管通道的高度和剪切率不同, 但气体速度在近壁面区域内的分布却是一致的. 但随着气体远离壁面, 壁面不再对气体分子施加作用力, 剪切应力开始主导气体的流动, 由于流动的剪切率不同, 速度分布逐渐出现分离.

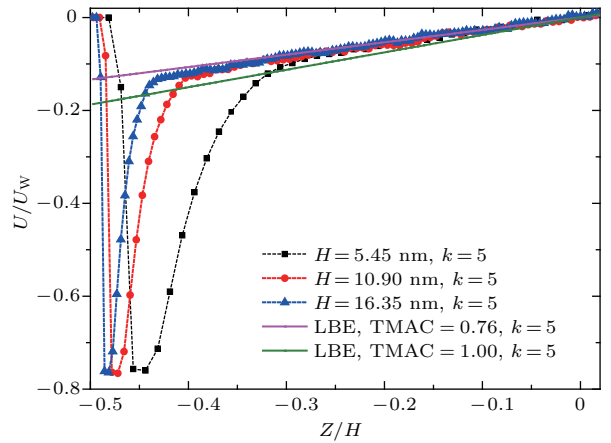


图 7  $k = 5.0$  时, MD 计算的流场无量纲速度分布及 TMAC = 0.76 与 1.00 下的线性玻尔兹曼方程解析解  
Fig. 7.  $k = 5.0$  flow normalized velocity profiles of MD results and linearized Boltzmann solutions at TAMC = 0.76 and 1.00.

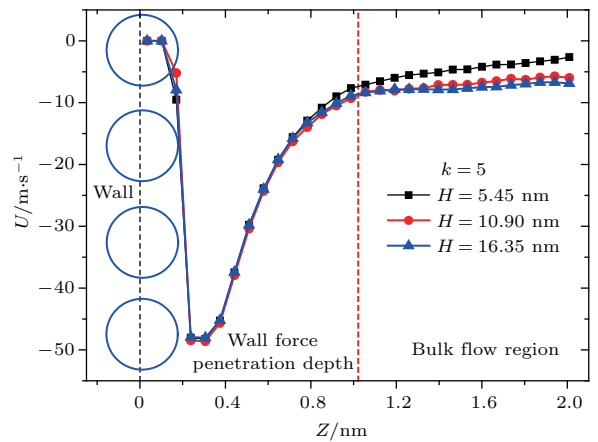


图 8  $k = 5.0$  时距下壁面 2 nm 范围内流场的速度分布  
Fig. 8. Velocity profiles of  $k = 5.0$  flows as a function of channel height within 2 nm distance from the bottom walls.

图 9(a) 为不同通道高度及密度情况下流场内的剪切应力分布, 由于流场剪切应力的分布相对于通道中心为对称分布且在主流区域趋于定值, 在图中只截取了距下壁面 2 nm 范围内流场的剪切应力分布. 从图 9(a) 中可以看到, 大部分区域的剪切应力趋于定值, 只是在近壁面约一个原子直径 ( $\sigma_{Ar} = 0.3405$  nm) 处出现突变. 分别采用通道中心的剪切应力 ( $-25.74, -12.74, -8.68$  kPa) 对各个流场的剪切应力进行归一化处理, 得到图 9(b) 所示的归一化剪切应力分布, 结果显示对于不同通道高度, 归一化剪切应力分布一致. 这表明相同克努森数条件下, 剪切应力的分布规律由表面力场决定, 与通道高度和密度无关.

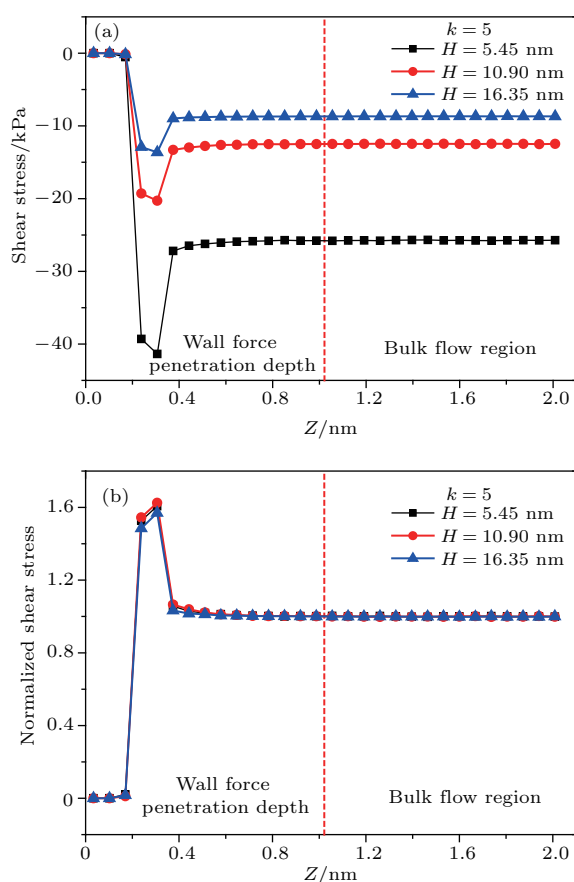


图 9 (a) 不同通道高度的流场内剪切应力分布; (b) 分别采用通道中心的剪切应力对各个流场的剪切应力进行归一化处理得到的归一化剪切应力分布  
Fig. 9. (a) Dimensional and (b) normalized shear stress distributions of for  $k = 5.0$  flows inside 5.35, 10.9, and 16.35 nm height channels, respectively.

为了解释表面力场对剪切应力的影响规律, 图 10 给出了通道高度为 10.9 nm、密度为  $1.86$  kg/m<sup>3</sup> 情况下流场内剪切应力的动力学项、位力项及二者相叠加后得到的剪切应力分布曲线.

从图中可以看到, 剪切应力的位力项在大部分区域为零, 剪切应力的大小由动力学项决定. 但是在近壁面约一个原子直径 ( $\sigma_{Ar} = 0.3405$  nm) 的范围内, 剪切应力的位力项突然增大, 同时动力学项减小, 值得注意的是, 在这个区域内壁面排斥力是占主导地位的.

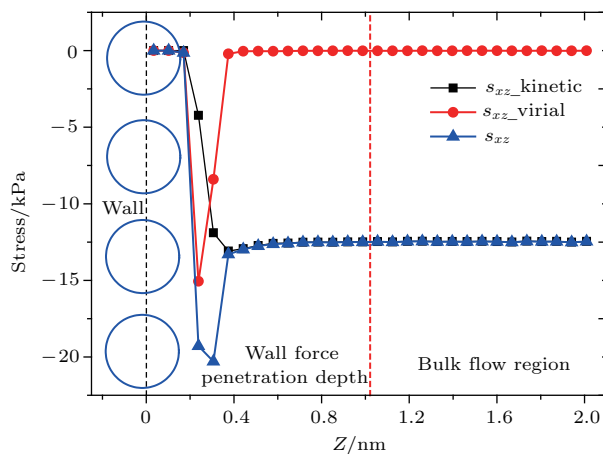


图 10 通道高度为 10.90 nm, 密度为  $1.86$  kg/m<sup>3</sup> 情况下流场内的剪切应力的动力学分量分布、剪切应力的位力分量分布及二者相加后的剪切应力分布  
Fig. 10. Kinetic and virial components of the shear stress distribution for  $k = 5.0$  flows inside 10.9 nm height channels with the density of  $1.86$  kg/m<sup>3</sup>.

总结上述密度、速度及应力的分布规律, 发现在相同克努森数条件下, 近壁面区域内的密度、速度及应力分布规律与通道的高度及密度无关, 仅与气体与表面的相互势能作用相关. 由于气体密度相对较小, 当单个气体分子与壁面相互作用时, 周围气体分子对该分子的分子间作用力相对于壁面对其的作用力几乎可以忽略, 所以在近壁区域内, 气体的宏观参数如密度、速度及应力仅表现出对壁面力场的依赖性关系. 基于气体动力学理论, 处于自由分子流领域 ( $Kn \rightarrow \infty$ ) 的 Couette 流动的剪切应力<sup>[37]</sup>为

$$\tau_{\infty} = -\frac{\alpha}{2-\alpha} \rho (2U_w) \sqrt{\frac{RT_w}{2\pi}}, \quad (6)$$

式中  $\rho$  为来流密度,  $R$  为理想气体常数,  $T_w$  为壁面温度 (298 K);  $\alpha$  为切向动量适应系数 (TMAC), 它代表气体分子在壁面发生漫反射的部分, 而剩下的  $(1-\alpha)$  部分则发生镜面反射. 根据之前近壁区域内的流动规律, 我们推断切向动量适应系数也应与通道的高度与密度无关, 其大小仅取决于气体与壁面的相互势能用. 对于过渡流领域的流动, 由于需要考虑有限克努森数对剪切应力的影响, 不能直接用



(6)式计算切向动量适应系数的大小,因此采用(7)式对处于过渡流领域的 Couette 流动的剪切应力进行修正<sup>[38]</sup>,该修正被证明对过渡流和滑移流领域的流动都是有效的.

$$\frac{\tau}{\tau_{\infty}} = \frac{aKn^2 + 2bKn}{aKn^2 + cKn + b},$$

$$a = -0.5277, b = 0.6030, c = 1.6277. \quad (7)$$

将(6)式与(7)式联立,结合分子动力学模拟计算的剪切应力值,得到气体分子对壁面的 TMAC 值.对于本文中的三个算例,通道中心的剪切应力分布分别为 -47.43, -23.71, -15.89 kPa.通过计算,对应的 TMAC 值分别为 0.76, 0.75, 0.76,结果表明 TMAC 的大小趋于定值,且与前文中线性玻尔兹曼方程所预测的 TMAC 值 0.76 相符合,直接证明了切向动量适应系数大小与通道高度及密度无关的推论的正确性.

### 3.2 势能系数对流动的影响

为了研究气体与壁面势能作用强度对纳米通道内气体流动特性及切向动量适应系数的影响规律,针对通道高度为 10.9 nm 的 Couette 气体流动展开模拟,改变壁面势能系数的大小,同时保持通道中心区域的气体密度一致,统计获得流场内密度、速度及剪切应力分布.模拟条件设置见表 2.

图 11 为不同壁面势能系数下 Couette 气体流动系统快照图.图 12 为不同壁面势能系数下的纳米通道中距下壁面 2 nm 范围内流场的密度分布.

结果显示不同壁面势能系数下,主流区的密度分布一致.在近壁面区域内,随着壁面势能系数的增大,壁面原子对气体分子的吸引力增强,气体分子的密度呈指数增长,特别是在  $C = 4.0$  时,在距壁面约一个原子直径处,密度达到峰值  $453.29 \text{ kg/m}^3$ ,表明壁面上出现了明显的气体分子吸附层,在流动系统快照图中也可以明显地观察到吸附层.

通道内的无量纲速度分布如图 13(a) 所示,在整个流动区域气体速度随着壁面势能系数的增大而增大;在流动的主流区域,速度为线性分布,线性分布的斜率随着壁面势能系数的增大而增大.近壁面区域的速度分布如图 13(b) 所示,由于壁面力场的作用,导致气体速度急剧增大,直到在距壁面约一个分子直径处达到峰值.气体速度的峰值随着势能系数的增大而增大,当  $C = 4.0$  时,由于气体分子被壁面大量吸附而导致速度峰值和壁面速度达到了一致,壁面速度滑移消失.

速度线性分布的斜率即 Couette 流动的剪切率,剪切率和剪切应力的大小成正比关系.不同壁面势能系数下的剪切应力分布如图 14 所示,剪切应力在主流区域为定值,其大小随着势能系数的增大而增大,而且越来越逼近切向动量适应系数为 1.0 时的理论值 (21.34 kPa).在靠近壁面约一个原子直径 (0.3405 nm) 的区域内,剪切应力突然增大到峰值,该峰值也随着势能系数的增大而增大.值得注意的是,当  $C = 4.0$  时,由于壁面的气体分子吸附层的存在,导致了剪切应力在近壁面区域的分布出现了一定的扭曲现象.

表 2 不同壁面势能系数下 Couette 流动模拟条件  
Table 2. Simulation details of Couette flows under different potential coefficients.

$C$	$\rho/\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$\lambda/\text{nm}$	$H/\text{nm}$	$Kn$	$k$
0.5, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0	3.73	60.51	10.90	5.64	5.0

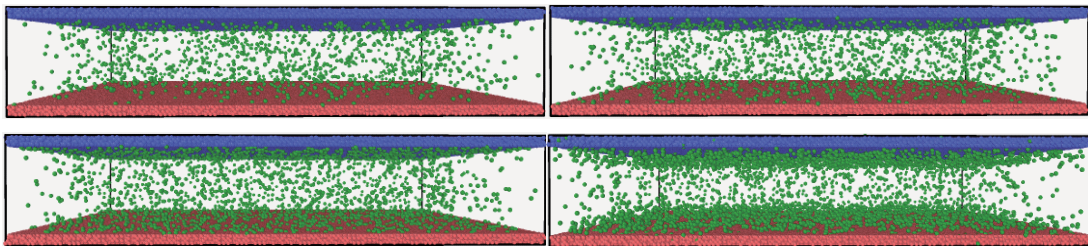


图 11  $C = 1.0-4.0$  时的 Couette 流动系统快照  
Fig. 11. Snapshots of Couette flows with various  $C(1.0-4.0)$  values.

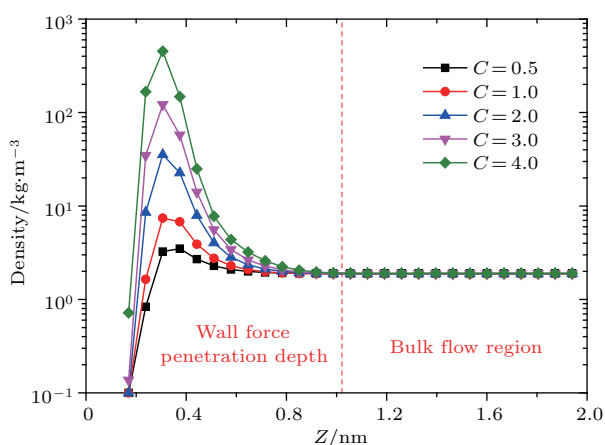


图 12 不同壁面势能系数下纳米通道中的密度分布  
Fig. 12. Density distribution for  $k = 5.0$  flows with various  $C$  values inside  $10.9 \text{ nm}$  height channels with the density of  $1.86 \text{ kg/m}^3$  in bulk flow.

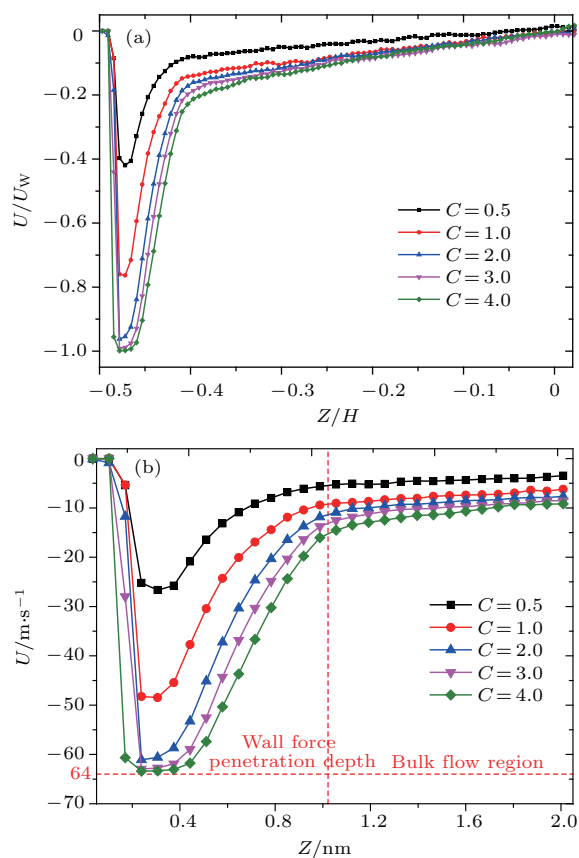


图 13 (a) 不同壁面势能系数下流场归一化速度分布; (b) 不同壁面势能系数下距下壁面  $2 \text{ nm}$  范围内流场的速度分布  
Fig. 13. (a) Normalized velocity profiles of flows with various gas-surface potential strength ratios as a function of normalized channel height ( $Z/H$ ); (b) velocity profiles of flows with various gas-surface potential strength ratios as a function of channel height within  $2 \text{ nm}$  distance from the bottom walls.

根据前文中剪切应力与克努森数的关系, 得到不同壁面势能系数下气体分子对壁面的切向动量

适应系数如图 15 所示. 由图可知, 切向动量适应系数随壁面势能系数的增大而增大. 当  $C = 0.5$  时  $\text{TMAC} = 0.63$ , 按照切向动量适应系数的定义, 有 63% 的气体分子在壁面发生漫反射; 当  $C = 4.0$  时  $\text{TMAC} = 0.96$ , 此时几乎所有气体分子都会在壁面发生漫反射. 上述结果说明势能系数越大, 壁面对气体分子的势能作用力越强, 则气体分子就越容易在壁面发生漫反射.

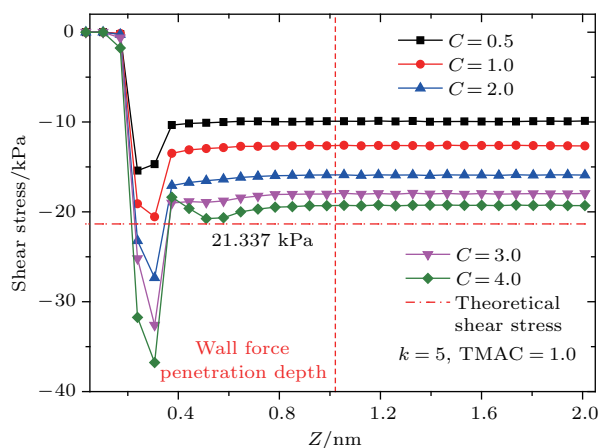


图 14 不同壁面势能系数下流场内剪切应力分布  
Fig. 14. Shear stress distributions of flows with various gas-surface potential strength ratios as a function of channel height ( $Z$ ) within  $2 \text{ nm}$  distance from the bottom walls.

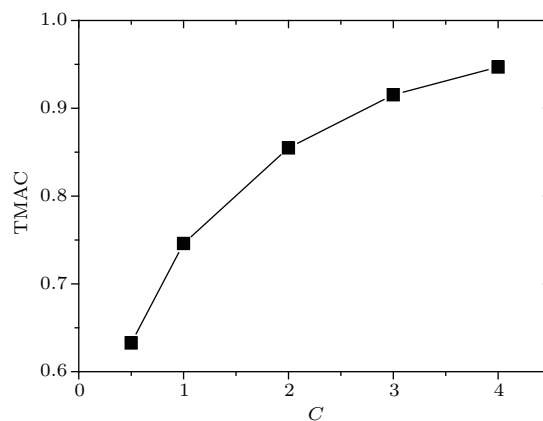


图 15 不同壁面势能系数下的切向动量适应系数  
Fig. 15. TMAC values for  $k = 5.0$  flows under different gas-surface potential strength ratios.

## 4 结 论

采用分子动力学模拟方法研究了处于过渡流领域的纳米通道内剪切力驱动的气体流动, 着重对近壁面区域内气体流动特性进行了分析, 并探讨了壁面势能系数对流动的影响规律, 得到以下结论.

1) 由于壁面作用力的影响, 在距壁面约 1 nm 的范围内形成了不同于主流区的近壁区域. 在该区域内, 气体的密度、正应力由于壁面力场的影响出现剧烈的变化. 壁面力场的影响主导了正应力在近壁区域的各向异性分布特性. 在相同的克努森数条件下, 对于不同通道高度及密度的情况, 将密度及正应力归一化处理后呈现出分布的一致性; 气体在壁面上的速度滑移明显小于理论预测值, 且近壁区域的速度分布不受通道高度及气体密度的影响.

2) 在不受壁面作用力影响的主流区域, 气体的流动规律符合气体动力学定律, 密度、正应力、剪切应力均为恒定值. 气体速度分布符合应力-应变的线性响应关系, 通过剪切应力与克努森数的关联, 预测了气体分子对特定壁面条件下的切向动量适应系数. 将得到的切向动量适应系数应用到线化玻尔兹曼方程的求解中, 得到的速度分布理论解在主流区域与分子动力学模拟结果符合得很好, 证明通过剪切应力计算切向动量适应系数是一种有效的预测方法.

3) 随着壁面势能系数的增大, 近壁面区域内的密度随之增大, 当壁面系数增大到一定程度时, 气体分子吸附在表面形成了吸附层; 壁面势能系数的变化对流场内的速度分布影响是全局性的, 近壁区域的速度随着势能系数的增大而增大, 并最终和壁面速度一致, 剪切应力随着势能系数的增大而增大, 并导致主流区的剪切率随之增大; 切向动量适应系数随着壁面势能系数的增大而增大, 气体分子在势能相互作用强的壁面更容易发生动量适应.

## 参考文献

- [1] Ekinci K L, Roukes M L 2005 *Rev. Sci. Instrum.* **76** 061101
- [2] Verbridge S S, Craighead H G, Parpia J M 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 013112
- [3] Boettcher U, Li H, Callafon R A, Talke F E 2011 *IEEE T. Magn.* **47** 1823
- [4] Song H Q, Yu M X, Z H U W Y, Zhang Y, Jiang S X 2013 *Chin. Phys. Lett.* **30** 014701
- [5] Tsien H S 1964 *J. Aero. Sci.* **13** 653
- [6] Zhang Z Q, Zhang H W, Ye H F 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 154101
- [7] Zhang H W, Zhang Z Q, Zheng Y G, Ye H F 2010 *Phys. Rev. E* **81** 066303
- [8] Sone Y, Takata S, Ohwada T 1990 *Euro. J. Mech. B: Fluids* **9** 273
- [9] Taheri P, Torrilhon M, Struchtrup H 2009 *Phys. Fluids* **21** 017102
- [10] Dehdashti E 2016 *Chin. Phys. B* **25** 024702
- [11] Bird G A 1994 *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Oxford: Oxford University Press) pp199–206
- [12] Fan J, Shen C 1999 *J. Comput. Phys.* **167** 393
- [13] Rapaport D C 2004 *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (New York: Cambridge University Press) pp4–5
- [14] Thompson P A, Troian S M 1997 *Nature* **389** 360
- [15] Zhu Y X, Granick S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 106102
- [16] Cao B Y, Sun J, Chen M, Guo Z Y 2009 *Int. J. Mol. Sci.* **10** 4638
- [17] Finger G W, Kapat J S, Bhattacharya A 2007 *J. Fluid Eng.-T. ASME* **129** 31
- [18] Sun J, Li Z X 2008 *Mol. Phys.* **106** 2325
- [19] Sun J, Li Z X 2010 *Comput. Fluids* **39** 1645
- [20] Markvoort A J, Hilbers P A J, Nedeá S V 2005 *Phys. Rev. E* **71** 066702
- [21] Arya G, Chang H C, Maginn E J 2003 *Mol. Simul.* **29** 697
- [22] Cao B Y, Chen M, Guo Z Y 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 091905
- [23] 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]
- [24] Xie H, Liu C 2012 *AIP Adv.* **2** 042126
- [25] Barisik M, Beskok A 2011 *Microfluid Nanofluid* **11** 269
- [26] Barisik M, Beskok A 2012 *Microfluid Nanofluid* **13** 789
- [27] Bao F B, Huang Y L, Qiu L M, Lin J Z 2014 *Mol. Phys.* **113** 561
- [28] Bao F B, Huang Y L, Zhang Y H, Lin J Z 2015 *Microfluid Nanofluid* **18** 1075
- [29] Yang Y T, Callegari C, Feng X L, Roukes M L 2011 *Nano Lett.* **11** 1753
- [30] Zhang W M, Meng G, Zhou J B, Chen J Y 2009 *Sensors* **9** 3854
- [31] Wu L, Bogy D B 2002 *J. Tribol. -T. ASME* **124** 562
- [32] Allen M P, Tildesley D J 1991 *Computer Simulation of Liquids* (Oxford: Oxford University Press) pp145–146
- [33] Hook J R, Hall H E 1991 *Solid State Physics* (Chichester: Wiley) pp96–106
- [34] Evans D J, Hoover W G 1986 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **18** 243
- [35] Irving J H, Kirkwood J G 1950 *J. Chem. Phys.* **18** 817
- [36] Todd B D, Evans D J, Davis P J 1995 *Phys. Rev. E* **52** 1627
- [37] Fukui S, Shimada H, Yamane K, Matsuoka H 2005 *Microsyst. Technol.* **11** 805
- [38] Bahukudumbi P, Park J H, Beskok A 2003 *Microscale Thermophy. Eng.* **7** 291

# Molecular dynamics simulations of surface effects on Couette gas flows in nanochannels\*

Zhang Ran Xie Wen-Jia Chang Qing Li Hua<sup>†</sup>

(College of Aeronautics and Astronautics, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

( Received 21 December 2017; revised manuscript received 16 January 2018 )

## Abstract

Molecular dynamics method is used to investigate gas flows in nanoscale channels. A set of Couette gas flows with the same Knudsen number but different channel heights and densities is simulated to study the dimensional effects on dynamically similar flow conditions. Results show that the gas flow in the channels is divided into two regions: near wall region affected by a wall force field and bulk flow region affected by no wall force field. The flow characteristics in the bulk flow region are in good accordance with the kinetic theory predictions, which are characterized by constant density, normal stress, shear stress and linear velocity distribution while within the near wall region, the velocity, density, normal stress and shear stress distributions exhibit deviations from the kinetic theory predictions. The density and velocity sharply increase, accompanied with a single peak appearing. The normal stress which is dominated by the surface virial is anisotropic and changes drastically. Shear stress value is constant in bulk flow region and part of the near wall region, while the surface virial induces variation at a place about one atom diameter far from the wall. In the near wall region, the normalized density, velocity and stress tensor are constant under different channel heights and densities, which indicates that the gas flow characteristics in this area are determined by the wall force field. Besides, the tangential momentum accommodation coefficient (TMAC) values for different cases can be obtained through the relationship between TAMC and shear stress. It is found that under the same Knudsen number, the TMAC remains constant no matter what the height and density are. Furthermore, another set of Couette gas flows with different gas-surface potential strength ratios but the same channel height and density is simulated to study the gas-surface interaction effects on nanoscale gas flow. The results show that the gas density and velocity in the near wall region increase with increasing potential strength ratio between wall atoms and gas molecules. Large potential strength ratio cases ( $C \geq 3.0$ ) result in velocity sticking on the surface, which is induced by the gas molecule accumulation and surface adsorption. Using the same approach, the TMAC values for various potential strength ratios are calculated, varying from 0.63 to 0.96 for different cases ( $C = 0.5-4.0$ ), which indicates that the stronger the potential energy acting on the gas molecules, the more easily the gas molecules generate the diffuse reflection on the walls

**Keywords:** nanoscale gas flow, surface force effects, shear stress, tangential momentum accommodation coefficient

**PACS:** 47.61.-k, 68.47.-b, 47.45.Gx, 47.11.Mn

**DOI:** 10.7498/aps.67.20172706

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11472004).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [zr07024221@126.com](mailto:zr07024221@126.com)