

二维无阀纳米泵内涡流调控与输运效率反常提升机制研究*

吴增杨 陈源 周晓艳[†] 陆杭军[‡]

(浙江师范大学, 物理与电子信息工程学院, 金华 321004)

涡流是流体运动中的关键动力学特征, 在能量传递、物质混合及流动调控过程中发挥主导作用. 当流体被限制在纳米尺度, 涡流的形成与调控呈现出与宏观尺度显著不同的特征. 本工作采用全原子分子动力学模拟方法, 系统研究了机械振动驱动下二维无阀纳米泵内水的输运行为, 重点探讨了涡流现象对水输运效率的调控机制. 模拟结果表明, 在纳米孔道中引入尺寸适配的扰流结构后, 无阀纳米泵的水输运效率得到反常提升, 其水流量较光滑无扰流结构纳米通道提高约4~10倍. 本文进一步分析了该反常提升效应背后的微观物理机制, 揭示了扰流结构诱导的涡流结构演变与流体输运特性之间的内在关联. 本研究成果不仅丰富了纳米尺度涡流调控与流体输运的基础理论, 更为高性能二维纳流体器件的设计、制备及性能优化提供了重要的理论依据和技术参考.

关键词: 分子动力学; 涡旋; 二维纳米通道; 纳米受限水; 石墨烯

PACS: 47.61.-k, 02.70.Ns, 61.20.Ja, 47.11.-i

1 引言

近年来, 科学技术的快速发展持续推动流体器件特征尺寸向纳米量级迈进^[1-11]. 纳米流体器件将流体限域于纳米空间, 其输运行为与界面主导调控机制均显著区别于宏观体系, 已成为纳流控领域研究的核心科学问题, 涉及凝聚态物理、材料物理、流体力学等多学科深度交叉^[7, 12-15]. 对上述基础科学问题的深入探索, 不仅有助于揭示纳米限域流体的独特性质与反常行为的物理本质, 还为新型纳米流体器件的设计开辟了新路径, 同时为无阀纳米泵^[16]、纳米发电机^[17-19]、离子过滤膜^[9, 20]、离子二极管^[21-23]及纳米流控芯片实验室系统的创新研发提供了理论支撑. 目前, 新型纳米流体器件已在医学、生物学、化学及物理学等多个领域得到

* 基金:国家自然科学基金(批准号: 11875237)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: zxylyu@zjnu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: zjlhjun@zjnu.cn

广泛关注.

当流体通道的特征尺寸从微米级缩小至纳米级时,流体力学进入了表面主导的纳米流体学新领域.在该尺度下,极高的表面体积比显著放大固-液界面效应,深刻改变受限流体的结构与输运性质.在这类超受限体系中,分子离散性占主导地位,黏度、速度分布等连续介质假设不再成立^[11, 13, 24-26].2001年, Hummer 等率先从理论上预言了水分子能够进入直径只有 8.1 Å 的(6,6)型碳纳米管,这些水分子通过氢键相互作用形成有序的一维水链,并能够快速通过碳纳米管. Král 与 Shapiro 从理论上预言,液体分子层包覆于碳纳米管表面并沿其表面滑移时,可在管内产生电流^[27].从此开启了碳纳米管中受限水性质及其应用的相关研究^[28-43].

石墨烯是典型的二维六方蜂窝状纳米材料,兼具优异的化学惰性、热学性能与力学强度,是构筑二维纳米通道的理想材料.近年来,科研工作者已成功制备出狭缝高度可精准调控至埃级(Å)的矩形石墨烯通道^[8, 44-47],实验与模拟结果均证实,水分子在石墨烯狭缝的纳米间隙中会形成有序结构^[48-52].目前研究人员已提出电场驱动、离子浓度梯度驱动、热梯度驱动及毛细效应驱动等多种驱动方式,实现了石墨烯纳米孔道内受限水分子的定向输运,相关研究为纳滤分离、纳米发电机研制及纳米尺度水输运系统构筑等领域奠定了重要的实验与理论基础^[16, 31-37, 39-41, 43, 53-57].

2025年,本课题组以二维石墨烯为基底,提出一种无阀纳米泵模型.该模型利用石墨烯纳米孔道入口的机械振动,打破系统原有的热力学平衡状态与空间对称性,进而实现无压差条件下水分子的定向输运^[16].研究表明,与统一维体系相比存在显著差异,当机械振动频率超过特定阈值时,二维石墨烯狭缝内会产生纳米尺度涡旋,此类涡旋的形成会显著阻碍水分子的定向输运动力学过程,最终导致纳米泵的输水效率降低.

本文在前期研究工作的基础上,通过在二维石墨烯纳米狭缝内修饰纳米扰流结构,实现通道局部结构的调控.该修饰方式虽减小了孔道的有效输运截面积、却可显著提升水分子定向输运效率,最优条件下输运效率可提升一个数量级.机制分析表明,纳米扰流结构的引入可实现狭缝内纳米涡旋的有效重构,通过将入口侧阻碍轴向输运的涡旋转移至挡板后方尾流区,从而协同提升水分子的定向输

运效率.

2. 模拟方法

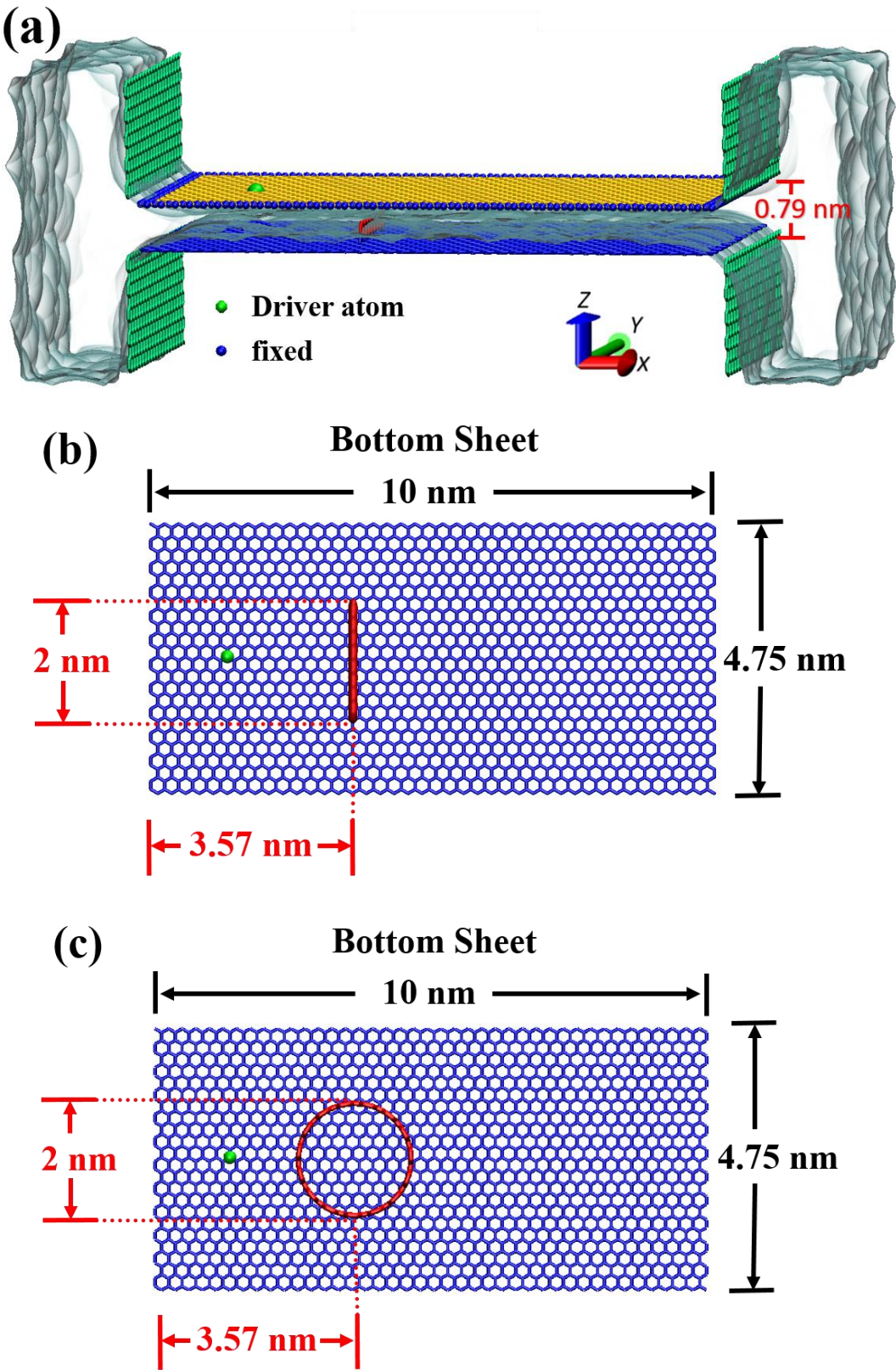


图 1 模拟系统示意图. (a) 左右两侧水库通过由上下两片石墨烯构成的狭缝通道相连，通

道延伸方向为 x 轴. 在通道入口处选取一个碳原子 (以绿色小球标记) 作为无阀纳米泵的驱动原子, 该原子沿垂直石墨烯平面的 z 轴做简谐振荡. 在通道内 x 轴方向距左侧入口 3.57 nm 处、 y 方向居中位置, 修饰一块石墨烯挡板 (红色标记), 其尺寸为 $2\text{ nm} \times 0.3\text{ nm}$ (长 $\times$ 高), 挡板平行于 $y-z$ 面、垂直于 $x-y$ 面. 上方石墨烯片层边缘碳原子, 下方石墨烯片层 (深蓝色) 及两侧用于分割水库的石墨烯片层 (绿色) 均处于冻结状态. 半透明区域为水分子. (b) 修饰矩形扰流板后的石墨烯片层结构示意图. (c) 修饰圆柱扰流柱后的石墨烯片层结构示意图.

Fig. 1 Simulation system. (a) The left and right reservoirs are connected by a slit channel composed of two graphene sheets (upper and lower), with the channel extending along the x -axis. A carbon atom (marked by a green sphere) at the channel entrance is selected as the driving atom of the valveless nano pump, which performs simple harmonic oscillation along the z -axis perpendicular to the graphene plane. A graphene baffle (marked in red) is modified at a position 3.57 nm away from the left entrance (along the x -axis) and in the middle of the y -direction inside the channel, with a size of $2\text{ nm} \times 0.3\text{ nm}$ (length $\times$ height). The baffle is parallel to the y - z plane and perpendicular to the x - y plane. The edge carbon atoms of the upper graphene sheet, the lower graphene sheet (dark blue), and the graphene sheets (green) on both sides used to separate the reservoirs are all frozen. The translucent area represents water molecules. (b) Schematic diagram of the graphene sheet after modifying the rectangle graphene baffle. (c) Schematic diagram of the graphene sheet after modifying the cylindrical graphene baffle.

本研究采用全原子分子动力学模拟方法, 模拟系统如图 1 所示. 系统中间由上下两片单层石墨烯构成纳米通道, 左右两片开口碳平面将水域分割为左右两部分. 石墨烯纳米通道尺寸为 $10\text{ nm} \times 4.75\text{ nm} \times 0.79\text{ nm}$. 为调控涡旋结构, 在距纳米通道左入口 3.57 nm 处的底部石墨烯平面上修饰扰流结构: (a) 一片 $2\text{ nm} \times 0.3\text{ nm}$ 的石墨烯挡板; (b) 直径为 2 nm 圆柱. 为便于讨论, 本文将内置矩形扰流板纳米通道 (rectangular-baffled nanochannel), 记为 Rect-Baffled 通道, 内置空心圆柱扰流柱纳米通道 (cylindrical-baffled nanochannel) 记为 Cyl-Baffled 通道, 无挡板光滑通道 (smooth nanochannel) 记为 Smooth 通道.

模拟中, 扰流结构、纳米通道的下壁以及上壁边缘原子均被固定. 振动原子

沿 z 轴遵循 $z = z_0 - A\sin(2\pi ft)$ 作周期振动，其中 z_0 为振动原子的初始位置， A 为振幅， f 为振动频率。为突出小扰动驱动并避免机械变形诱发的“空化”效应，取 $A = 0.15 \text{ nm}$ 。振动过程中，振动原子邻近碳原子在原子间共价键相互作用下发生协同形变，并与振动原子同步振动。除引入挡板修饰外，其余几何参数与相互作用设置均与前期二维狭缝模型一致^[16]。

分子动力学模拟采用 Gromacs 2016.5 软件^[58]，使用蛙跳算法积分牛顿运动方程，时间步长为 1 fs 。模拟盒子的尺寸为 $14.2 \text{ nm} \times 5.0 \text{ nm} \times 5.2 \text{ nm}$ ，并在各个方向上采用了周期边界条件。系统温度维持在 300 K ，动力学过程允许系统交换热量，使用 $\tau = 0.1 \text{ ps}$ 的 $V - rescale$ 温度耦合。水的模型采用刚性SPC/E模型。石墨烯的完整势能函数由范德瓦尔斯相互作用、二体键伸缩项、三体键角项以及四体二面角项共同构成，其总势能函数表示如下：

$$V_{total} = \sum_{VDW} 4\varepsilon_{cc} \left[\left(\frac{\sigma_{cc}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{cc}}{r} \right)^6 \right] + \sum_{bonds} \frac{1}{2} k_b (r - r_0)^2 \\ + \sum_{angles} \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{dihedrals} \frac{1}{2} k_\xi (\xi - \xi_0)^2$$

其中， $\sigma_{CC} = 0.34 \text{ nm}$ ， $\varepsilon_{CC} = 0.3612 \text{ kJ/mol}$ ，键长 $r_0 = 0.142 \text{ nm}$ ，键角 $\theta_0 = 120^\circ$ ，劲度系数 $k_b = 393960 \text{ kJmol}^{-1}\text{nm}^{-2}$ ， $k_\theta = 527 \text{ kJmol}^{-1}\text{deg}^{-2}$ 和 $k_\xi = 52.718 \text{ kJmol}^{-1}\text{deg}^{-2}$ 。长程静电相互作用采用粒子网格 Ewald (PME) 方法处理，实空间截断距离为 1.4 nm 。短程范德华力的截断距离同样为 1.4 nm 。

3. 结果与讨论

本文利用全原子分子动力学方法，对不同机械振动频率驱动下的无阀纳米泵分别进行 80 ns 模拟，选取后 50 ns 数据用于统计分析。

图 2 对比了不同振动频率下 Smooth 通道，Rect-Baffled 通道与 Cyl-Baffled 通道的水流量 (flux) 情况。水流量的定义如下：

$$flux = \frac{N_{L \rightarrow R} - N_{R \rightarrow L}}{\Delta t},$$

式中， $N_{L \rightarrow R}$ 代表 Δt 时间内由左侧水域进入右侧水域的水分子总数， $N_{R \rightarrow L}$ 代表同期由右侧水域进入左侧水域的水分子总数。

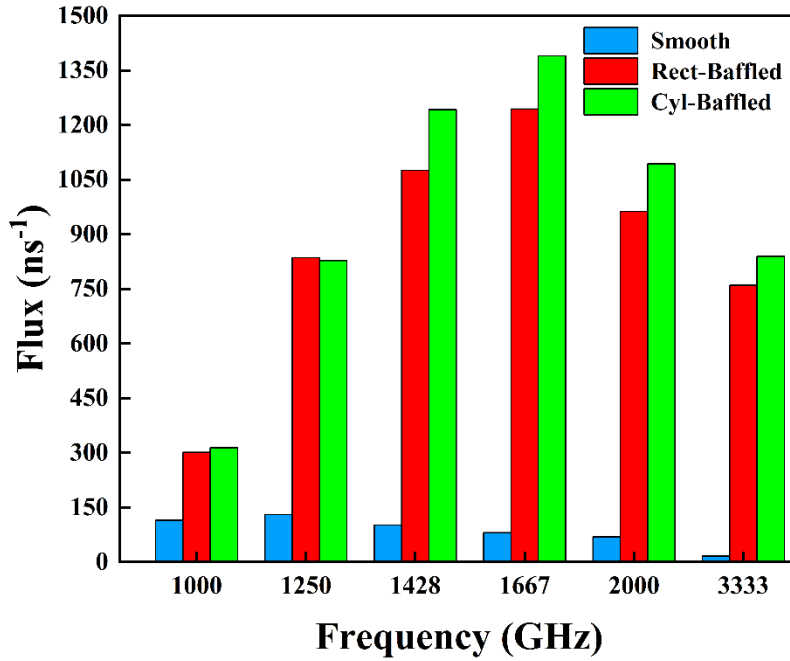


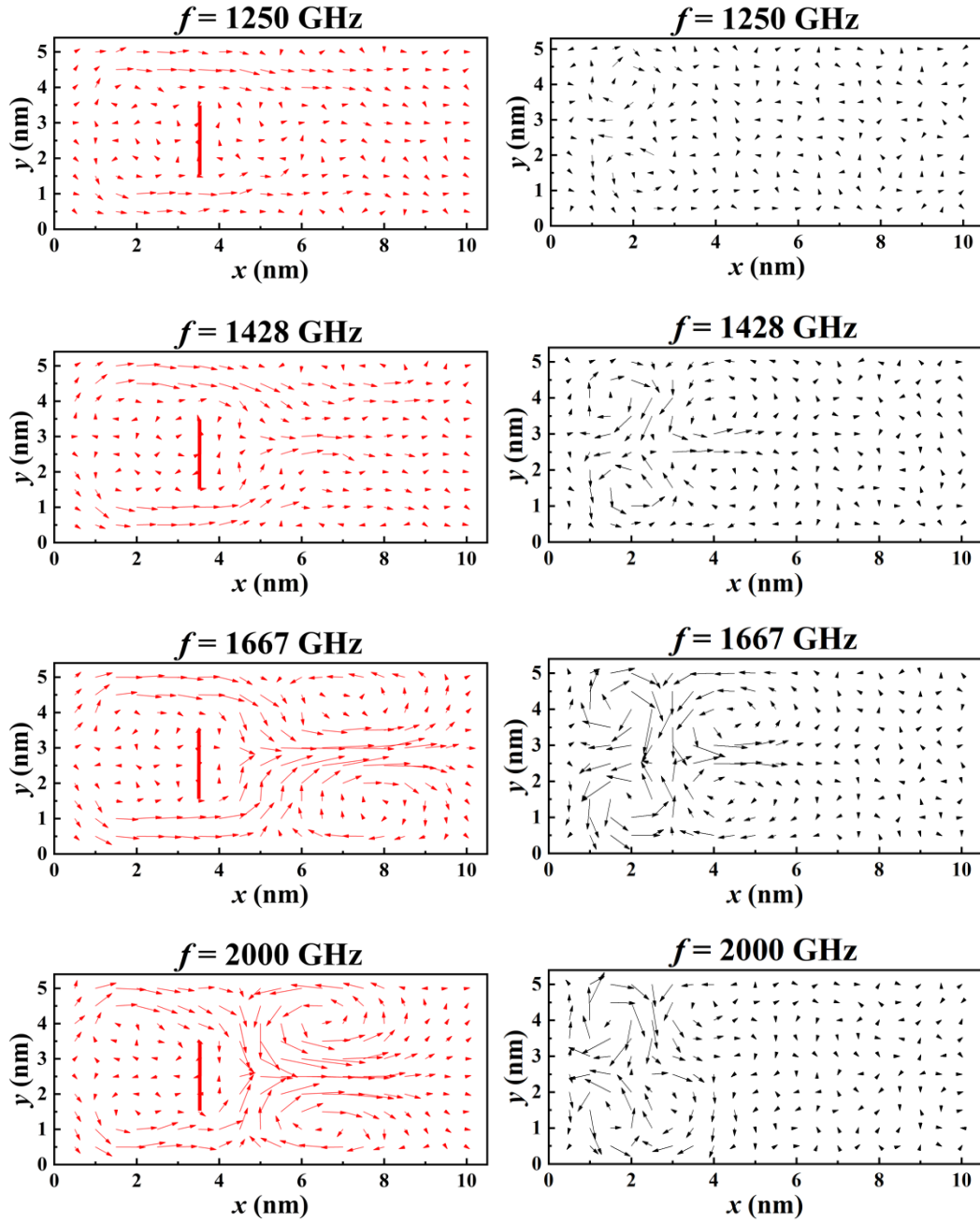
图 2 不同激励振动频率下无挡板光滑通道 (Smooth, 蓝色柱状图)、内置矩形扰流板纳米通道 (Rect-Baffled, 红色柱状图) 与内置圆柱扰流柱纳米通道 (Cyl-Baffled, 绿色柱状图) 的水流量对比。

Fig. 2 Comparison of water flow rates in smooth channel without baffles (Smooth, blue bars), nanochannel with embedded rectangular baffles (Rect-Baffled, red bars) and nanochannel with embedded cylindrical spoilers (Cyl-Baffled, green bars) under different excitation vibration frequencies.

由图 2 可见, 当振动频率处于 1250–4000 GHz 范围内时, Baffled 通道 (Rect-Baffled 通道与 Cyl-Baffled 通道) 的水流量显著高于 Smooth 通道, 提升幅度约为 4–11 倍. Smooth 通道的最大水流量出现在 1250 GHz (约 129 个水分子/ns); Baffled 通道的水流量峰值则出现在 1667 GHz, 其中 Rect-Baffled 通道的流量峰值约为 1250 个水分子/ns, Cyl-Baffled 通道的流量峰值约为 1390 个水分子/ns. 不可思议的是, Rect-Baffled 与 Cyl-Baffled 两类扰流结构均可使纳米泵峰值水流量实现约一个数量级的提升, 且 Cylindrical 构型对输运流量的增强效果更为突出, 比 Rect-Baffled 通道高出 140 个水分子/ns. 三者的共性在于, 水流量都随振动频率呈现先增后降的非单调响应, 差异则在于, Baffled 通道的水流量整体高于 Smooth 通道, 且其水流量峰值位置也发生了明显偏移.

通常情况下，在纳米孔道中引入障碍物会减少通道的有效截面积，增加水流动的阻力，从而降低水流量。然而，在机械振动驱动下的无阀纳米泵中却出现反常现象——引入扰流结构后水流量显著提升。这一反常行为表明，涡旋调控效应在该体系中占据主导地位，超越了几何阻碍效应。

为了深入探究该反常现象的内在机制，本文进一步分析了不同驱动频率下受限在纳米通道内流体的平均速度场（如图 3 所示）。图中左列为 Rect-Baffled 通道内流体的速度场分布情况，右列为 Smooth 通道内流体的速度场分布。



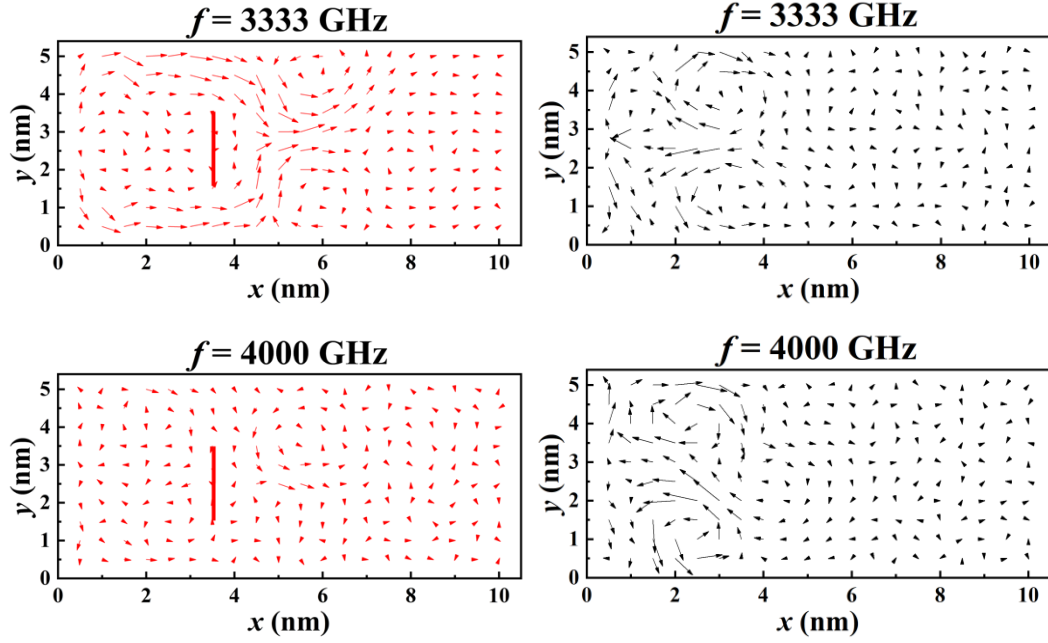


图 3 不同频率下 Rect-Baffled 结构和 Smooth 结构二维纳米通道内的速度矢量分布. 左侧为 Rect-Baffled 通道的速度矢量分布, 其中加粗的红线示意挡板位置; 右侧为无挡板 Smooth 通道的速度矢量分布.

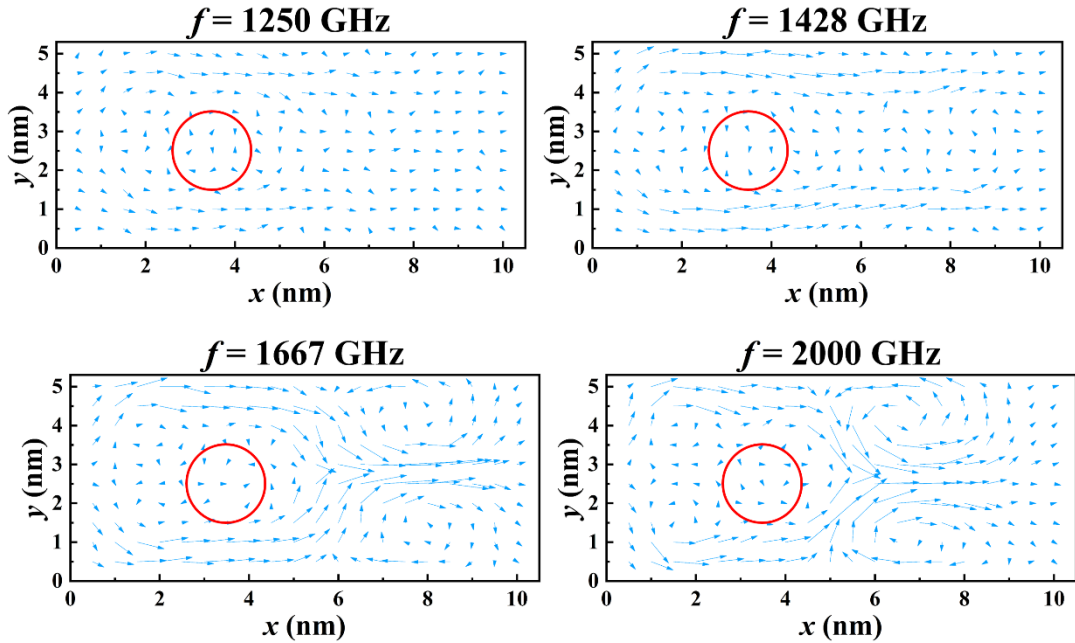
Fig. 3 Velocity vector distributions in two-dimensional nanochannels with Rect-Baffled and Smooth structures at different frequencies. The left panels show the velocity vector distributions of the Rect-Baffled channel, where the bold red line indicates the position of the baffle; the right panels show the velocity vector distributions of the Smooth channel without a baffle.

速度矢量分布结果表明, 挡板修饰对纳米通道内部的流动结构具有显著调控作用, 可实现速度场的有效重构. 对于 Smooth 通道, 当驱动频率处于 1250–4000 GHz 范围内时, 通道入口区域出现明显的涡旋结构, 表明流动状态在该频率区间内发生显著转变. 特别地, 当驱动频率为 1667 GHz 时, 流动结构呈现高度有序对称涡旋对. 在振动原子邻近区域可清晰观测到两组对称分布、旋转方向交替相反的涡旋对, 依次呈现顺时针、逆时针、顺时针、逆时针的旋转排布. 上述涡旋结构的出现与演化, 直接反映了振动驱动下近壁区域流体的局部旋转与动量输运特性, 涡旋结构的存在会阻碍水分子沿通道轴向的定向迁移, 进而导致水流量被限制在较低水平.

引入矩形挡板修饰后的 Rect-Baffled 通道, 在 1250–3333 GHz 驱动频率范围内, 纳米通道入口侧中部的涡旋明显减弱, 实现了对流场的有效调控. 纳米通道中的大部分水分子从挡板两侧穿过, 形成稳定的定向流, 使水分子平均速度矢量

方向更趋一致，其沿通道轴向的速度分量显著大于 Smooth 通道，对应水流量显著提高。当振动频率升至 4000 GHz 时，纳米通道入口侧的涡旋强度仍弱于 Smooth 通道，但轴向平均速度变小，水流量迅速下降；即便如此，该频率下 Rect-Baffled 通道的水流量仍高于 Smooth 通道。

由图 3 中的速度矢量对照可见，Smooth 通道入口侧易形成涡旋型速度场，速度矢量在局部呈闭合循环，轴向速度分量被部分抵消，定向输运受到抑制。引入长方形挡板后的 Rect-Baffled 通道，空间位阻迫使大部分水分子从挡板两侧绕行，但由于上方石墨烯片层的振动，矩形扰流板与石墨烯片层的间距会不断变化，有一小部分水分子能够从矩形扰流板与石墨烯片层间的空隙穿过。由于矩形扰流板的加入使得速度场发生空间重构，靠近入口侧（挡板前方区域）的一对涡旋消失，但挡板后方区域却仍然保留一对涡旋。涡旋形态发生了改变，并沿着纳米通道的轴向方向被拉长。上方涡旋呈逆时针旋转，下方涡旋呈顺时针旋转。二者交界区域流速方向趋于一致，使得该区域水流平均速度显著提升。由此可见，挡板结构并非完全消除涡旋，而是通过重塑涡旋的空间分布与作用范围，强化有效轴向动量传递，最终实现水流通量的提升。



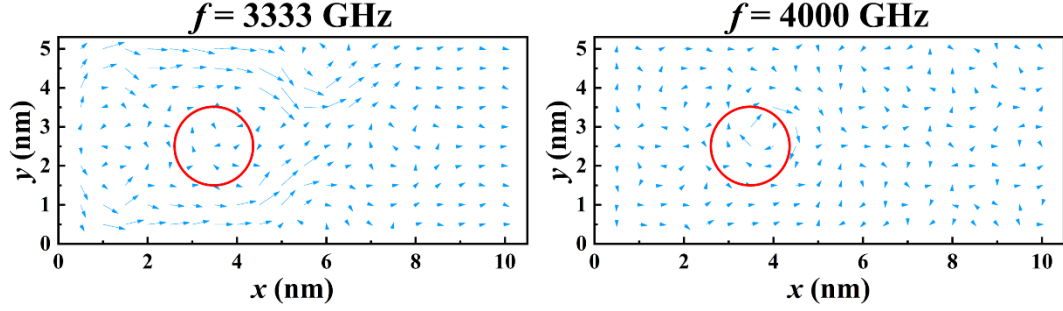


图 4 不同频率下，圆柱型扰流结构二维纳米通道内的速度矢量分布；粗红线代表空心圆柱扰流板的布设位置。

Fig. 4 Velocity vector distribution in the two-dimensional nanochannel with Cyl-Baffled structure at different frequencies. The bold red lines indicate the positions of hollow cylindrical spoilers.

我们进一步模拟了圆柱形扰流柱对流量的影响，其水分子速度矢量分布如图 4 所示。由于上层石墨烯的周期性机械振动，圆柱与石墨烯平面的间距不断在变化，所以仍然有部分水分子可以从圆柱与石墨烯之间的间隙通过。我们这里采用的是空心圆柱，在圆柱内部也充满着水分子。

圆柱形扰流柱的引入对水的速度矢量分布亦具有显著的影响，其作用与矩形扰流板相似，均能有效调控速度场。在 1250–3333 GHz 驱动频率范围内，纳米通道入口侧中部的涡旋明显减弱，实现了对流场的有效调控。纳米通道中的大部分水分子从圆柱两侧绕流而过，形成较为稳定的定向流，使水分子平均速度矢量方向趋于一致，其沿通道轴向的速度分量显著增大，从而提升了定向输运效率。

值得注意的是，对于无挡板的 Smooth 通道，水流量在驱动频率为 1250 GHz 时达到最大值；而引入扰流结构后的 Baffled 通道，其最大水流量对应的驱动频率则出现在 1667 GHz，二者的峰值频率存在明显差异。根据纳米通道石墨烯振动振幅的相关分析^[16]，体系的共振频率为 1667 GHz。然而，Smooth 通道在该频率下的水流量反而低于 1250 GHz 时的流量，其内在原因可从流动调控机制层面进行解释。

已有研究表明^[16]，决定水分子定向输运通量的关键因素主要有两个：动能梯度与涡旋结构。其中，动能梯度是驱动水流定向运动的主要动力，而涡旋结构则是阻碍水分子定向输运的核心因素。在较低驱动频率下，动能梯度占据主导地位；当驱动频率升高时，涡旋结构的抑制作用逐渐凸显并成为主导因素。因此，对于 Smooth 通道体系，水分子的定向输运效率存在最优驱动频率，这是动能梯度的

驱动效应与涡旋结构的阻碍效应相互竞争、共同作用的结果.

与之不同, **Baffled** 通道因引入挡板结构, 涡旋强度被显著削弱, 涡旋结构带来的阻碍作用大幅降低. 此时, 体系的水分子定向输运行为主要由石墨烯共振驱动的动力学梯度主导, 因此共振频率 1667 GHz 恰好对应水流通量的最大值.

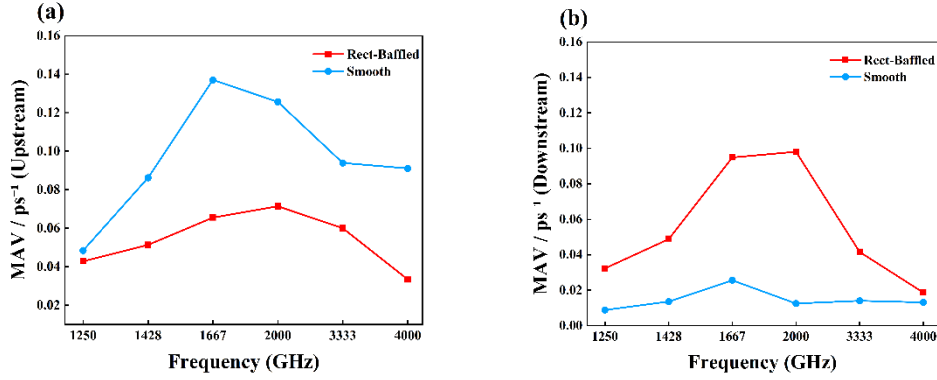


图 5 不同激励频率下 Rect-Baffled 通道与 Smooth 通道中挡板前方 (对应) 区域和挡板后方 (对应) 区域平均绝对涡量随频率的变化曲线. 左图 (a) 为挡板前方 (对应) 区域, 右图 (b) 为挡板后方 (对应) 区域; 红色曲线为 Rect-Baffled 通道, 蓝色曲线为 Smooth 通道.

Fig. 5 Variations of mean absolute vorticity with excitation frequency in the upstream (corresponding) and downstream (corresponding) regions of the spoiler for Rect-Baffled channel and Smooth channel. The left plot shows the upstream region, and the right plot shows the downstream region. The red curves represent the Rect-Baffled channel, and the blue curves represent the Smooth channel.

为了定量分析涡旋, 按挡板位置把通道划分为挡板前方区域和挡板后方区域两部分. 图 5 给出了两个区域的平均绝对涡量随振动频率的变化曲线. 对 Smooth 通道而言, 涡旋主要出现在前方对应区域的激励原子位置附近. 平均绝对涡量随着激励振动频率先增后减, 在 1667 GHz 达到最大值. 这个振动频率对应石墨烯的振幅最大, 而此时水分子的定向输运效率却相对较低, 进一步印证了涡旋对轴向输运的阻碍作用.

平均绝对涡量的大小主要受到石墨烯片层振动影响. 对 Rect-Baffled 通道而言, 平均绝对涡量随激励振动频率也是先增加后减小, 在 2000 GHz 达到峰值, 与 Smooth 通道的平均绝对涡量峰值对应的频率不一致. 而且发现在挡板前方区域 Rect-Baffled 通道平均绝对涡量都要小于 Smooth 通道对应区域的平均绝对涡量, 说明通道中加入挡板能有效减弱挡板前方对应区域的平均绝对涡量, 无挡板

通道入口侧更容易形成强烈的局部循环流动. 这一定量结果与速度矢量图 3 的结果一致, 即 **Smooth** 通道入口侧易形成涡旋型速度场, 而引入矩形扰流板后, 入口侧中部涡旋明显减弱, 水分子更多地沿挡板两侧绕行并形成更稳定的定向流.

平均绝对涡量在扰流板后方与前方有很大的不同, 在 **Rect-Baffled** 通道扰流板后方区域的平均绝对涡量反而要比 **Smooth** 通道对应区域的大, 差不多是 5 倍. 扰流板将原本主要出现在入口侧、会直接抵消轴向运输的涡旋结构重构并转移至挡板后方尾流区.

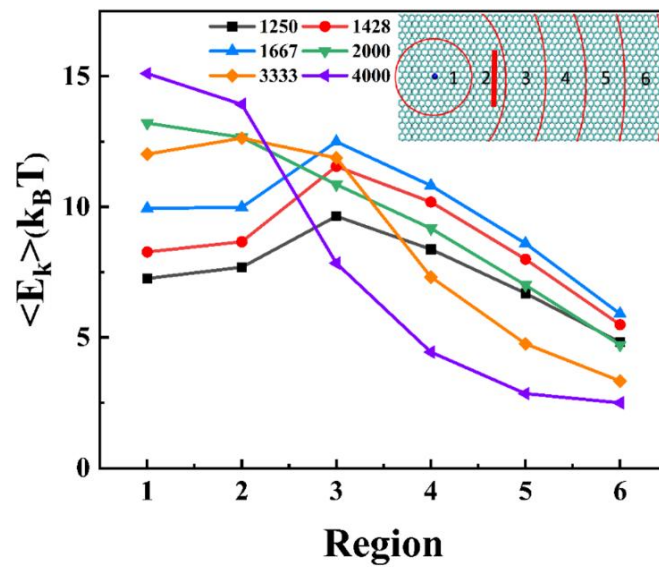


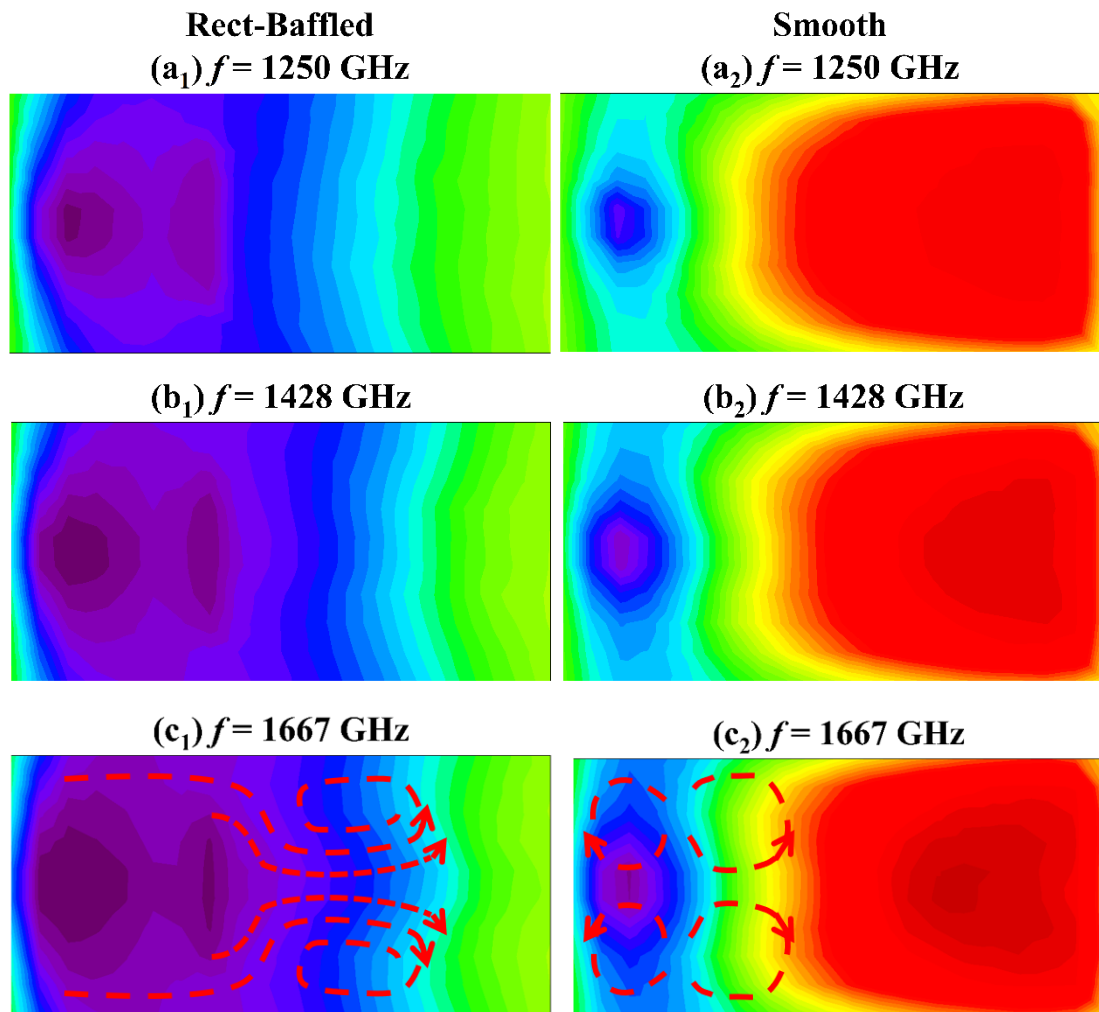
图 6 **Rect-Baffled** 通道中距离振动原子距离为 r 的区域内水分子的平均动能. 插图显示了与振动位置距离不同的六个区域 ($\Delta r = 1.43 \text{ nm}$).

Fig. 6 Average kinetic energy of water molecules in regions at a distance r from the vibrating atoms in the **Rect-Baffled** channel. The inset shows six regions with varying distances from the vibration position ($\Delta r = 1.43 \text{ nm}$).

以激励振动原子为中心、按径向等距划分区域 (如图 6 中插图所示). 激励振动原子距离石墨烯狭缝右端出口约 8.60 nm , 将该距离均分为 6 个区间, 每个区间长度约 1.43 nm . 统计得到各分区内水分子的平均动能, 结果如图 6 所示.

当激励振动频率大于 2000 GHz , 可以看出, 激励振动原子近邻区域水分子的平均动能明显高于远场区域, 从入口到出口形成显著的动能梯度. 值得注意的是, 即便在激励振动原子附近 (区域 1), 水分子动能仍对激励频率表现出高度敏感性.

进一步分析可见，不同频率下平均动能的空间分布特征存在显著差异。在 1250–1667 GHz 范围内，平均动能并非自入口处单调衰减，而是在区域 3 附近达到局部较高水平，随后向下游逐渐降低。其中，1667 GHz 时各区域平均动能整体较高，且沿程衰减相对平缓，表明该频率下振动输入的能量不仅能够有效耦合到受限水分子，而且能够较充分地向通道下游传递，这与该频率下 Baffled 通道具有最大水流量的结果一致。相比之下，在 3333 GHz 和 4000 GHz 条件下，尽管靠近振动源区域的平均动能较高，但从上游到下游的衰减更加迅速，尤其在 4000 GHz 时，平均动能主要集中在靠近振动源的前两个区域，而远离振动源区域的动能明显降低。这说明，局部较高的平均动能并不必然对应更高的整体输运效率；在高频条件下，振动输入的能量更容易局域化，形成强烈的涡旋，而难以持续、有效地向通道下游传递。



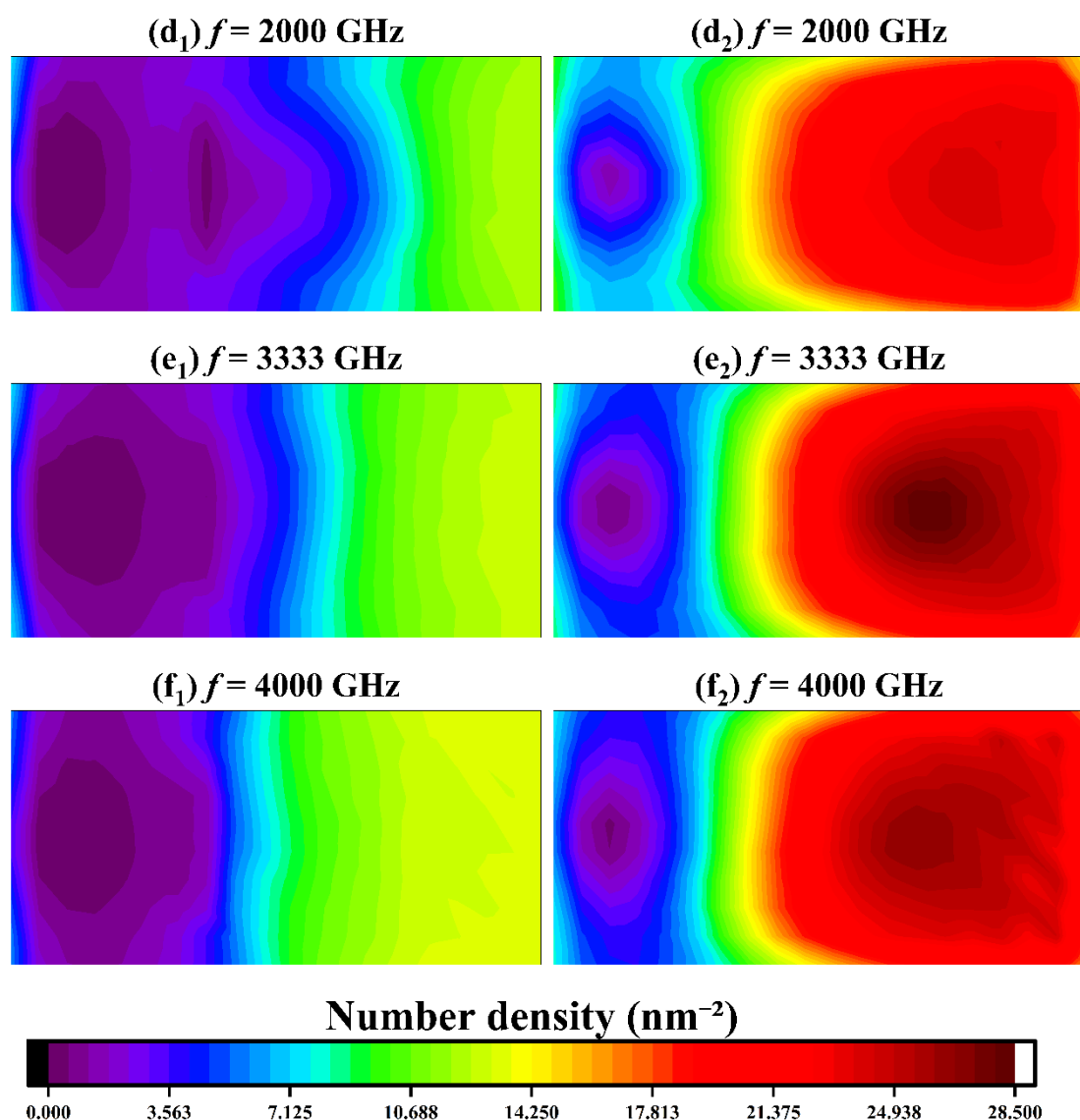


图 7 不同频率下 Rect-Baffled 通道和 Smooth 通道内的水分子数密度分布.

Fig. 7 Number density distributions of water molecules in the Rect-Baffled and Smooth channels at different frequencies.

在宏观流体体系中，涡旋的形成、发展与演化与流体密度分布存在内在关联。然而，在本模拟体系中，涡旋的产生主要依赖于振动能量激发的机械波，以及非平衡扰动所诱导的局部热不均匀性。涡旋的形成受多种因素共同影响，探究其物理机理与潜在影响因素，是一项复杂而重要的研究课题。

本文进一步分析了受限水的密度分布与结构，以期从另一视角揭示涡旋调控对输运性能的影响，结果如图 7 所示。石墨烯二维狭缝内的水分子密度反映了其位置随时间演化的空间分布特征。数密度通过将狭缝划分为细小网格单元、统计模拟过程中、各单元内水分子的平均数目，再将该平均数除以网格单元面积得到。

对统计结果进行处理后即可获得密度分布图,该图可直观反映水分子在狭缝内不同位置聚集的情况.

对无挡板 (Smooth) 体系,通道右侧出现显著的高面数密度区 (图 7 右列),水分子由原先的单层分布转变为多层堆积状态. 该高密度区从通道中部偏左位置开始向右延伸,形成明显的密度梯度,导致水分子容易在通道右侧管口处滞留聚集,进而抑制水分子的定向迁移. 这一现象与速度矢量分布结果相一致:在水分子富集区前沿,速度矢量图显示水分子存在回返流动,并形成小尺度涡旋 (如图 7 - C₂), 最终导致 Smooth 通道的水流量受到抑制.

相比之下,在相同驱动频率下,Rect-Baffled 通道内的水分子数密度分布更为均匀,并未出现 Smooth 通道中那样的高密度聚集区域. 进一步观察通道入口区域可见,Smooth 通道在振动原子邻近区域呈现出明显的数密度富集现象,这与入口处涡旋诱导的局部循环流动特征相一致. 而在 Rect-Baffled 通道中,这种局部富集现象显著减弱,表明挡板结构可通过重构入口处速度场、削弱涡旋诱导的循环流动,有效促进水分子脱离入口区域并沿通道轴向定向迁移. 相应地,通道右侧的水分子聚集现象得到明显抑制,进而有利于维持更高的水流量.

需要强调的是,挡板修饰并未使涡旋完全消失. 图 4 - C₁ 表明,Rect-Baffled 通道右侧仍存在局部富集区,并与下游涡旋在空间上相对应:流体进入该区域后轴向推进受限,速度矢量发生偏转并产生分流;在周期性边界条件下,分流在边界附近相互作用,从而在下游诱发新的涡旋型速度场结构.

针对激励振动频率为 1667 GHz,通过调控矩形扰流板与通道入口之间的轴向间距与挡板宽度,模拟发现,挡板位置对纳米泵输运效率具有显著调控作用:当挡板极靠近通道入口时,通过二维无阀纳米泵水流量显著变小;随着挡板与入口间距的增大,水流量呈快速上升趋势;当挡板距入口在 5-50 Å 范围时,水流量几乎都维持在较高水平,达到 1200 个水分子/ns 左右. 这说明挡板位置存在一个较宽的高效工作区间,而不是只有唯一的单一最优点. 同时,有趣的是在接近管口的位置,挡板的位置变化对水流量的调控变得非常敏感.

除了挡板位置与形状会对流量有影响,挡板的宽度也会对流量有影响. 结果表明,当挡板宽度超过 4 nm 后,纳米泵水流量明显低于本文所采用的 2 nm 挡板构型,说明挡板几何尺寸并非越大越有利于流体定向输运. 挡板对纳流体输运的

调控存在双重竞争机制：一方面，合理尺度的挡板能够调控纳米泵入口局部流场，抑制流场涡旋结构的形成，提升流体输运效率；另一方面，挡板宽度过大会挤占有效流通截面，加剧局部阻塞效应，反而削弱甚至抵消输运增益。由此可见，在本文研究体系中挡板尺寸存在最优取值区间，原模型选取的 2 nm 挡板宽度可获得较优的输运性能。我们的研究结果说明激励振动频率与挡板几何参数（形状、位置、长度等）之间存在复杂的耦合调控作用。

4. 结论

本研究采用全原子分子动力学模拟方法，以二维石墨烯构成的无阀纳米泵为研究体系，系统探究了矩形扰流板与圆柱形扰流柱对水分子输运行为及涡旋结构的调控机制；结合速度场、平均绝对涡量、水分子的平均动能分布、水分子数密度分布等微观特征，揭示了涡旋结构演变与流体输运效率之间的内在关联。

本研究发现，挡板修饰可显著提升纳米泵的水输运效率，打破了“障碍物阻碍流体输运”的常规认知。在 1250–4000 GHz 振动频率范围内，含挡板通道的水流量较光滑（Smooth）通道提升约 4~11 倍；在最优条件下（1667 GHz），输运效率提升近一个数量级，展现出优异的结构调控效能。

这其中，涡旋结构是调控水分子定向输运的核心因素，其空间分布、强度及演化特征直接决定输运效率。在 1250–4000 GHz 频率区间内，Smooth 通道入口区域易形成涡旋型速度场，尤其在 1667 GHz 时，会出现两组对称分布、旋转方向交替相反的涡旋对；涡旋诱导的局部循环流动会抵消水分子的轴向速度分量，阻碍其定向迁移，导致水流量维持在较低水平；而 Baffled 通道通过挡板的空间约束作用，重构入口侧速度场，削弱涡旋强度并改变其空间分布，使涡旋沿通道轴向拉长，减少对轴向输运的阻碍，同时促进水分子沿挡板两侧定向绕行，提升轴向平均速度。

驱动频率对水输运效率的影响受动能梯度与涡旋结构的协同调控，挡板修饰可改变最优驱动频率。Smooth 通道的最大水流量出现在 1250 GHz，此时动能梯度占主导作用；当频率升高至体系共振频率（1667 GHz）时，涡旋阻碍作用凸显，导致流量下降；而 Baffled 通道因涡旋阻碍作用被显著削弱，输运行为主要由共振驱动的动能梯度主导，最大水流量对应于 1667 GHz 的共振频率。

水分子数密度分布与涡旋结构密切相关,挡板修饰可改善密度分布均匀性,进一步强化输运性能. Smooth 通道内易形成明显的高数密度堆积带,尤其在通道右侧出现多层水堆积,结合局部涡旋导致水分子滞留聚集,抑制定向迁移; Baffled 通道有效削弱了入口侧分子局部富集及右侧堆积现象,使数密度分布更均匀,为水分子定向迁移提供了有利条件,同时挡板后方下游区域仍存在微弱涡旋,但其对输运的阻碍作用已被大幅抑制.

在微纳输运领域,传统宏观阀泵依赖实体阀芯与开闭结构,尺度受限、难以适配纳米级受限通道,且存在结构磨损、密封失效与体积微型化困难等固有缺陷;现有纳米尺度输运多采用电场驱动、浓度梯度驱动等方式. 相比之下,电场驱动易受溶液离子环境干扰、存在电解极化与能耗偏高问题;浓度梯度驱动依赖物质浓度差弛豫,输运持续性与可控性较弱,且响应滞后;常规静态构型纳米流道仅依靠固定结构扰流,缺乏对流体输运行行为的动态主动调控能力,不能实现主动输运.

本文所研究的机械振动激励型二维石墨烯无阀纳米泵,无需实体阀芯与复杂开闭机构,通过石墨烯的周期性振动主动激励,依托通道内挡板、圆柱等局部结构诱导流场涡流重构,打破纳米层流固有输运模式,突破了宏观阀泵的尺度局限与静态纳米通道的调控瓶颈;既规避了电场、浓度梯度等驱动方式受介质环境约束、稳定性不足的短板,又可通过调控驱动频率实现输运流量的动态优化,具备结构简单、无磨损、频率可调、环境适应性强、输运效率可反常提升的独特优势.

综上,本研究通过挡板修饰实现了纳米通道内涡旋结构的有效重构,明确了“挡板-涡旋-输运效率”的调控路径,丰富了纳米尺度涡旋调控与流体输运的基础理论,为基于石墨烯材料的无阀纳米泵及其他二维纳流体器件的结构设计、性能优化提供了重要的理论依据与技术参考. 未来可进一步探究挡板尺寸、位置及振动参数对涡旋结构与输运性能的调控规律,为纳流控器件的实际应用奠定更坚实的基础.

参考文献

- [1] Yin Y, Liu B, Han Y, Liu Q, Kou J, Zhang Y, Wen J, Liu S, Wang Q, Shan Y, Liu Y, Feng J 2025 *Adv. Mater. Technol.* **10** 2500083
- [2] Emmerich T, Ronceray N, Agrawal K V, Garaj S, Kumar M, Noy A, Radenovic A 2024 *Nat. Rev. Methods*

- [3] Noy A, Park H G, Fornasiero F, Holt J K, Grigoropoulos C P, Bakajin O 2007 *Nano Today* **2** 22
- [4] Duan C, Wang W, Xie Q 2013 *Biomicrofluidics* **7** 026501
- [5] Bocquet L, Tabeling P 2014 *Lab on a Chip* **14** 3143
- [6] Maleki T, Mohammadi S, Ziaie B 2009 *Nanotechnology* **20** 105302
- [7] Radha B, Esfandiar A, Wang F C, Rooney A P, Gopinadhan K, Keerthi A, Mishchenko A, Janardanan A, Blake P, Fumagalli L, Lozada-Hidalgo M, Garaj S, Haigh S J, Grigorieva I V, Wu H A, Geim A K 2016 *Nature* **538** 222
- [8] You Y, Ismail A, Nam G-H, Goutham S, Keerthi A, Radha B 2022 *Annu. Rev. Mater. Res.* **52** 189
- [9] Chen L, Shi G, Shen J, Peng B, Zhang B, Wang Y, Bian F, Wang J, Li D, Qian Z 2017 *Nature* **550** 380
- [10] Ritmejeris J, Chen X, Dekker C 2025 *Nat. Rev. Bioeng.* **3** 303
- [11] Masduzzaman M, Bakli C, Barisik M, Kim B 2025 *Small* **21** e08637
- [12] Schoch R B, Han J, Renaud P 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 839
- [13] Kavokine N, Netz R R, Bocquet L J A R o F M 2021 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **53** 377
- [14] Sparreboom W, van den Berg A, Eijkel J C 2010 *New J. Phys.* **12** 015004
- [15] Li Y, Zhou Y, Wang Y, Jiang W, Yang F, Jin P, Huang J 2026 *Adv. Mater.* **38** e19721
- [16] Wei M, Wu Z, Zhou X, Lu H 2025 *Phys. Rev. E* **112** 045102
- [17] Zhong H, Li X, Wu Z, Zhang S, Xu Z, Chen H, Lin S 2015 *Appl. Phys. Lett.* **106** 243903
- [18] Liu Z, Zheng K, Hu L, Liu J, Qiu C, Zhou H, Huang H, Yang H, Li M, Gu C 2010 *Adv. Mater.* **22** 999
- [19] Zhao Y, Song L, Deng K, Liu Z, Zhang Z, Yang Y, Wang C, Yang H, Jin A, Luo Q, Gu C, Xie S, Sun L 2008 *Adv. Mater.* **20** 1772
- [20] Srivastava A, Srivastava O N, Talapatra S, Vajtai R, Ajayan P M 2004 *Nat. Mater.* **3** 610
- [21] Lim S M, Yoo H, Oh M A, Han S H, Lee H R, Chung T D, Joo Y C, Sun J Y 2019 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **116** 13807
- [22] Xiao K, Xie G, Zhang Z, Kong X Y, Liu Q, Li P, Wen L, Jiang L 2016 *Adv. Mater.* **28** 3345
- [23] Xiao K, Chen L, Zhang Z, Xie G, Li P, Kong X Y, Wen L, Jiang L 2017 *Angew. Chem. Int. Ed.* **56** 8168
- [24] Wang Z, Li S, Gao S, Su J 2025 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27** 730
- [25] Kolomeisky A B 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 048105
- [26] Bauer W R, Nadler W 2006 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **103** 11446
- [27] Král P, Shapiro M 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 131
- [28] Holt J K, Park H G, Wang Y M, Stadermann M, Artyukhin A B, Grigoropoulos C P, Noy A, Bakajin O 2006 *Science* **312** 1034
- [29] Falk K, Sedlmeier F, Joly L, Netz R R, Bocquet L 2010 *Nano Lett.* **10** 4067
- [30] Falk K, Sedlmeier F, Joly L, Netz R R, Bocquet L 2012 *Langmuir* **28** 14261
- [31] Papadopoulou E, Megaridis C M, Walther J H, Koumoutsakos P 2021 *J. Phys. Chem. B* **126** 660
- [32] Arai N, Koishi T, Ebisuzaki T 2021 *ACS Nano* **15** 2481
- [33] Wang L, Wu H, Wang F 2017 *Sci. Rep.* **7** 41717
- [34] Oyarzua E, Walther J H, Megaridis C M, Koumoutsakos P, Zambrano H A 2017 *ACS Nano* **11** 9997
- [35] Farimani A B, Heiranian M, Aluru N R 2016 *Sci. Rep.* **6** 26211
- [36] Zhou X, Wu F, Liu Y, Kou J, Lu H 2015 *Phys. Rev. E* **92** 053017
- [37] Feng J-w, Ding H-m, Ren C-l, Ma Y-q 2014 *Nanoscale* **6** 13606
- [38] Zhou X, Wu F, Kou J, Nie X, Liu Y, Lu H 2013 *J. Phys. Chem. B* **117** 11681
- [39] Li X-P, Kong G-P, Zhang X, He G-W 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 143117
- [40] Rinne K F, Gekle S, Bonthuis D J, Netz R R 2012 *Nano Lett.* **12** 1780

- [41] Wang Y, Zhao Y J, Huang J P 2011 *J. Phys. Chem. B* **115** 13275
- [42] Qiu H, Shen R, Guo W 2011 *Nano Res.* **4** 284
- [43] Duan W H, Wang Q 2010 *ACS Nano* **4** 2338
- [44] Geim A K, Grigorieva I V 2013 *Nature* **499** 419
- [45] Keerthi A, Geim A K, Janardanan A, Rooney A P, Esfandiar A, Hu S, Dar S A, Grigorieva I V, Haigh S J, Wang F C, Radha B 2018 *Nature* **558** 420
- [46] Bhardwaj A, Surmani Martins M V, You Y, Sajja R, Rimmer M, Goutham S, Qi R, Abbas Dar S, Radha B, Keerthi A 2024 *Nat. Protoc.* **19** 240
- [47] Esfandiar A, Radha B, Wang F, Yang Q, Hu S, Garaj S, Nair R R, Geim A, Gopinadhan K 2017 *Science* **358** 511
- [48] Mei F, Zhou X, Kou J, Wu F, Wang C, Lu H 2015 *J. Chem. Phys.* **142** 134704
- [49] Wu M, Wei W, Liu X, Liu K, Li S 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 19163
- [50] Zhu X, Yuan Q, Zhao Y-P 2014 *Nanoscale* **6** 5432
- [51] Wei L, Bai Q, Li X, Liu Z, Li C, Cui Y, Shen L, Zhu C, Fang W 2023 *J. Phys. Chem. Lett.* **14** 8890
- [52] Ruiz-Barragan S, Sebastiani F, Schienbein P, Abraham J, Schwaab G, Nair R R, Havenith M, Marx D 2022 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24** 24734
- [53] Li W J, Zhou X Y, Lu H J 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 094702 (in Chinese)
- [54] Xu Z C, Zheng D Q, Ai B Q, Zhong W R 2016 *Sci. Rep.* **6** 23414
- [55] Lohrasebi A, Feshanjerdi M 2012 *J. Mol. Model.* **18** 4191
- [56] Zhong W R, Hu B 2010 *Phys. Rev. B* **81** 205401
- [57] Liu C, Li Z 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 174501
- [58] Berendsen H J C, Vanderspoel D, Vandrunen R 1995 *Comput. Phys. Commun.* **91** 43
-

Vortex regulation and anomalous enhancement mechanism of transport efficiency in two-dimensional valveless nanopumps[§]

Wu Zengyang Chen Yuan Zhou Xiaoyan^{} Lu Hangjun^{††}**

(College of Physics and Electronic Information Engineering, Zhejiang Normal University, Jinhua 321004, China)

Abstract

Vortices are essential dynamic characteristics of fluid flow and play a dominant role in energy transfer, material mixing and flow regulation. When fluids are confined to the nanoscale, the generation and regulation of vortices exhibit distinctly different behaviors compared with macroscopic fluid flows.

In this work, all-atom molecular dynamics simulations are adopted to systematically investigate the water transport in two-dimensional valveless nanopumps driven by mechanical vibration, with a focus on the regulation mechanism of vortices on water transport efficiency. The simulation results show that introducing appropriately sized flow-disturbing structures into the nanochannels reduces the effective transport cross-sectional area, yet leads to an unexpected improvement in the water transport efficiency of valveless nanopumps. The water flow is approximately 4–10 times higher than that in smooth nanochannels without flow-disturbing structures. Combined with microscopic characteristics including velocity field, mean absolute vorticity, average kinetic energy distribution and number density distribution of water molecules, the inherent correlation between the evolution of vortex structures and fluid transport efficiency is elucidated.

This study not only enriches the fundamental theories of nanoscale vortex regulation and fluid transport, but also provides important theoretical basis and technical reference for the design, fabrication and performance optimization of high-performance two-dimensional nanofluidic devices.

Keywords: molecular dynamics; vortex; two-dimensional nanochannel; nanoconfined water; graphene

[§] Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11875237).

^{**} Corresponding author. E-mail: zxylyu@zjnu.cn

^{††} Corresponding author. E-mail: zjlhjun@zjnu.cn

图文摘要:

