

# 锥形 Janus 颗粒强化纳米流体导热特性的模拟\*

李康睿 王军† 夏国栋

(北京工业大学机械与能源工程学院, 传热与能源利用北京重点实验室, 北京 100124)

(2025 年 6 月 13 日收到; 2025 年 7 月 11 日收到修改稿)

近年来, 纳米技术的发展使得非球形纳米颗粒的工业化应用成为可能, 形貌各向异性的非球形颗粒有利于改善纳米流体的传热性能. 有研究表明, 将 Janus 纳米颗粒引入到基液中可进一步增强纳米流体的导热特性. 本文设计了一种具备亲水侧面和疏水底面的锥形 Janus 纳米颗粒, 并将其引入到基液中形成锥形 Janus 纳米流体, 采用分子动力学模拟计算了锥形和球形两种 Janus 纳米流体的热导率, 对其导热机理进行计算分析. 结果表明, 锥形颗粒表面的类固体层效应更明显, 其在基液中的扩散能力更强, 因此锥形纳米流体具备比球形纳米流体更强的导热性能. 对于 Janus 纳米流体, Janus 颗粒独特的不对称结构使得其在基液中的布朗运动更为强烈, 有效增强了纳米流体内部的传热效率. 因此, 非球形颗粒与 Janus 颗粒的结合可进一步提高纳米流体的导热性能, 为开发新型传热工质提供了新的思路.

**关键词:** 纳米流体, 非球形颗粒, Janus 颗粒, 热导率, 分子动力学模拟**PACS:** 47.11.Mn, 65.80.-g, 51.20.+d**DOI:** 10.7498/aps.74.20250759**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250759

## 1 引言

近年来, AI 科技的飞速发展对计算机算力提出了极高的需求, 这种需求几乎呈指数级增长. 更强大的算力推动着更复杂的数据模型, 而模型的复杂度又反过来推动着计算机算力的进一步升级<sup>[1]</sup>. 然而, 传统的导热介质及冷却方式已经难以满足当前高负荷计算机设备的散热需求, 在一定程度上限制了 AI 技术的进一步发展. 纳米流体作为一种新型换热介质, 在传统流体 (基液) 中加入纳米级别的金属或非金属颗粒, 为强化换热提供了新的有效途径<sup>[2-4]</sup>. 将金属铜颗粒以 2.5%—7.5% 的体积分数添加到基液水中所形成的纳米流体, 热导率可达到基液的 1.12—1.45 倍<sup>[5]</sup>. 与基液相比, 纳米流体能够显著改善流体工质的换热性能, 一经提出便受到了广泛关注, 除了散热领域, 纳米流体在电子设

备冷却、先进热管理技术、太阳能集热、新能源汽车等诸多领域都表现出广阔的应用前景<sup>[6-9]</sup>.

关于纳米流体强化传热机理的研究对于研制新型传热工质, 推动纳米流体在诸多领域中的应用具有重要的理论意义. 目前已有众多研究人员针对纳米流体强化导热提出多种微观层次的解释, 主要包括液体吸附层、微对流、纳米颗粒的布朗运动、热泳现象等<sup>[10-16]</sup>. 一般而言, 这些机制并不会单独存在, 而是与其他的机制相互耦合, 并共同发挥作用. 有研究指出, 在低颗粒体积分数的下, 布朗运动是纳米流体增强导热的主要因素, 而在高体积分数的下, 纳米颗粒的团聚效应则占据了主导地位<sup>[17,18]</sup>. 因此, 尽管对纳米流体的传热机理已经有了多种分析理论, 但仍然存在一定的争议<sup>[19]</sup>.

纳米颗粒在纳米流体中所占的体积比例被称为颗粒的体积分数, 在较低的体积分数的下, 纳米流体的热导率会随着体积分数的增长而显著增大, 但

\* 国家自然科学基金 (批准号: 12472268) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [jwang@bjut.edu.cn](mailto:jwang@bjut.edu.cn)

是当体积分数超过一定阈值后, 颗粒之间会形成严重的团聚现象, 阻碍颗粒的运动和热量的传递, 此时纳米流体的热导率趋于饱和, 不会再进一步提高<sup>[20,21]</sup>. 纳米流体系统中颗粒之间的相互作用会生成粒径较大的团聚体, 一方面, 纳米颗粒的团聚作用促使沉淀物的形成, 对纳米流体的稳定性和均匀性产生负面影响. 另一方面, 颗粒聚集体的结构和尺寸同样也会影响纳米流体的导热性能<sup>[22-24]</sup>. 除此之外, 固体颗粒的属性、形状和系统温度等因素也会对纳米流体的热物性产生影响<sup>[25-29]</sup>.

在现有文献中, 关于纳米流体的研究大多是基于球形纳米颗粒的. 纳米技术的发展使得各种不同形状的纳米颗粒被开发并应用于纳米流体中. 越来越多的实验、模拟和数值计算开始关注颗粒形状对纳米流体导热特性的影响, 相较于球形纳米颗粒, 在基液中引入形貌各向异性的非球形颗粒同样有利于改善纳米流体的导热特性<sup>[30-35]</sup>. 研究表明纳米颗粒的高径比会对纳米流体的热物性产生一定的影响, 在相同的颗粒体积分数下, 高径比更大的棒状颗粒对基液热导率的增强比要高于球形颗粒<sup>[28]</sup>.

相较于普通的各向同性的颗粒, 各向异性的 Janus 颗粒因其具备多种独特的性质而备受研究人员的关注. Janus 颗粒表面具备两种或两种以上不同的化学组分或物理性质, 将 Janus 颗粒引入到基液中可以进一步提高纳米流体的导热性能. Janus 颗粒独特的非对称结构使得其在基液中受到的来自各方向的力更不均衡, 促进了其在基液中的扩散, 增强了颗粒与基液之间的热量交换, 使得纳米流体的导热性能得以进一步增强<sup>[36,37]</sup>. 除了球形 Janus 纳米颗粒外, 纳米技术的发展使得更多的非球形 Janus 纳米颗粒也能够被制备出来<sup>[38]</sup>. 研究人员制备了一种锥形 Janus 纳米颗粒, 其侧面和底面具有不同的性质, 该颗粒的底面由疏水聚合物材料构成, 对疏水聚合物进行亲水化改造可以得到亲水的侧面. 此外, 这种锥形 Janus 颗粒的底面和侧面还可以根据需求进一步改性<sup>[39]</sup>.

本文采用分子动力学模拟方法, 通过改变锥形颗粒底部和侧面的固液结合强度, 构建了一个锥形 Janus 纳米颗粒, 采用同样的办法构建了一个一半亲水一半疏水的球形 Janus 颗粒, 并将其投入到基液中建立出纳米流体的模拟模型, 基于 Green-Kubo 公式计算了不同类型 Janus 纳米流体的热导率, 分析颗粒形状、属性、体积分数等参数对纳米流体热物性的影响规律. 之后对纳米流体的几种传

热机制进行深入探讨, 阐明了锥形 Janus 纳米颗粒增强纳米流体导热性能的微观机制.

## 2 分子动力学模拟

### 2.1 分子动力学模型

本文基于 LAMMPS 软件, 建立了如图 1 所示的纳米流体模拟系统, 该系统由位于中心的半径为 1.0 nm 的球形纳米颗粒 (黄色) 和周围的氩基液 (红色) 组成. 本文选择纯氩作为纳米流体的基液, 是因为分子动力学模拟能够比较准确地描述氩原子之间的相互作用力, 使得模拟更为准确, 同时氩原子结构较为简单, 所需的计算资源较少, 能够节省大量时间成本. 纯氩基液的密度设置为 1418 kg/m<sup>3</sup>. 纳米流体系统中的固体颗粒选用常见的铜材质, 铜原子呈面心立方结构排列, 晶格常数为 0.3615 nm. 值得注意的是, 该纳米流体模拟系统中仅存在单个固体铜颗粒. 通过改变基液氩原子的数量来实现纳米流体体积分数的变化, 当体积分数为 1% 时, 模拟盒子的尺寸  $L_{\text{box}}$  在 3 个方向均设置为 7.212 nm. 当体积分数为 2% 时, 模拟盒子的尺寸  $L_{\text{box}}$  则为 5.94 nm.

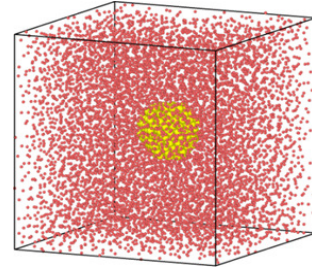


图 1 纳米流体模拟系统图  
Fig. 1. Simulation system of nanofluids.

模拟中固-液、液-液之间的相互作用力采用最常见的 Lennard-Jones (L-J) 势能函数进行描述<sup>[21]</sup>:

$$U_{ij}(r_{ij}) = 4\varepsilon[(\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6], \quad (1)$$

式中,  $U_{ij}$  为势函数, 参数  $\varepsilon$  和  $\sigma$  分别代表相互作用势阱深度和势能为零时的距离,  $r_{ij}$  为原子  $i$  和  $j$  之间的距离. 铜-氩原子之间的势能参数由下式确定<sup>[21]</sup>:

$$\sigma_{\text{sl}} = (\sigma_{\text{ss}} + \sigma_{\text{ll}})/2, \quad (2)$$

$$\varepsilon_{\text{sl}} = \sqrt{\varepsilon_{\text{ss}}\varepsilon_{\text{ll}}}. \quad (3)$$

在分子动力学模拟中, 可以通过调节纳米颗粒与基液之间的固液结合强度来构建 Janus 颗粒. 本

文中的 Janus 颗粒由疏水侧表面和亲水侧表面构成, 其与基液氩的结合强度分别由  $\varepsilon_{sl,1} = c_1\varepsilon_{sl}$  和  $\varepsilon_{sl,2} = c_2\varepsilon_{sl}$  来定义. 在满足 Janus 颗粒表面的平均固液结合强度相同的前提下, 通过改变参数  $c_1$  和  $c_2$  的大小, 即可构造出不同类型的 Janus 纳米颗粒. 表 1 给出了几种不同类型的 Janus 纳米颗粒疏水侧和亲水侧的结合参数, 同时引入一个差异性参数  $\delta$  来表达 Janus 颗粒表面性质的不对称性, 将其定义为  $\delta = (c_2 - c_1)/(c_2 + c_1)$ . 随着参数  $\delta$  的增大, Janus 颗粒疏水侧与亲水侧相互作用强度的差异逐渐增大, 不对称性也随之增强. 对于类型 I,  $c_1 = c_2$ , 差异性参数  $\delta = 0$ , 这意味着该纳米颗粒只是一个各向同性的普通的纳米颗粒<sup>[36]</sup>.

表 1 Janus 纳米流体参数<sup>[36]</sup>  
Table 1. Parameters for Janus nanofluids<sup>[36]</sup>.

类型	I	II	III	IV	V
$c_1$	1	0.8	0.6	0.4	0.2
$c_2$	1	1.2	1.4	1.6	1.8
$\delta$	0	0.2	0.4	0.6	0.8

在其他外部条件不变的情况下, 将球形颗粒替换为锥形颗粒, 该锥形颗粒的底面半径和高均为 1.59 nm, 体积与球形颗粒的体积保持一致. 按照上述设计思路, 改变铜原子与基液之间的固液结合强度构建出如图 2 所示的两种不同形状的 Janus 纳米流体: 左右两侧具备不同性质的球形 Janus 纳米流体以及底部疏水 ( $c_1 < 1$ ), 侧面亲水 ( $c_2 > 1$ ) 的锥形 Janus 纳米流体.

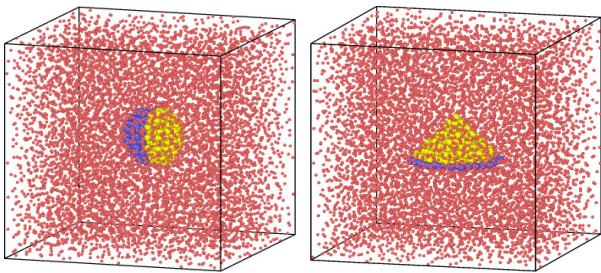


图 2 球形 Janus 纳米流体和锥形 Janus 纳米流体模型的初始结构

Fig. 2. Initial structure model of spherical Janus nanofluids and conical Janus nanofluids.

## 2.2 计算方法

本文通过统计原子之间的微观热流来得到宏观系统的热导率, 即平衡态分子动力学模拟, 可由如下 Green-Kubo 公式计算<sup>[40]</sup>:

$$\kappa(t) = \frac{1}{3Vk_B T^2} \int_0^t \langle \mathbf{J}_q(0) \mathbf{J}_q(t) \rangle dt, \quad (4)$$

式中,  $\kappa$  是热导率,  $k_B$  是玻尔兹曼常数,  $V$  表示体积,  $T$  是系统的温度,  $\mathbf{J}_q$  是微观热流矢量,  $\langle \cdot \rangle$  表示系综平均.

在纳米流体系统中, 粒子的径向分布函数 (radial distribution function, RDF) 可以直观表达出颗粒表面类固液体层的形成及其变化, 描述了被计算原子的密度与距离两个变量之间的函数关系<sup>[41]</sup>:

$$g(r) = \frac{n(r)}{\rho_0 V} \approx \frac{n(r)}{4\pi r^2 \rho_0 \delta r}, \quad (5)$$

式中,  $r$  为到纳米粒子中心的径向距离,  $\delta r$  和  $n(r)$  为球壳厚度和粒子数.

纳米颗粒在基液中的随机布朗运动可以通过扩散系数进行描述, 均方位移 (mean square displacements, MSD) 的计算公式为<sup>[42]</sup>

$$\text{MSD}(t) = \langle \Delta \mathbf{r}_i(t)^2 \rangle = \langle (\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0))^2 \rangle, \quad (6)$$

式中,  $\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)$  是原子  $i$  在某个时间间隔  $t$  内的平移距离,  $\langle \cdot \rangle$  表示系综平均. 扩散系数可由 MSD 的极限斜率获得:

$$D = \frac{1}{6} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \langle \Delta \mathbf{r}_i(t)^2 \rangle. \quad (7)$$

该模型在  $x$ ,  $y$  和  $z$  三个方向上均采用周期性边界条件, 时间步长取为 4 fs, 截断半径  $R_c$  为  $2.8\sigma$ . 系统在恒定温度 (86 K) 下采用 NVT 系综运行 0.4 ns, 待系统稳定后, 采用 NVE 系综运行 4 ns 进行数据采集, 并据此计算纳米流体的热导率. 对同一个数据点进行多次独立运行, 每一次运行之前改变系统中原子的初始速度, 采用 3—4 次独立计算的算术平均值作为计算结果, 提高计算结果的准确性. 在探讨纳米流体的导热特性之前, 需要首先对纯氩体系的热导率和扩散系数进行验证, 计算得到了含有 2048 个氩原子的纯氩系统的热导率 (0.1312 W/(m·K)) 和扩散系数 ( $1.75 \times 10^{-9}$  m<sup>2</sup>/s), 与实验值较为吻合<sup>[36,43]</sup>. 计算结果表明本文建立的分子动力学模型和采用的计算方法可以适用, 为下一步计算 Janus 纳米流体的热导率提供重要基础.

## 3 热导率的计算结果与讨论

### 3.1 基于锥形 Janus 纳米颗粒的纳米流体热导率

本节运用平衡态分子动力学方法计算了锥形

Janus 纳米流体的热导率, 并将其与球形 Janus 纳米流体进行对比. 结果如图 3 所示, 为了方便对比, 基液纯氩的热导率用虚线标记出来. 首先, 体积分数为 2% 的纳米流体的热导率要高于体积分数为 1% 的纳米流体, 体积分数的增大会使得纳米流体的热导率增大, 这与现有文献的结果一致. 普通纳米流体 ( $\delta = 0$ ) 的情况下, 两种形状的纳米颗粒均在一定程度上提高了基液的热导率, 且锥形纳米流体的热导率要略高于球形纳米流体, 增长幅度为 4.65%, 表明非球形颗粒的添加可以增强纳米流体的热物性. 对于 Janus 纳米流体来说 ( $\delta > 0$ ), 锥形 Janus 纳米流体与球形 Janus 纳米流体呈现了相同的趋势, 即随着  $\delta$  的增大, 其热导率也随之逐渐增大, 且锥形 Janus 纳米流体的热导率要始终大于球形 Janus 纳米流体. 相较于基液纯氩, 体积分数为 1% 的球形 Janus 纳米流体最大可以提高 33.7%, 而同等条件下的锥形 Janus 纳米流体最大可以提高 43.4%. 因此, 非球形颗粒与 Janus 颗粒的结合可以进一步提高纳米流体的导热性能.

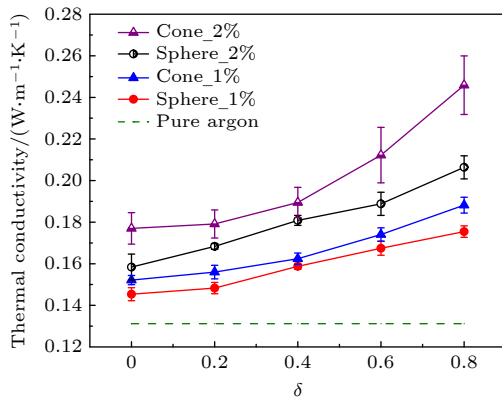


图 3 锥形 Janus 纳米流体和球形 Janus 纳米流体在体积分数为 1% 和 2% 下的热导率  
Fig. 3. Thermal conductivity of base liquid, conical and spherical Janus nanofluids at 1% and 2% volume fractions.

### 3.2 类固体层

在本文的纳米流体系统中, 铜-氩原子之间的相互作用力要强于氩-氩原子之间的相互作用, 基液氩原子会吸附在颗粒表面形成整齐排列的吸附层. 该液体吸附层处在液体和固体两种物理状态之间, 也被称为类固体层. 原本在基液中无序分布的液体分子呈现出类似于固体的有序结构, 这种有序结构的热导率高于无序状态下基液的热导率, 从而实现了颗粒和基液之间高效的热量传输.

图 4 展示了不同类型的锥形 Janus 纳米流体

和球形 Janus 纳米流体氩-氩原子的 RDF 分布图, 图中 RDF 曲线的波峰位置都出现在了 0.39 nm 附近, 且曲线的数值随着距离增大逐渐收敛为 1. 可以看出, 氩-氩原子的 RDF 图无明显变化, 这表明基液的物理状态并没有因纳米颗粒的变化而发生变化.

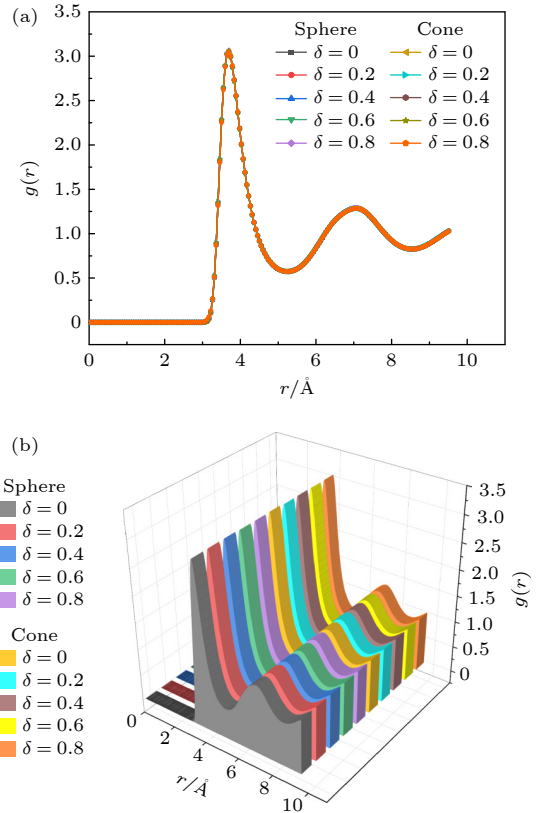


图 4 Janus 纳米流体中氩-氩原子的径向分布函数 (a) 二维平面图; (b) 三维立体图  
Fig. 4. RDF of argon-argon atoms for different types of Janus nanofluids: (a) Planar graph; (b) three-dimensional graph.

图 5 为球形和锥形 Janus 纳米流体中铜-氩原子的 RDF 图, 铜氩原子之间的强相互作用力形成了基液的吸附层, 从而在铜-氩 RDF 曲线图中呈现出明显的波峰. 所有类型 Janus 纳米流体的铜-氩原子 RDF 图中, 第 1 个波峰均出现在 0.31 nm 附近, 此处氩原子的数密度要显著高于基液中分散的氩原子数密度. 以  $\delta = 0$  时的球形纳米流体为例 (图 6), 距离颗粒表面 0.5 nm 处的氩原子数密度 (0.0325) 要比基液中氩原子数密度 (0.0216) 高出 50.2%, 再次证明颗粒表面基液吸附层的形成. 从铜-氩 RDF 曲线图中可以得出, 锥形颗粒的波峰数值均要高于球形颗粒的波峰数值, 对于普通纳米流体 ( $\delta = 0$ ), 锥形纳米流体 RDF 曲线图的峰值比球

形纳米流体高出 36%，表明锥形颗粒表面吸附的氩原子数量更多，吸附层的密度更大，颗粒与基液之间的传热效率更高。但是，无论是锥形 Janus 纳米流体还是球形 Janus 纳米流体，铜-氩 RDF 曲线波峰数值都会随着  $\delta$  增大反而略有下降，这是因为 Janus 纳米颗粒既有高耦合强度表面，也有弱耦合强度表面，相互作用较低的那一侧会削弱基液在颗粒表面的吸附，从而影响液体吸附层的形成。这种现象表明，Janus 颗粒具有独特的不对称性会破坏氩原子的吸附。通过上述的计算分析可知，颗粒表面的类固体层无法解释 Janus 纳米流体的高导热特性，反而会对其产生微弱的负面影响。

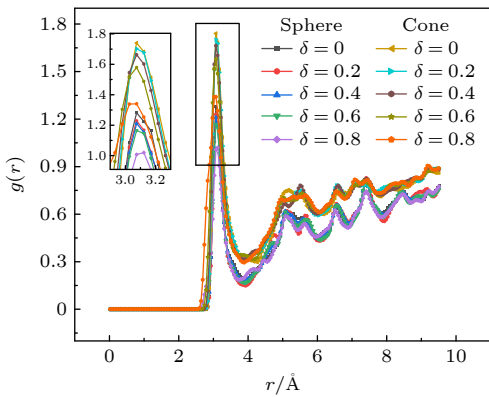


图 5 Janus 纳米流体中铜-氩原子的径向分布函数  
Fig. 5. Radial distribution function of copper-argon atoms for different types of Janus nanofluids.

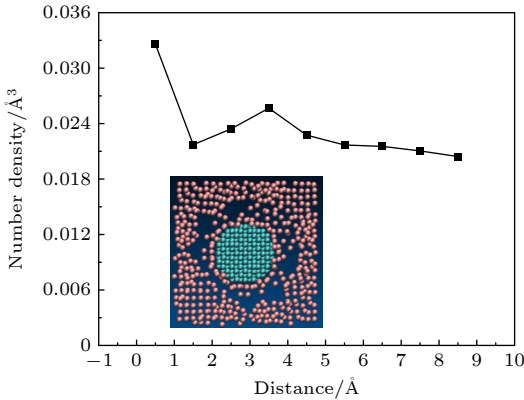


图 6 球形纳米流体中氩原子数密度随距离变化图  
Fig. 6. Distribution of the number density of argon atoms with distance in spherical nanofluids.

### 3.3 基液的微对流作用

纳米颗粒在基液中进行着不间断的布朗运动，颗粒周围的基液会因此产生微小的对流现象，即微对流作用。基液的微对流效应可以增强纳米流体系统内部的能量传递，其强弱可通过基液的扩散系数

来表征。不同类型纳米流体的基液 MSD 计算结果如图 7 所示。纳米颗粒的形状对基液 MSD 的影响并不显著，因此，锥形纳米流体导热性能的增强与基液的微对流并无明显关联。Janus 颗粒差异性参数  $\delta$  的增大也并未引起基液 MSD 的明显变化，说明 Janus 纳米流体中微对流的作用很微小，可以被忽略。通过计算 MSD 的极限斜率，得到图 8 所示的基液和纯氩的扩散系数。与图 7 的结果相对应，不同颗粒形状和不同参数  $\delta$  下基液的扩散系数变化并不明显。同时，由于纳米流体中靠近颗粒的液体分子被吸附在颗粒表面，形成了吸附层，限制了基液的流动，使得纳米流体中氩基液的扩散系数要低于纯氩系统中氩的扩散系数。因此，Janus 纳米流体的高导热特性与基液微对流并无明显关联。

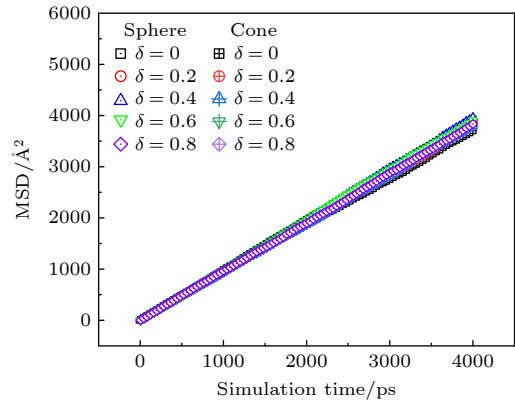


图 7 Janus 纳米流体中基液原子的均方位移  
Fig. 7. MSD of the base fluid for different types of Janus nanofluids.

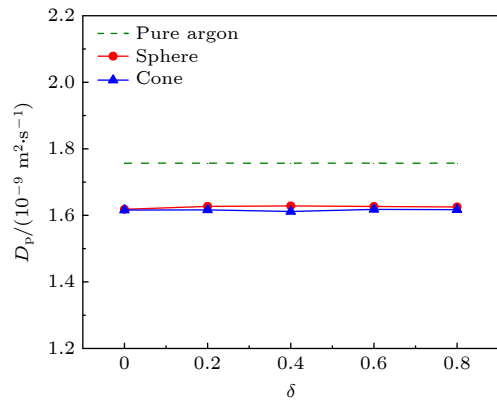


图 8 纯氩和不同类型 Janus 纳米流体中基液的扩散系数  
Fig. 8. Diffusion coefficient of base liquid under different conditions of Janus nanofluids and pure argon.

### 3.4 纳米颗粒的布朗运动

布朗运动是指悬浮在液体或者气体中的粒子所进行的不间断的无规则运动。纳米流体中的金属

铜颗粒不断与周围的液体分子碰撞, 颗粒受到各个方向液体分子的不平衡撞击, 其运动方向和速度不断发生变化, 导致铜颗粒在基液中的无规则布朗运动. 由于 Janus 颗粒表面具备不同的固液结合强度, 其在基液中受到的撞击相较于普通颗粒更不均衡, 因此 Janus 颗粒具有比普通颗粒更强烈的布朗运动. 另一方面, 由于非球形颗粒形状的各向异性, 其在基液中的扩散效果与球形颗粒有所不同. 因此接下来有必要对锥形和球形 Janus 纳米颗粒在基液中的布朗运动进行深入的探讨和分析.

本文设置了两组对照模拟, 一组保持原有条件不变, 另一组则人为去除掉颗粒的布朗运动, 并分别计算了这两组纳米流体的热导率, 通过这两组对照模拟来探讨颗粒的布朗运动对 Janus 纳米流体热导率的影响. 计算结果如图 9 所示, 锥形 Janus 纳米流体与球形 Janus 纳米流体的趋势一致, 在原有的条件下, 纳米流体的热导率均随着  $\delta$  的增大而升高. 但是当颗粒的布朗运动受限时, 纳米流体的

热导率几乎不会发生变化. 这些现象表明金属铜颗粒的布朗运动在 Janus 纳米流体的传热过程中起着重要的作用.

为了更准确地描述颗粒在基液中的布朗运动, 本文模拟计算得到了球形和锥形两种 Janus 纳米颗粒在基液中的 MSD (图 10), 计算其斜率得到了它们在基液中的扩散系数 (图 11). 结果表明, 由于锥形颗粒独特的几何结构, 其在基液中的扩散系数要始终高于球形颗粒, 这与两者纳米流体热导率的变化趋势一致. 当参数  $\delta = 0.0$  (普通纳米颗粒) 时, 锥形颗粒的扩散系数比球形颗粒的扩散系数增加了 6.47%, 由此可见, 非球形颗粒具备更优异的扩散特性, 有利于基液与颗粒之间的热量传递. 对于  $\delta > 0.0$  (Janus 纳米颗粒) 的情况, 无论是锥形颗粒还是球形颗粒, 两种形状纳米流体的热导率与扩散系数变化趋势一致, 由此可见, 颗粒的布朗运动是 Janus 颗粒增强纳米流体导热性能的关键原因之一. Janus 颗粒的不对称结构使得其在基液中的

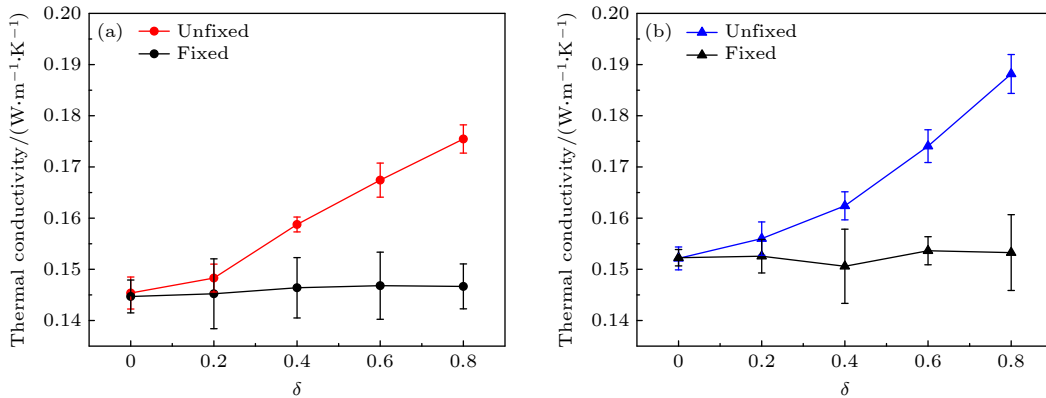


图 9 颗粒不固定和固定情况下 (a) 球形 Janus 纳米流体和 (b) 锥形 Janus 纳米流体的热导率

Fig. 9. Thermal conductivity of Janus nanofluids under unfixed and fixed conditions for (a) spherical Janus nanofluids and (b) conical Janus nanofluids.

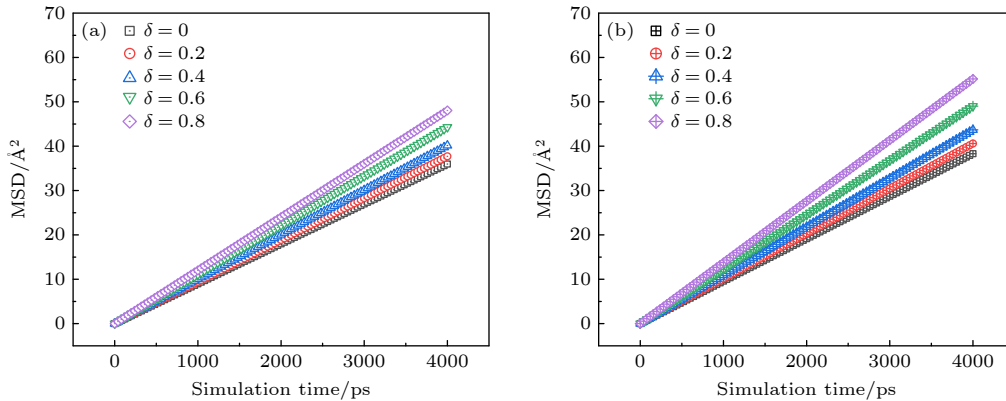


图 10 球形和锥形 Janus 纳米颗粒 MSD 随模拟时间的变化图

Fig. 10. Mean square displacement (MSD) of spherical and conical Janus nanoparticles with simulation time.

扩散系数要明显高于普通颗粒, 增大了其与周围基液分子碰撞的概率, 增强了基液与颗粒之间的热量传递, 进一步增强了纳米流体的导热性能。

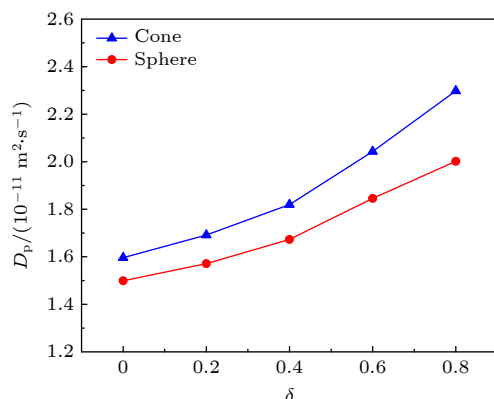


图 11 球形和锥形 Janus 纳米颗粒的扩散系数  
Fig. 11. Diffusion coefficient of spherical and conical Janus nanoparticles.

## 4 结 论

本文构建了一种底部疏水、侧面亲水的锥形 Janus 纳米颗粒, 并将其引入到氩基液中, 形成锥形 Janus 纳米流体. 分子动力学模拟计算结果表明, 锥形 Janus 纳米流体的热导率要高于球形 Janus 纳米流体, 并且会随着颗粒差异性系数  $\delta$  的增大而逐渐增大, 这表明非球形颗粒与 Janus 颗粒的结合可用于设计具备更高热导率的纳米流体. 基于对纳米流体几种微观传热机制的计算分析, 结果表明, 因其独特的几何结构, 锥形 Janus 颗粒表面的类固体层密度更高, 在基液中的扩散能力更强, 从而表现出比球形 Janus 纳米流体更优异的导热性能。

## 参 考 文 献

[1] Wang X F, Ren X X, Qiu C, Cao Y F, Taleb T, Leung V C M 2021 *IEEE Netw.* **35** 280  
 [2] Liu M S, Lin M C, Tsai C Y, Wang C C 2006 *Int. J. Heat Mass Transf.* **49** 3028  
 [3] Choi S U S, Zhang Z G, Yu W, Lockwood F E, Grulke E A 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 2252  
 [4] Han X F, Lu L W, Yan S Y, Yang X H, Tian R, Zhao X Y 2021 *J. Therm. Sci.* **30** 1581  
 [5] Xuan Y M, Li Q 2000 *Int. J. Heat Mass Transf.* **21** 58  
 [6] Liu B, Liang W H, Luo Z M, Sarvar S, Fereidooni L, Kasacian A 2024 *Mol. Liq.* **414** 126052  
 [7] Xuan Y M, Duan H L, Li Q 2014 *RSC Adv.* **4** 16206  
 [8] Rapp B, Hussam A 2023 *J. Appl. Phys.* **133** 134302  
 [9] Dai J H, Zhai Y L, Li Z H, Wang H 2024 *J. Mol. Liq.* **400**

124518  
 [10] Yu W, Choi S U S 2004 *J. Nanopart. Res.* **6** 355  
 [11] Qi K, Zhu X G, Wang J, Xia G D 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 156801 (in Chinese) [齐凯, 朱星光, 王军, 夏国栋 2024 物理学报 **73** 156801]  
 [12] Liu W W, Cui J, Wang J 2023 *Phys. Fluids.* **35** 032004  
 [13] Xue L, Koblinski P, Phillpot S R, Choi S U S, Eastman J A 2004 *Int. J. Heat Mass Transf.* **47** 4277  
 [14] Zhang Z Q, Qian S, Wang R J, Zhu Z F 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 054401 (in Chinese) [张智奇, 钱胜, 王瑞金, 朱泽飞 2019 物理学报 **68** 054401]  
 [15] Karthik V, Sahoo S, Pabi S K, Ghosh S 2013 *Int. J. Therm. Sci.* **64** 53  
 [16] Liu W W, Zhang K X, Wang J, Xia G D 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 075101 (in Chinese) [刘旺旺, 张克学, 王军, 夏国栋 2024 物理学报 **73** 075101]  
 [17] Wang R J, Qian S, Zhang Z Q 2018 *Int. J. Heat Mass Transf.* **127** 1138  
 [18] Dolatabadi N, Rahmani R, Rahnejat H, Garner C P 2019 *RSC Adv.* **9** 2516  
 [19] Roni M R H, Shahadat M R B, Morshed A M M 2021 *Micro Nano Lett.* **16** 221  
 [20] Li L, Zhang Y W, Ma H B, Yang M 2010 *J. Nanopart. Res.* **12** 811  
 [21] Sarkar S, Selvam R P 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 074302  
 [22] Du J Y, Su Q M, Li L, Wang R J, Zhu Z F 2021 *Int. Commun. Heat Mass Transf.* **127** 105501  
 [23] Pang C W, Jung J, Kang Y T 2014 *Int. J. Heat Mass Transf.* **72** 392  
 [24] Zhou L, Zhu J W, Zhao Y F, Ma H H 2022 *Int. J. Heat Mass Transf.* **183** 122124  
 [25] Wang X W, Xu X F, Choi S U S 1999 *J. Thermophys. Heat Transf.* **13** 474  
 [26] Cui W Z, Shen Z J, Yang J G, Wu S H, Bai M L 2014 *RSC Adv.* **4** 55580  
 [27] Zhu D H, Yu W, Zhu G H, Zhang Y C, Xie H Q 2020 *Chin. Sci. Bull.* **65** 222 (in Chinese) [朱大海, 于伟, 朱桂华, 张迎春, 谢华清 2020 科学通报 **65** 222]  
 [28] Wang J, Cui X, Xia G D 2023 *J. Beijing Univ. Technol.* **49** 1116 (in Chinese) [王军, 崔鑫, 夏国栋 2023 北京工业大学学报 **49** 1116]  
 [29] Li D, Hong B Y, Fang W J, Guo Y S, Lin R S 2010 *Ind. Eng. Chem. Res.* **49** 1697  
 [30] Murshed S M S, Leong K C, Yang C 2005 *Int. J. Therm. Sci.* **44** 367  
 [31] Li K R, Wang J, Xia G D 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 064701 (in Chinese) [李康睿, 王军, 夏国栋 2025 物理学报 **74** 064701]  
 [32] Yu L Y, Liu D, Botz F 2012 *Exp. Therm. Fluid Sci.* **37** 72  
 [33] Hou Q W, Cao B Y, Guo Z Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7809 (in Chinese) [侯泉文, 曹炳阳, 过增元 2009 物理学报 **58** 7809]  
 [34] Jabbari F, Rajabpour A, Saedodin S 2021 *Microfluid. Nanofluid.* **25** 102  
 [35] Zhang L Y, Yu Wei, Zhu D H, Xie H Q, Huang G W 2017 *J. Nanomater.* **2017** 5802016  
 [36] Cui X, Wang J, Xia G D 2022 *Nanoscale* **14** 99  
 [37] Kobayashi Y, Arai N 2019 *J. Electrochem. Soc.* **166** B3223  
 [38] Hong L, Jiang S, Granick S 2006 *Langmuir.* **22** 9495  
 [39] Zhao H, Liang F X, Qu X Z, Wang Q, Yang Z Z 2015 *Macromolecules.* **48** 700  
 [40] Rudyak V Y, Krasnolutskii S L 2017 *Tech. Phys.* **62** 1456  
 [41] Huang J, Sang L X, Yang Q F, Wu Y T 2024 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* **277** 113150  
 [42] Koo J, Kleinstreuer C 2004 *J. Nanopart. Res.* **6** 577  
 [43] Naghizadeh J, Rice S A 1962 *J. Chem. Phys.* **36** 2710

# Simulation study on thermal conductivity of conical Janus particles reinforced nanofluids\*

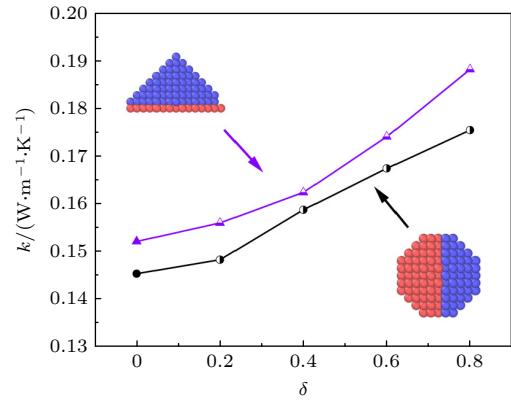
LI Kangrui    WANG Jun<sup>†</sup>    XIA Guodong

(Beijing Key Laboratory of Heat Transfer and Energy Conservation, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China)

( Received 13 June 2025; revised manuscript received 11 July 2025 )

## Abstract

It has been reported that the thermal conductivity of the nanofluids can be enhanced by adding Janus nanoparticles into the base fluid. Additionally, the non-spherical nanoparticles also affect the thermal characteristics of nanofluids. In this work, conical nanoparticles are designed as Janus nanoparticles with hydrophilic side and hydrophobic bottom, which are suspended in the base fluid to form cone-shaped Janus nanofluids. By using molecular dynamics (MD) simulations, it is found that the thermal conductivity of conical Janus nanofluids can be enhanced by 43.4% compared with that of the base fluid, whereas the spherical Janus nanofluids indicate an increase of 33.7% under the same volume fraction. According to MD simulation results of the RDF and diffusion coefficients of solid particle and base fluid, the increased thermal conductivity observed in conical nanofluids can be attributed to the higher liquid layer density and the enhanced Brownian motion of the conical particles. For Janus nanofluids, the asymmetrical structure of Janus nanoparticles leads to higher diffusion coefficient than that of normal particles, which enhances the colliding possibility of Janus nanoparticles with surrounding liquid molecules, thus resulting in enhanced heat transfer in Janus nanofluids. In this paper, both fixed and unfixed particles are considered to explore the influence of particle diffusion on nanofluids. Under the fixed condition, the Brownian motion of the nanoparticles is artificially excluded, while under the unfixed condition, the particle can diffuse in the base liquid. It is found that for both spherical and conical Janus nanofluids, the thermal conductivity of Janus nanofluids gradually increases with the augment of asymmetry parameter  $\delta$  under unfixed conditions. However, under fixed conditions, the thermal conductivity of Janus nanofluids is almost independent of the parameter  $\delta$ . Therefore, the enhanced Brownian motion of the non-spherical particles is a likely reason of the increased thermal conductivity observed in conical Janus nanofluids. The combination of non-spherical particles and Janus particles provides a promising idea for designing nanofluids with high thermal conductivity.



**Keywords:** nanofluids, non-spherical particles, Janus particles, thermal conductivity, molecular dynamics simulation

**PACS:** 47.11.Mn, 65.80.-g, 51.20.+d

**DOI:** [10.7498/aps.74.20250759](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250759)

**CSTR:** [32037.14.aps.74.20250759](https://www.cstr.org.cn/32037.14.aps.74.20250759)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12472268).

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



## 锥形Janus颗粒强化纳米流体导热特性的模拟

李康睿 王军 夏国栋

### Simulation study on thermal conductivity of conical Janus particles reinforced nanofluids

LI Kangrui WANG Jun XIA Guodong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 194701 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250759

CSTR: 32037.14.aps.74.20250759

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250759>

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

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

基于羟基化Janus碳纳米管的纳米流体导热特性

Thermal conductivity of nanofluids based on hydroxylated Janus carbon nanotubes

物理学报. 2025, 74(6): 064701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241657>

金刚石/环氧树脂复合物热导率的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of thermal conductivity of diamond/epoxy resin composites

物理学报. 2023, 72(16): 168102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222270>

颗粒尺寸对纳米流体自然对流模式影响的格子Boltzmann方法模拟

Lattice Boltzmann method simulated effect of nanoparticle size on natural convection patterns of nanofluids

物理学报. 2024, 73(23): 234702 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241332>

不同尺寸Cu<sub>64</sub>Zr<sub>36</sub>纳米液滴的快速凝固过程分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of rapid solidification of Cu<sub>64</sub>Zr<sub>36</sub> nanodrops of different sizes

物理学报. 2021, 70(24): 246401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211235>

纳米颗粒布朗扩散边界条件的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of Brownian diffusion boundary condition for nanoparticles

物理学报. 2021, 70(14): 148201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202240>

镁中位错和非晶作用机制的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of mechanism of interaction between dislocation and amorphism in magnesium

物理学报. 2022, 71(14): 143101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212318>