

## 黑磷纳米通道内压力驱动流体流动特性

张忠强 刘汉伦 范晋伟 丁建宁 程广贵

### Pressure-driven fluid flow characteristics in black phosphorus nanochannels

Zhang Zhong-Qiang Liu Han-Lun Fan Jin-Wei Ding Jian-Ning Cheng Guang-Gui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 170202 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20190531

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190531>

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

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 <https://doi.org/10.7498/aps.66.204704>

纳米通道内气体剪切流动的分子动力学模拟

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

物理学报. 2018, 67(8): 084701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172706>

纳米通道粗糙内壁对流体流动行为的影响

Effect of rough inner wall of nanochannel on fluid flow behavior

物理学报. 2019, 68(9): 094701 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181956>

尺寸效应对微通道内固液界面温度边界的影响

Size effect on boundary condition at solid-liquid interface in microchannel

物理学报. 2019, 68(2): 020201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181876>

计入固液界面作用的润滑热力学模型与分析

Thermodynamic analysis of lubrication considering solid-liquid interface interaction

物理学报. 2015, 64(16): 168101 <https://doi.org/10.7498/aps.64.168101>

微平行管道内Eyring流体的电渗滑移流动

Electro-osmotic slip flow of Eyring fluid in a slit microchannel

物理学报. 2015, 64(17): 174702 <https://doi.org/10.7498/aps.64.174702>

## 黑磷纳米通道内压力驱动流体流动特性\*

张忠强<sup>1)2)3)†</sup> 刘汉伦<sup>1)</sup> 范晋伟<sup>1)</sup> 丁建宁<sup>1)2)</sup> 程广贵<sup>1)</sup>

1) (江苏大学, 智能柔性机械电子研究院, 镇江 212013)

2) (常州大学, 江苏省光伏科学与工程协同创新中心, 常州 213164)

3) (大连理工大学, 工业装备结构分析国家重点实验室, 大连 116024)

(2019年4月11日收到; 2019年6月14日收到修改稿)

运用分子动力学方法探索了水-黑磷流-固界面各向异性、水流驱动力、黑磷通道宽度和黑磷层数等对黑磷通道内 Poiseuille 水流流动特性的影响规律. 研究表明: 随着驱动力的增加, 边界滑移速度随之增加; 各向异性也会对压力驱动作用下纳米通道内的水分子的流动特性产生影响, 具体表现为边界滑移速度会随着手性角度的增加而减小, 而水分子黏度系数却不受各向异性的影响. 发现黑磷表面天然的褶皱结构所产生的粗糙势能表面, 是导致流固界面各向异性特性的本质原因. 在加速度值保持不变的情况下, 研究纳米通道宽度和黑磷层数对水分子流动特性的影响, 发现随着纳米通道宽度的增加, 水分子滑移速度随之减小; 双层模型中水分子的速度分布与单层模型差异微小, 而随着层数的增加, 黑磷-水流固交互界面能随之增加, 各向异性规律依然保持不变. 研究结果将为水-黑磷流体器件设计与制备提供理论基础.

**关键词:** 黑磷, 各向异性, 流-固界面, 分子动力学**PACS:** 02.70.Ns, 68.08.-p, 66.20.-d, 47.27.nd**DOI:** 10.7498/aps.68.20190531

## 1 引言

近年来, 随着微/纳尺度技术的不断发展, 越来越多的低维材料开始走出实验室并应用于实践中, 低维材料<sup>[1-3]</sup>在物理、化学、电学和光学等方面所表现出来的优良性能也推动着微/纳流体器件的发展, 使得微/纳流体器件的生产与应用成为可能, 例如: 微/纳机电系统<sup>[4-6]</sup>、微/纳生物传感器<sup>[7]</sup>和微/纳芯片<sup>[8]</sup>等. 这些微纳流体器件<sup>[9,10]</sup>可以进入宏观流体器件无法到达的区域, 并具有低能耗、高灵敏度和高精度等特点, 但目前关于微/纳流体器件的机理研究还处于探索阶段, 需要进行相应的研究和补充, 而微/纳流体器件中经常涉及的问题就是流体在纳米通道内的流动特性<sup>[11,12]</sup>和流-固界

面机理的研究<sup>[13,14]</sup>.

黑磷<sup>[15-17]</sup>作为目前比较热门的低维材料, 不仅具有特殊的光学、电学特性, 还具有高载流子迁移率及天然带隙等特点<sup>[18]</sup>. 除此之外, 由于黑磷表面特殊的褶皱结构所导致的各向异性也是一个非常值得深入研究的特性. 目前关于黑磷各向异性的研究主要集中于力学<sup>[19]</sup>、电学<sup>[20]</sup>和光学<sup>[21]</sup>方面. Chen 等<sup>[19]</sup>利用原子力显微镜测量放置在凹槽上的不同手性的黑磷纳米带的力学特性, 结果发现沿锯齿型方向和扶手椅型方向上测得的理想弹性模量分别为 65 和 27 GPa, 得到黑磷的力学性能会受到各向异性影响的结论. Liu 等<sup>[20]</sup>将黑磷应用于场效应管中, 通过将四对金属接触点按间距 45°进行放置, 研究各向异性对黑磷场效应管的影响, 结果发现黑磷场效应管的漏极电流会随着角度的变化

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11872192, 51675236) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhangzq@ujs.edu.cn

而变化. Xia 等<sup>[21]</sup> 分别将厚度为 2—5  $\mu\text{m}$  的黑磷薄膜按  $30^\circ$  的间距进行分块, 并进行红外偏振处理, 结果发现不同角度黑磷的波长存在很大区别, 即各向异性可以对黑磷的光学特性产生影响. 而目前关于各向异性对黑磷表面上流体流动特性影响的研究却很少, 需要进行相应的研究, 故本文利用黑磷构建纳米通道, 并研究各向异性等参数对黑磷纳米通道内水分子流动特性的影响, 为黑磷的进一步发展以及在微/纳流体器件中的应用提供了理论研究基础.

## 2 模型和方法

本文选用的材料为单层黑磷, 黑磷是由磷原子通过  $\text{sp}^3$  杂化形成褶皱状的蜂窝结构, 其特殊的褶皱结构导致的各向异性是非常值得研究的内容, 单层黑磷模型的尺寸为  $6.56 \text{ nm} \times 4.00 \text{ nm}$ , 磷原子数为 720, 参考石墨烯和碳纳米管手性<sup>[22,23]</sup> 的概念, 将各向异性的概念应用于黑磷, 将黑磷沟槽走向与水分子流动方向之间的夹角定义为手性角  $\theta$ , 考虑构建周期性模型的需要, 边界处的磷原子需要相互匹配, 目前, 本文只构造了  $0^\circ$ ,  $37.4^\circ$ ,  $66.6^\circ$  和  $90^\circ$  四种使得边界处黑磷原子能够匹配的不同手性的单层黑磷模型, 图 1(a) 为单层黑磷的模型图. 为了研究各向异性等参数对黑磷纳米通道内水分子流动特性的影响, 将两个平行的单层黑磷构造成黑磷纳米通道, 并在黑磷纳米通道内填充水分子组成本文使用的 Poiseuille 流系统模型图, 如图 1(b) 所示, 其中水分子的模型选用 TIP4P 模型, 不同于石墨烯的是, 单层黑磷的所有原子并不在同一平面上, 而是如图 1(b) 所示的两个平面, 这里使用蓝色

和绿色两种颜色代表不同平面的黑磷原子. 模拟系统在  $x$  和  $y$  两个方向的尺寸分别为 6.5 和 4.0 nm, 两个单层黑磷之间的垂直距离即为纳米通道的宽度, 用  $H$  进行表示, 对黑磷纳米通道内的水分子施加一个加速度  $g_x$ , 形成 Poiseuille 流, 研究各向异性等参数对黑磷纳米通道内水分子的 Poiseuille 流流动特性的影响.

本文采用分子动力学模拟的方法研究各向异性等参数对压力驱动作用下黑磷纳米通道内水分子的 Poiseuille 流流动特性的影响. 整个模拟系统中,  $x$  和  $y$  方向设置为周期性边界,  $z$  方向设置为固定边界. 首先需要对模拟系统进行弛豫作用, 使得整个系统达到平稳状态, 系综为正则系综 (NVT), 时间步长为 1 fs, 弛豫步数为 1000000, 使得模拟系统的温度稳定在 300 K. 由于采用的是假设恒温条件, 所以  $x$  和  $y$  方向采用 Langevin 恒温器保持 298 K 的恒温, 并且不考虑黑磷-水界面间的热蠕变和温度跃变. 势函数选择方面, 选用 Stillinger-Weber (SW)<sup>[23]</sup> 势函数描述黑磷原子之间的相互作用, 水分子模型选取改进版的四位 TIP4P-Ew 模型<sup>[24]</sup>, 通过 particle-particle particle-mesh (PPPM) 方法计算水分子之间的长程库仑势作用, 库仑相互作用的截止距离为 12  $\text{\AA}$ , 为了保持水分子的 O—H 距离和 H—O—H 键角的稳定性, 这里选用 SHAKE 算法<sup>[25]</sup>. 黑磷与水分子的相互作用采用 Lennard-Jones (L-J) 势函数进行描述, 作用参数可以通过 Lorentz-Berthelot 混合算法计算, 具体参数见表 1<sup>[26,27]</sup>. L-J 作用的截止距离为 10  $\text{\AA}$ . 整个系统的模拟过程为 5 ns ( $5 \times 10^6$  步), 先用 1 ns 的时间进行弛豫, 使模拟系统达到平衡, 接着对黑磷纳米通道内的水分子施加一个加速度, 使得水分

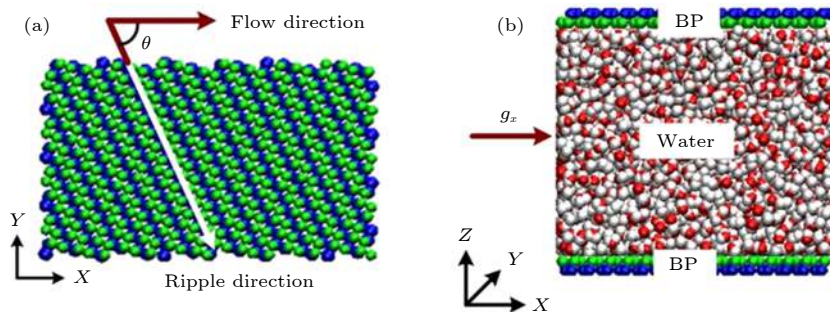


图 1 (a) 单层黑磷模型图, 其中手性角度  $\theta$  指黑磷褶皱方向与水分子流动方向夹角; (b) 黑磷纳米通道内水分子流动的 Poiseuille 流模型图

Fig. 1. (a) Monolayer black phosphorus models, chiral angle  $\theta$  is the intersection angle between water flow direction adjacent the top plate and the ripple direction of BP monolayer; (b) poiseuille flow model of water molecules in black phosphorus nanochannels.

子形成稳定的 Poiseuille 流, 此过程持续时间为 2 ns, 最后 2 ns 用来输出和计算处理分子动力学模拟获得的数据, 对这些数据进行处理得到需要研究的参数.

表 1 L-J 势能函数的参数值  
Table 1. Parameter values of L-J potential function.

Atoms	$\epsilon/\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$	$\sigma/\text{\AA}$
P-P	0.36760	3.43800
O-O	0.16275	3.16435
P-O	0.24460	3.30120

### 3 模拟结果讨论与分析

#### 3.1 驱动力对黑磷纳米通道内水分子的边界滑移的影响

采用如图 1(b) 所示的 Poiseuille 流系统模型, 选用手性角度为  $0^\circ$  的单层黑磷模型, 将两个相同单层黑磷平行放置, 间隙设置为 6 nm, 即纳米通道的宽度设置为 6 nm, 对黑磷纳米通道内水分子沿  $x$  方向施加不同加速度 ( $g_x = 1.0 \times 10^{12}, 1.5 \times 10^{12}, 2.0 \times 10^{12} \text{ m/s}^2$ ), 探究驱动外力对黑磷纳米通道内水分子 Poiseuille 流流体特性的影响. 将黑磷纳米通道内的水分子进行分层统计, 沿纳米通道宽度方向按每层 0.3 nm 的高度对纳米通道内的水分子进行分层, 通过分子动力学方法对每层内的水分子进行平均汇总, 得到如图 2 所示的在不同驱动外力作用下的黑磷纳米通道内水分子的速度分布图, 从图中可以看出, 在不同驱动外力下, 黑磷纳米通道内的水分子沿纳米通道宽度方向都近似为二次曲线分布, 满足 Poiseuille 流的速度分布情况, 并且在边界处出现轻微的滑移现象. 已有研究表明<sup>[28,29]</sup>, 在恒外力条件下的牛顿平板 Poiseuille 流问题中, 可以在宏观 N-S 方程的基础上考虑线性边界滑移条件, 进行描述 Poiseuille 流中流体速度分布问题. 确有文献<sup>[30]</sup>对壁面速度运用高阶多项式进行拟合, 但考虑到本模拟中边界处数据曲线相对于拟合曲线并未出现太大波动, 而且本文重点在于研究黑磷各向异性的影响, 故采用假定线性边界条件进行处理. 运用 Origin 软件对图中的曲线进行非线性拟合处理, 进而得到各曲线关于水分子流动速度与位置坐标之间拟合的二次曲线方程式, 通过将边界处水分子(最外层水分子)的位置坐标代入方程式求

得边界滑移速度, 三种驱动外力对应计算得到的滑移速度  $V_s$  分别为 6.933, 9.956 和 13.491 m/s, 显而易见, 随着驱动外力增加, 黑磷纳米通道内边界处水分子滑移速度也随之增加, 从而对黑磷纳米通道内水分子的流动特性产生影响.

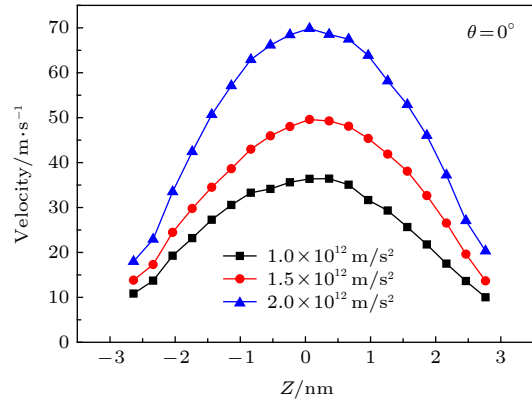


图 2 模型手性角度为  $0^\circ$  时水分子的速度分布

Fig. 2. The velocity distribution of water molecules when the chiral angle of the model is  $0^\circ$ .

数密度分布曲线可以清晰地显示出纳米通道内流体的分布情况, 对了解流体的流动特性具有很大帮助. 同速度分布曲线的获得方法相同, 数密度分布曲线同样需要对黑磷纳米通道内水分子进行分层划分, 分别对四组模型内水分子按照层高为 0.01 nm 进行分层, 通过分子动力学模拟对每层的水分子数目进行统计, 输出数据, 将每层获得的数据除以所属层的体积, 得到黑磷纳米通道内水分子沿纳米通道宽度方向的数密度分布图, 如图 3 所示, 图中  $y$  轴数密度的单位代表着每平方纳米内水分子的数目. 可以看出, 曲线大致分为两个部分, 第一部分为两边靠近边界处的曲线, 可以看出此时水分子的数目受到黑磷壁面的影响, 分布情况较为不均, 边界处水分子发生密度堆积和分层现象, 出现“类固体”效应, 数密度分布曲线的第一个峰值即为边界层, 而随着距壁面距离的增加, 水分子的分布情况逐级平稳, 最后达到稳定状态, 即图中的第二部分——平稳曲线. 从图 3 的密度分布图还可以看出, 壁面处确实出现了密度涨落, 从第一个峰值的放大图可以看出, 水分子的数密度分布出现了轻微的差异, 但这种差异对结果影响很小, 而且水分子的速度曲线在边界处的波动较小, 剪切应变率波动也就很小, 根据公式  $\tau = \mu\dot{\gamma}$  ( $\tau$  为剪应力,  $\mu$  为剪切黏性系数,  $\dot{\gamma}$  为剪切应变率), 边界处与通道中央



处水分子的黏性差异较小. 并且, 边界层占通道宽度的比例较小, 因此本文仍采用通道宽度方向上的均匀化近似, 并用线性边界滑移条件进行了处理.

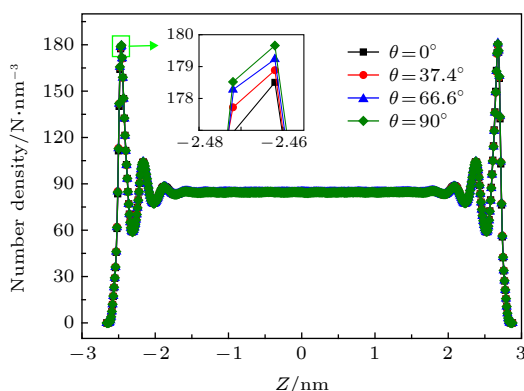


图3 黑磷纳米通道内水分子沿通道宽度方向的数密度分布图

Fig. 3. Number density distribution of water molecules along the channel width in the black phosphorus nanochannels.

### 3.2 各向异性对压力驱动作用下黑磷纳米通道内水分子流动特性的影响

在纳米通道宽度不变的情况下, 研究各向异性对压力驱动作用下黑磷纳米通道内水分子 Poiseuille 流流动特性的影响, 分别使用手性角度分别为  $0^\circ$ ,  $37.4^\circ$ ,  $66.6^\circ$  和  $90^\circ$  的单层黑磷模型构造黑磷纳米通道, 在通道内填充水分子组成四个不同的黑磷-水模拟系统, 分别对四个模拟系统中的水分子施加三种不同加速度 ( $g_x = 1.0 \times 10^{12}$ ,  $1.5 \times 10^{12}$ ,  $2.0 \times 10^{12}$   $\text{m/s}^2$ ), 通过分子动力学方法模拟计算, 研究各向异性对压力驱动作用下黑磷纳米通道内水分子流动特性的影响.

#### 3.2.1 各向异性对压力驱动作用下黑磷纳米通道内水分子滑移特性的影响

如 3.1 节所述, 为了研究各向异性对边界滑移特性的影响, 需要获得纳米通道内水分子沿纳米通道方向的速度分布图, 针对四种不同手性的模拟系统, 分别对黑磷纳米通道内的水分子施加不同的加速度 ( $g_x = 1.0 \times 10^{12}$ ,  $1.5 \times 10^{12}$ ,  $2.0 \times 10^{12}$   $\text{m/s}^2$ ), 得到如图 4 所示的速度分布图 (图 4(a)—图 4(c) 包含三种手性角, 图 2 为一种), 综合比较可以看出, 从四个不同手性模拟系统中计算得到的速度分布图都近似为二次曲线分布, 符合纳米通道内 Poiseuille 流的速度分布图特征, 对四幅图分别进

行非线性拟合后得到在施加不同加速度下对应的四组非线性曲线, 使用与 3.1 节相同的方法, 分别计算得到不同手性模拟系统在施加不同加速度的条件下边界处水分子的滑移速度  $V_S$  ( $\text{m/s}$ ), 如表 2 所列. 从表中数据可以看出, 在不同手性模拟系统中, 随着加速度值的增加, 边界滑移速度都呈现增加的趋势; 当施加的加速度值相同时, 随着手性角度的增加, 黑磷纳米通道内边界处的水分子的滑移速度也呈现减小的趋势. 图 4(d) 给出了流-固界面相互作用势能云图, 可以看出, 黑磷表面特殊的褶皱结构, 导致了其表面规则、粗糙的势能分布, 从而影响了边界处水分子的流动特性, 这是造成黑磷表面各向异性流动的内在原因 [31].

表 2 不同手性情况中, 不同加速度对应的水分子边界滑移速度  $V_S$  统计表

Table 2. Statistical table of water molecule boundary slip velocity  $V_S$  corresponding to different accelerations in different chiral conditions.

$g_x/\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$	Angle/ $^\circ$			
	0	37.4	66.6	90
$1.0 \times 10^{12}$	6.3305	5.7990	4.7818	3.5462
$1.5 \times 10^{12}$	8.9847	8.7979	6.8867	5.8156
$2.0 \times 10^{12}$	13.4912	12.9694	10.6995	7.5839

#### 3.2.2 各向异性对压力驱动作用下黑磷纳米通道内水分子黏度系数的影响

纳米通道内流体的黏度系数也是反映纳米通道内 Poiseuille 流的一个重要参数, 尤其在许多的物理传输过程中扮演着非常重要的角色, 因此流体黏度系数的计算和研究也非常重要. 不同于纳米通道内 Couette 流中使用剪切应力比上剪切应变率的方法, 在纳米通道内 Poiseuille 流的黏度系数通常通过对速度分布曲线拟合计算得到, 从图 4 中可以发现黑磷纳米通道内水分子的速度分布曲线近似为二次分布, 符合 Poiseuille 流特征. 根据 Stokes 方程 [32] 可以得到关于水分子流动速度  $u(z)$  和位置坐标  $z$  之间的关系式

$$u(z) = (z - z_1)(z_2 - z) \rho g / (2\mu), \quad (1)$$

式中  $z_1$ ,  $z_2$  为黑磷壁面坐标,  $\mu$  为黏度系数. 由于水分子密度参数  $\rho$  可以在模拟计算中得到, 加速度  $g$  为预先设定值, 水分子沿纳米通道宽度方向速度分布关系式  $u(z)$  可以通过速度分布曲线拟合得到, 故可以利用 (1) 式计算出水分子的黏度系数, 通过

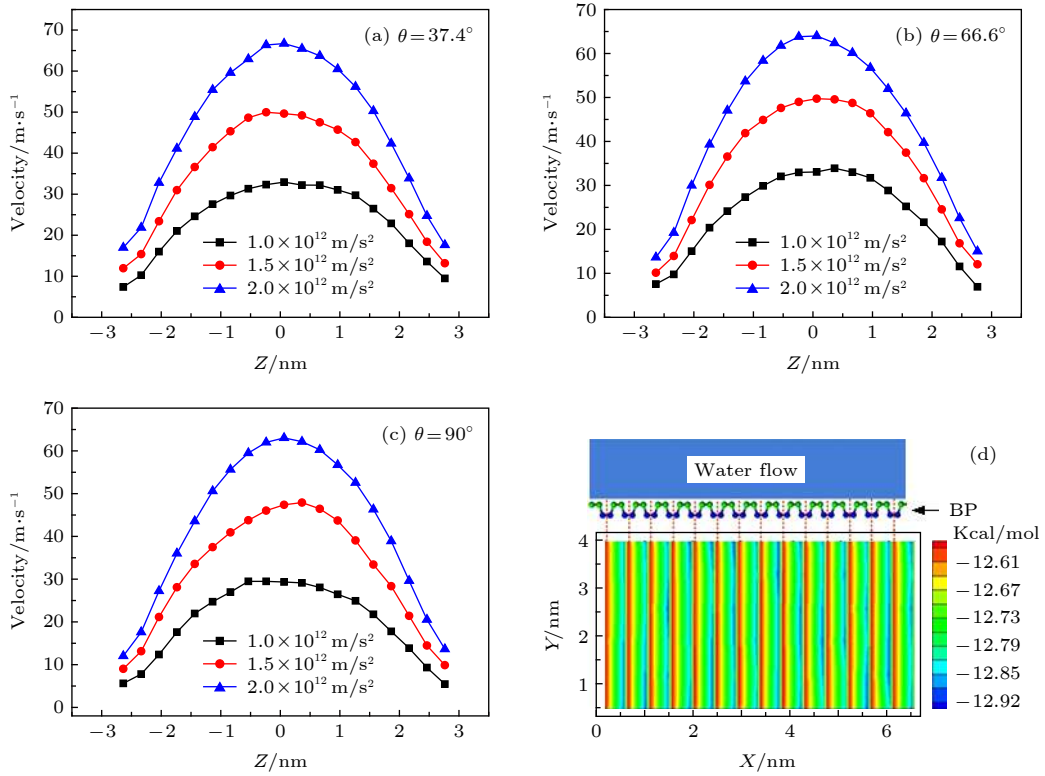


图 4 速度分布图及势能云图 (a) 模型手性角度为  $37.4^\circ$  时水分子的速度分布; (b) 模型手性角度为  $66.6^\circ$  时水分子的速度分布; (c) 模型手性角度为  $90^\circ$  时水分子的速度分布; (d) 模型手性角度为  $90^\circ$  时的势能分布云图

Fig. 4. Velocity distribution diagram and potential energy cloud diagram: (a) The velocity distribution of water molecules when the chiral angle of the model is  $37.4^\circ$ ; (b) the velocity distribution of water molecules when the chiral angle of the model is  $66.6^\circ$ ; (c) the velocity distribution of water molecules when the chiral angle of the model is  $90^\circ$ ; (d) potential energy cloud diagram when the chiral angle of the model is  $90^\circ$ .

对公式两边求二次导数并变形可以得到

$$\mu = \frac{-\rho g_x}{d^2 u_x / dz^2}. \quad (2)$$

对速度分布曲线拟合得到的曲线  $u_x(z)$  可以描述为

$$u_x(z) = u_0 + a(z - z_0)^2, \quad (3)$$

其中  $u_0$  和  $a$  可以在拟合中直接得到,  $z_0$  为通道中心坐标, 故  $d^2 u_x / dz^2 = 2a$ , (2) 式可以最终转变为

$$\mu = \frac{-\rho g_x}{2a}. \quad (4)$$

针对不同手性的模拟系统, 将不同的加速度值以及拟合速度分布曲线得到的参数  $a$  代入 (4) 式中就可以计算得到相对应的黏度系数  $\mu$  (mPa·s), 如表 3 所列. 从表中可以发现, 不同手性的模拟系统在不同加速度条件下, 黑磷纳米通道内水分子的黏度系数几乎保持不变. 为了更直观地表现出这一结果, 将表中数据汇总绘制出黏度系数方差图, 如图 5 所示, 从图中可以清晰地看出, 随着手性角度的增加, 黑磷纳米通道内水分子的黏度系数几乎为一条

直线, 不同手性的模拟系统中水分子的黏度系数值差别很小, 由此可以得出水分子的黏度系数值基本不随手性角度变化而变化的结论.

表 3 不同手性的模拟系统在不同加速度条件下的水分子黏度系数  $\mu$  分布表

Table 3. Distribution of water molecular viscosity coefficient  $\mu$  of simulation systems with different chirality under different acceleration conditions.

$g_x / \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Angle/ $^\circ$			
	0	37.4	66.6	90
$1.0 \times 10^{12}$	0.1182	0.1209	0.1116	0.1212
$1.5 \times 10^{12}$	0.1193	0.1173	0.1123	0.1168
$2.0 \times 10^{12}$	0.1171	0.1203	0.1201	0.1183

### 3.3 通道宽度对压力驱动作用下黑磷纳米通道内水分子流动特性的影响

纳米通道宽度也是影响纳米通道内 Poiseuille 流流动特性的重要参数, 为了研究纳米通道宽度的影响, 分别构建了通道宽度分别为  $H = 3, 4, 5, 6$  nm

的四个模拟系统, 其中单层黑磷选用手性角度为  $90^\circ$  的黑磷模型 (即黑磷褶皱方向垂直于水分子的流动方向). 四个模拟系统中的水分子被施加的加速度值  $g_x$  都为  $2.0 \times 10^{12} \text{ m/s}^2$ , 通过分子动力学计算得到如图 6 的速度分布图. 从图中可以看出, 不同孔宽模型内水分子的流动符合 Poiseuille 流动特征, 并且都在边界处出现滑移现象, 通过对图中曲线分别进行非线性拟合, 结合边界处水分子坐标计算得到相应的滑移速度, 如表 4 所列, 从表中可以发现, 随着通道宽度的增加, 通道内水分子的边

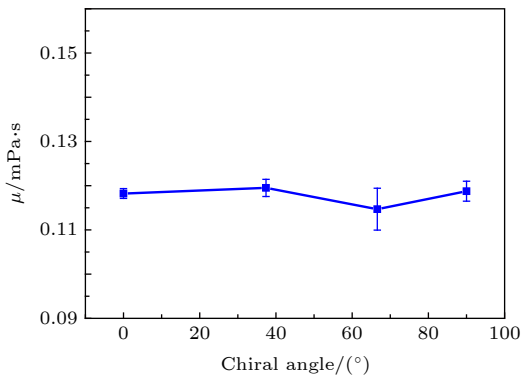


图 5 不同手性的模拟系统在不同加速度条件下的水分子黏度系数方差分布图

Fig. 5. Variance distribution of water molecular viscosity coefficient of a simulation system with different chirality under different acceleration conditions.

表 4 不同纳米通道宽度内水分子的边界滑移表  
Table 4. Boundary slip of water molecules at different nanochannels widths.

$H/\text{nm}$	3	4	5	6
$V_s/\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	4.0267	4.3547	5.8005	7.5839

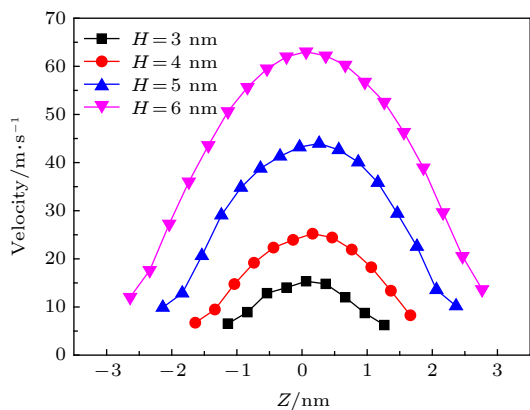


图 6 不同纳米通道宽度内水分子沿通道宽度方向速度分布图

Fig. 6. Velocity distribution of water molecules along the width of different nanochannel widths.

界滑移速度随之增加.

### 3.4 黑磷层数对压力驱动作用下黑磷纳米通道内水分子流动特性的影响

黑磷层数也是研究黑磷纳米通道内 Poiseuille 流中需要考虑的一个参数, 黑磷层与层之间的间隔为  $0.53 \text{ nm}$ , 本分子动力学模拟中所选用的 L-J 势函数的截断半径为  $1 \text{ nm}$ , 故当黑磷层数超过两层时, 最外层黑磷片对纳米通道内的水分子的影响几乎可以忽略不计, 故本节在单层黑磷纳米通道的基础上构造双层黑磷片组成的纳米通道, 在其中填入水分子构成 Poiseuille 流模拟系统, 并考虑其对纳米通道内水分子流动特性的影响.

选取手性角度分别为  $0^\circ$  和  $37.4^\circ$  的黑磷片构建黑磷纳米通道, 同样对纳米通道进行分层统计, 获取水分子沿纳米通道宽度方向的速度分布曲线, 并与单层黑磷纳米通道模型系统进行对比, 得到如图 7 所示的速度分布图. 可以看出, 当对纳米通道内水分子施加相同加速度时, 黑磷层数对水分子的流动影响较小, 单层黑磷纳米通道和双层黑磷纳米通道内的水分子的速度分布曲线存在轻微差异, 整体趋势基本一致. 比较两种情况下纳米通道内水分子的边界滑移速度、黏度系数以及交互界面能等参数, 如表 5 所列, 结果表明双层模型相对于单层模型边界滑移速度出现轻微减小, 黏度系数基本保持不变, 通过比较两种模型的交互界面能, 发现双层模型与水分子的界面能较单层模型轻微增加, 因此边界滑移速度的轻微减小是由于交互界面能的增加所造成的, 通过比较不同手性模型的模拟结果, 不难发现黑磷的各向异性不受黑磷层数的影响.

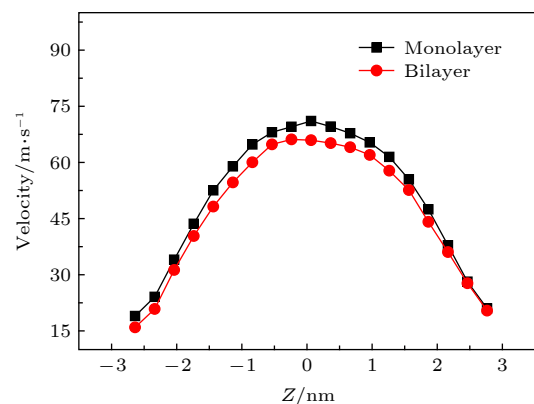


图 7 不同层数模型对应的速度分布图

Fig. 7. Velocity distributions corresponding to different layer models.

表 5 不同黑磷层数纳米通道模型中流固界面参数对比  
Table 5. Comparison of the interfacial parameters for the models with different BP layers.

	$V_S/m \cdot s^{-1}$		$\mu/mPa \cdot s$		$E_{w-BP}/kcal \cdot mol^{-1} \cdot nm^{-2}$	
	Monolayer	Bilayer	Monolayer	Bilayer	Monolayer	Bilayer
0°	13.4912	12.9256	0.1171	0.1216	-13.7663	-13.9138
37.4°	12.9694	12.4460	0.1203	0.1204	-13.7797	-13.9285

## 4 结 论

以黑磷材料构建纳米通道, 基于 Poiseuille 模型研究了各向异性等参数对压力驱动作用下黑磷纳米通道内水分子的滑移及黏度特性的影响, 探究了各向异性对黑磷-水流固界面的影响作用, 揭示了驱动力、各向异性、纳米通道宽度和黑磷层数等对纳米通道内水分子 Poiseuille 流流动特性的影响规律. 研究表明: 随着驱动力的增加, 边界滑移速度随之增加; 各向异性也会对压力驱动作用下纳米通道内的水分子的流动特性产生影响, 具体表现为边界滑移速度会随着手性角度的增加而减小, 而水分子黏度系数却不受各向异性的影响; 最后, 在加速度值保持不变的情况下, 研究纳米通道宽度和黑磷层数对水分子流动特性的影响, 发现随着纳米通道宽度增加, 水分子滑移速度减小; 双层模型中水分子的速度分布和沿通道宽度方向的数密度分布情况依旧与单层模型差异很小, 双层黑磷与水分子之间交互界面能相对于单层黑磷也呈现增加的趋势, 各向异性规律依然保持不变.

## 参考文献

- [1] Keim N C, Arratia P E 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 028302
- [2] Naumis G G, Barraza-Lopez S, Oliva-Leyva M, Terrones H 2017 *Rep. Prog. Phys.* **80** 096501
- [3] Paul J T, Singh A K, Dong Z, Zhuang H, Revard B C, Rijal B, Ashton M, Linscheid A, Blonsky M, Gluhovic D, Guo J, Hennig R G 2017 *J. Phys.: Condens. Matter* **29** 473001
- [4] Hu X T, Li Y, Rao Z J, Hu C G, Fu X 2004 *Nanotechnology and Precision Engineering* **2** 1 (in Chinese) [胡小唐, 李源, 饶志军, 胡春光, 傅星 2004 纳米技术与精密工程 **2** 1]
- [5] Zhou Z Y, Yang X 2003 *Instrument Technique and Sensor* **2** 1 (in Chinese) [周兆英, 杨兴 2003 仪表技术与传感器 **2** 1]
- [6] Yan Y C, Zhang R 2011 *Equipment for Electronic Products Manufacturing* **40** 1 (in Chinese) [严宇才, 张端 2011 电子工业专用设备 **40** 1]
- [7] Wu L, Deng D, Jin J, Lu X B, Chen J P 2012 *Biosens. Bioelectron.* **35** 193
- [8] Khan M, Misra S K, Wang Z, Daza E, Schwartz-Duval A, Kus M J, Pan D 2017 *Anal. Chem.* **89** 2107
- [9] Narang J, Malhotra N, Singhal C, Mathur A, Chakraborty D, Anil A, Ingle A, Pundir C S 2017 *Biosens. Bioelectron.* **88** 249
- [10] Connacher W, Zhang N, An H, Mei J Y, Zhang S, Gopesh T, Friend J 2018 *Lab Chip* **10** 1039
- [11] Soong C Y, Yen T H, Tzeng P Y 2007 *Phys. Rev. E* **76** 036303
- [12] Sofos F D, Karakasidis T E, Antonios L 2009 *Phys. Rev. E* **79** 026305
- [13] Turlo V, Politano O, Baras F 2015 *Acta Mater.* **99** 363
- [14] Balasubramanian S, Mundy C J 1999 *Bull. Mater. Sci.* **22** 873
- [15] Wang Z, Jia H, Zheng X, Yang R, Wang Z F, Ye G J, Chen X H, Shan J, Feng, P X L 2015 *Nanoscale* **7** 877
- [16] Li L, Guo J Y, Tran V, Tran V, Fei R, Zhang Y 2015 *Nat. Nanotechnol.* **10** 608
- [17] Wang X M, Jones A M, Seyler K L, Tran V, Jia Y C, Zhao H, Wang H, Yang L, Xu X D, Xia F N 2015 *Nat. Nanotechnol.* **10** 517
- [18] Yuan Z Z, Liu D M, Tian N, Zhang G Q, Zhang Y Z 2016 *Acta Chimica Sinica* **74** 488 (in Chinese) [袁振洲, 刘丹敏, 田楠, 张国庆, 张永哲 2016 化学学报 **74** 488]
- [19] Chen H, Huang P, Guo D, Xie G X 2016 *J. Phys. Chem. C* **120** 29491
- [20] Liu H, Neal A T, Zhu Z, Luo Z, Xu X F, Tomaneck D, Ye P D 2014 *ACS Nano* **8** 4033
- [21] Xia F, Wang H, Jia Y 2014 *Nat. Commun.* **5** 4458
- [22] Fernández-Escamilla H N, Quijano-Briones J J, Tlahuice-Flores A 2016 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** 12414
- [23] Cai K, Wan J, Wei N, Qin Q H 2016 *Nanotechnology* **27** 275701
- [24] Horn H W, Swope W C, Pitera J W, Madura J D, Dick T J, Hura G L, Head-Gordon T 2004 *J. Chem. Phys.* **120** 9665
- [25] Ryckaert J P, Ciccotti G, Berendsen H J C 1977 *J. Comput. Phys.* **23** 327
- [26] Cai K, Liu L, Jiao S, Qin Q H 2017 *Mater. Des.* **121** 406
- [27] Zhang H W, Ye H F, Zheng Y G, Zhang Z 2011 *Microfluid. Nanofluid.* **10** 403
- [28] Thompson P A, Troian S M 1997 *Nature* **63** 360
- [29] Cao B Y, Chen M, Guo Z Y 2006 *Phys. Rev. E* **74** 066311
- [30] Zhang H W, Zhang Z Q, Zheng Y G, Wang L, Wang J B 2010 *Phys. Rev. E* **81** 066303
- [31] Zhang Z Q, Liu H L, Liu Z, Zhang Z, Cheng G G, Wang X D, Ding J N 2019 *Appl. Surf. Sci.* **475** 857
- [32] Koplik J, Banavar J R, Willemsen J F 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 1282



# Pressure-driven fluid flow characteristics in black phosphorus nanochannels\*

Zhang Zhong-Qiang<sup>1)2)3)†</sup> Liu Han-Lun<sup>1)</sup> Fan Jin-Wei<sup>1)</sup>

Ding Jian-Ning<sup>1)2)</sup> Cheng Guang-Gui<sup>1)</sup>

1) (*Institute of Intelligent Flexible Mechanoelectronic, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China*)

2) (*Jiangsu Collaboratory Innovation Center of Photovoltaic Science and Engineering, Changzhou University, Changzhou 213164, China*)

3) (*State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China*)

( Received 11 April 2019; revised manuscript received 14 June 2019 )

## Abstract

With the rapid development of low-dimensional materials, the opportunity that promotes the development of micro/nano fluid devices, a new low-dimensional material black phosphorus (BP) has attracted wide attention due to its excellent properties, and has been applied to many areas. In this paper, the influences of driving force, water-BP anisotropy, channels' width and the number of black phosphorus layers on the flow characteristics of water molecules in the nanochannels are studied by molecular dynamics based on the Poiseuille flow model. The results show that the boundary slip velocity increases with the driving force increasing. The anisotropy will also affect the flow characteristics of water molecules in the nanochannel under the pressure driving the Poiseuille flow. Specifically, the boundary slip velocity decreases with the chirality angle increasing, and the viscosity coefficient of water molecules is still not affected by the anisotropy. The natural rippled structure of the BP surface leads to the coarse potential surface, and further results in the anisotropic boundary slip and interfacial friction between water and BP sheets. With the driving acceleration kept constant, the influences of the width of nanochannels and the number of black phosphorus layers on the boundary slip velocity and viscosity coefficient of water molecules are investigated. The results indicate that the slip velocity of water molecules in the nanochannels decreases with the width of the nanochannels increasing. The velocity profile of water molecules in the bilayer model is slightly different from that in the monolayer model. With the number of BP layers increasing, the energy of BP-water solid-liquid interface increases while the anisotropic interfacial property remains unchanged. The results will provide a theoretical basis for the study of the characteristics of the fluid flowing in the black phosphorus nanochannels and the design of micro/nano fluid devices based on black phosphorus materials.

**Keywords:** black phosphorus, anisotropy, solid-liquid interface, molecular dynamics

**PACS:** 02.70.Ns, 68.08.-p, 66.20.-d, 47.27.nd

**DOI:** [10.7498/aps.68.20190531](https://doi.org/10.7498/aps.68.20190531)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11872192, 51675236).

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