

DOI: 10.7511/jslx20210125001

纳米尺度通道内的界面流体粘性研究

段晓璐, 叶鑫, 郑勇刚, 张洪武, 叶宏飞*

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

摘要:含液微纳米孔隙在自然界中普遍存在,在发展日趋精密化、微型化的工业中也有着广泛的应用,深刻理解流体在微纳米通道内的物性变化对于相关自然现象以及工业应用具有重要的指导意义。本文基于分子动力学方法,建立了由金属铂板构成的二维纳米尺度通道分子模型,分别考察了受限 Lennard-Jones 流体和水的物性变化。根据密度、剪切应力和粘性在通道高度方向的分布情况,确定了两种流体的边界层厚度约为 4.8 \AA 和 4.6 \AA 。针对边界层内的流体,发现界面流体的粘性相比宏观尺度体态流体粘性明显提高,且随着固-液相互作用强度的增加而增加,但随着通道壁面晶格常数的增加而减少。基于计算结果,给出了由接触角表征的具有一定普适性的流体界面粘性计算公式。研究工作为微纳米尺度通道输运性能及其调控提供了有价值的参考和指导。

关键词:界面流体;分子动力学;纳米通道;密度;粘性

中图分类号: O35 **文献标志码:** A **文章编号:** 1007-4708(2021)03-0290-07

1 引言

土壤、岩石、骨骼和根茎等自然物质中存在着大量的微纳米孔隙,其内部也常由液体填充^[1,2]。此外,微流控芯片和微纳机电系统等微纳尺度器件以及相关的微流控技术在国防、航空航天、机械电子和生物工程等领域也有着越来越广泛的应用,如微机械加速度计^[3]、薄膜悬臂制动器^[4]以及可用于抗体筛选、药物开发和靶向基因工作的微流控系统^[5]等。已有研究表明,与宏观尺度相比,微纳米尺度限域将会对流体的物理性质产生显著影响^[6-9],认识限域流体传输性质和流动行为的尺度效应对相关自然现象的理解以及微纳器件的设计、发展和应用具有重要的指导意义。

作为反映流体内摩擦力的重要物理性质,粘性是影响流体在微纳米通道内传输效率的关键因素之一。值得注意的是,在微纳米尺度下,流体的粘性会受到多种因素的影响,如温度、雷诺数、剪切应力、密度分布和通道性质等^[10]。基于非平衡分子动力学方法,骆双双等^[11]发现气体的粘性会随着温度的升高而增加。同样采用数值模拟方法, Todd

等^[12]指出在低于 10 个流体分子直径的通道中,流体粘性会呈现出非局部效应;张忠强等^[13]通过数值模拟研究了电润湿作用下和纯石墨烯通道中水的流动特性,结果表明这两种情况下水的粘性与剪切应变率无关;Eslami 等^[14]则揭示了非牛顿流体的粘性与剪切速率之间存在着非线性的变化关系;Chen 等^[15]采用平衡分子动力学方法开展了水和乙醇在氧化石墨烯通道中的结构和输运特性研究,结果表明受限流体的粘性是各向异性的。实际上,相比于宏观尺度体态流体,微纳米限域流体由于具有较高的表面积-体积比而使得界面效应尤为突出,这是导致受限流体粘性发生变化的主要原因。同时,在微纳米尺度下,固液间相对较强的耦合作用亦使得固体通道的几何形貌和属性可以进一步影响通道壁面附近流体的分子结构,从而导致粘性呈现出了一定的空间依赖性。Vo 等^[16]揭示了流体在微纳米通道中剪切粘性的非均匀分布,其中位于边界附近的流体粘性明显高于通道中部层,而位于中部层的流体粘性与其体态粘性相差不大;Wu 等^[17]基于对大量已有数据的梳理构建了界面流体剪切粘性与通道壁面润湿性的关系模型,即随着壁面润湿性的增强,界面流体粘性会显著增加,界面粘性与接触角之间存在着良好的线性相关性;Morciano 等^[18]通过分子动力学方法研究了 LJ (Lennard-Jones) 流体在边界附近的应力张量,并揭示了流体在边界处的吸附现象,导致其密度、应力和粘性在局部有所增加。从已有工作可以看出,

收稿日期:2020-01-25;修改稿收到日期:2021-04-13.

基金项目:国家自然科学基金(11972108; 11672063; 12072062; 12072061; 11772082);中央高校基本科研业务费资助项目;上海超算中心、大连理工大学超级计算中心支持.

作者简介:叶宏飞*(1984-),男,博士,副教授,博士生导师 (E-mail:yehf@dlut.edu.cn).

微纳米尺度通道内流体粘性变化的原因主要来源于界面,这包括了高表面积-体积比的限域流体界面影响以及与通道壁面作用的固液耦合界面影响,多影响因素的协同作用使得界面流体粘性的变化机制难以阐明,粘性界面层尺寸和与通道壁面属性定量关系等诸多问题均面临着较大的挑战。

为了深入理解界面流体粘性的变化规律,本文基于分子动力学模拟方法,分别以 LJ 流体和水两类流体为研究对象,考虑了微纳米通道壁面润湿性以及表面分子结构的影响,开展了界面流体粘性的数值模拟及分析。研究工作将为微纳米孔隙和通道的流体输运性能研究提供有价值的参考,同时对微纳流控芯片及器件的设计有重要的指导意义。

2 计算方法

2.1 数值方法与模型

本文建立的受限于纳米尺度通道内流体的分子动力学模型如图 1 所示,模拟系统的尺寸为 $L_x \times L_y \times L_z = 6 \text{ nm} \times 5 \text{ nm} \times 10 \text{ nm}$ 。其中,纳米尺度通道由两个金属铂层片构成,铂原子以面心立方(FCC)结构排列,晶格常数 $a = 3.92360 \text{ \AA}$,平行于 xy 平面为其(111)方向,铂层片之间沿 z 方向的间距即纳米尺度通道高度约为 6 nm , x 和 y 方向边界为周期性边界条件。

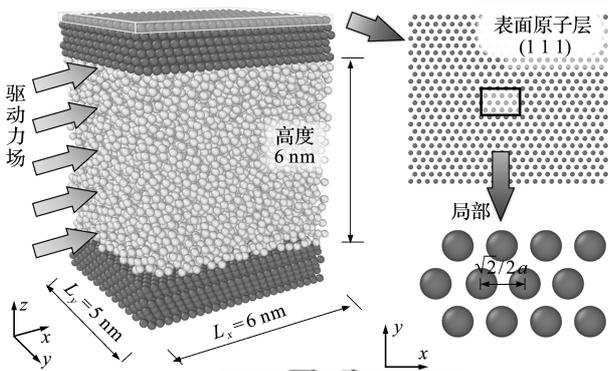


图 1 二维纳米尺度金属铂通道与流体计算模型(中间部分为流体,上下两端为铂,右侧插图为通道表面原子层结构及局部放大图)
Fig. 1 Computational model of fluid confined in the two-dimensional nanoscale platinum channel (the fluid is confined in the middle region by the two platinum layers, the right inset illustrates the molecular structure of the channel surface and its enlarged view)

为了充分认识流体在界面处的粘性变化规律,分别考虑了 LJ 流体和水两种流体。其中,LJ 流体以液氩作为参考,其 LJ 势能参数为 $\epsilon = 1.007 \text{ kJ/mol}$ 和 $\sigma = 0.3405 \text{ nm}$,流体分子与铂原子之间采用 LJ 势能,其参数为 $\epsilon_{AP} = 0.539 \text{ kJ/mol}$ 和 $\sigma_{AP} = 0.3085 \text{ nm}$ ^[19];水分子模型采用基于机器学习技术发展的粗粒化模

型^[20],其与铂原子之间的相互作用为 LJ 势能,参数为 $\epsilon_{WP} = 3.884 \text{ kJ/mol}$ 和 $\sigma_{WP} = 0.27 \text{ nm}$ ^[21]。为了考察流体与固体通道相互作用的影响,在固液作用的 LJ 势能强度参数中引入强度因子 C 来改变相互作用强度,即 $\epsilon'_{AP} = C\epsilon_{AP}$, $\epsilon'_{WP} = C\epsilon_{WP}$, C 的取值范围根据流体在铂表面的接触角跨度(全面均衡考虑亲疏水性)来确定。此外,为了考察固体表面结构的影响,进一步考虑了晶格常数为 $a = 4.31596 \text{ \AA}$ 的情况。

分子动力学计算基于开源代码 LAMMPS 进行^[22]。LJ 势函数选取 GROMACS 12-6 类型,内外截断半径分别为 1.2 nm 和 1.5 nm 。采用 Velocity-Verlet 算法求解运动方程,时间步长分别为 0.002τ (LJ 流体;无量纲, $\tau = \sigma\sqrt{m/\epsilon}$) 和 1 fs (水)。金属铂通道固定且无变形。模拟系统充分弛豫后,对所有流体分子施加 x 方向作用力以驱动流体流动形成 Poiseuille 流,通过 Berendsen 恒温器分别将 LJ 流体和水的温度保持在 $0.7 \epsilon/k_B$ (实际液氩温度)和 298 K 。非平衡态动力学计算 $4 \text{ ns} \sim 6 \text{ ns}$ 后,在流动达到稳定态时进行数据收集和统计平均计算。为了考察驱动力对界面粘性的影响,对 LJ 流体和水分别施加了 $0.002 \epsilon/\sigma \sim 0.028 \epsilon/\sigma$ 和 $1.50 \times 10^{-5} \text{ nN} \sim 20.93 \times 10^{-5} \text{ nN}$ 的驱动力,最终界面粘性为多个驱动力计算下的平均结果。

2.2 粘性计算方法

对于非平衡分子动力学模拟的泊肃叶流动,本文沿通道高度方向进行了分层,统计并计算了每一层的应力分量 σ_{xy} ,流体粘性为应力分量与层内剪切速率的比值^[23],

$$\eta = -\langle \sigma_{xy} \rangle / \dot{\gamma} \quad (1)$$

式中

$$\langle \sigma_{xy} \rangle = \frac{1}{\Omega} \left(\sum_{i=1}^N \frac{P_{xi} P_{yi}}{m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{N,N^*} r_{xij} F_{yij} \right) \quad (2)$$

Ω 为计算域的体积。 N 为计算域内的分子总数, N^* 为截断距离内对计算域内流体分子产生影响的邻近分子数, m_i 为第 i 个分子的质量, $P_{ni} = u_n m_i$ (u_n 为第 i 个分子在 n 方向的速度), $F_{ij} = -(\mathbf{r}_{ij}/r_{ij})(dU_{ij}/dr_{ij})$ 。剪切速率选取每一层中心位置的速度梯度,其中速度梯度是通过泊肃叶流的速度轮廓进行计算的。除了分层的流体粘性计算,同时基于不含限域的周期性边界模型计算了流体的体态粘性以进行对比分析。对于体态粘性的计算,采用了 Green-Kubo 线性响应理论^[24],

$$\eta = \frac{V}{k_B T} \int_0^\infty \langle P_{xy}(t) \cdot P_{xy}(0) \rangle dt \quad (3)$$

式中 P_{xy} 为系统剪切应力张量的非对角元素。

3 结果与讨论

3.1 边界层的尺寸

对于受限于纳米尺度通道的流体而言,合理准确地确定边界层的尺寸是界面流体粘性计算与分析的基础。本节从受限流体的密度、剪切应力以及粘性分布三个方面进行边界层尺寸的分析。图2给出了不同固-液作用强度下(调节强度因子 C),金属铂纳米通道中 LJ 流体(图 2(a))和水(图 2(b))的密度沿通道高度方向的分布。可以看出,相同固-液作用强度下,LJ 流体和水的密度均在靠近固体壁面的区域存在剧烈震荡,这种震荡会随着

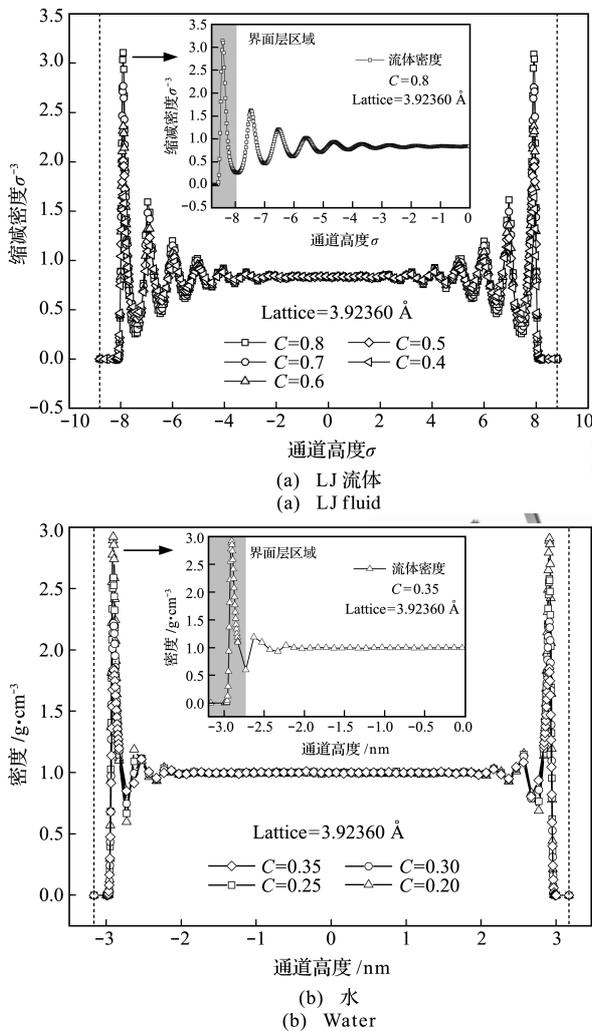


图2 不同固-液作用强度下金属铂纳米通道中 LJ 流体和水的密度分布(插图表示相应强度因子 C 下的密度分布放大图)
Fig. 2 Density distributions of LJ fluid and water in the platinum nanochannel with different solid-liquid interaction intensities (the insets show the enlarged density distribution under the corresponding intensity coefficient C , and the shaded parts are the interface layers)

与壁面距离的增加而逐渐平缓并趋于流体的体态密度。靠近壁面的震荡变化趋势主要是因为固-液相互作用的势能会吸引更多的流体分子陷入其势阱附近。随着与壁面距离的增加,固-液作用逐渐减弱,液体分子之间的作用促使震荡有所延续,但震荡的幅值逐渐衰减。当固-液作用强度增加时,密度的震荡幅值随之增加,但震荡的位置几乎保持不变,这是由于固-液作用采用了相同的势阱位置参数 σ 。图2给出了密度分布的局部放大图,可以看出相比于 LJ 流体,水的衰减震荡区域宽度显著减少,这主要归因于相对较强的流体分子间作用。

根据式(2),可将限制于纳米尺度通道内的流体沿通道的高度方向分层,并依次计算 xy 面内的应力分量 σ_{xy} , 其沿高度的分布情况如图3所示。可以看出,应力 σ_{xy} 分布是沿通道中心对称的,根据通道模型的对称性和泊肃叶流速梯度情况可知,该应力分布是合理的。同样地,在靠近通道壁面附近,应力分量 σ_{xy} 呈现出了剧烈的震荡,其发生的位置与密度的第一个高幅度震荡几乎相同。应力分量的震荡一方面由于靠近通道壁面处的流体分子同时受到了来自边界和内部流体的作用力,这与内部流体仅受到流体分子的作用显著不同;另一方面,密度在边界处的震荡意味着边界附近流体分子的聚集程度会随位置而变化,从而导致了应力分量的增加(密度高的位置)和减少(密度低的位置)。

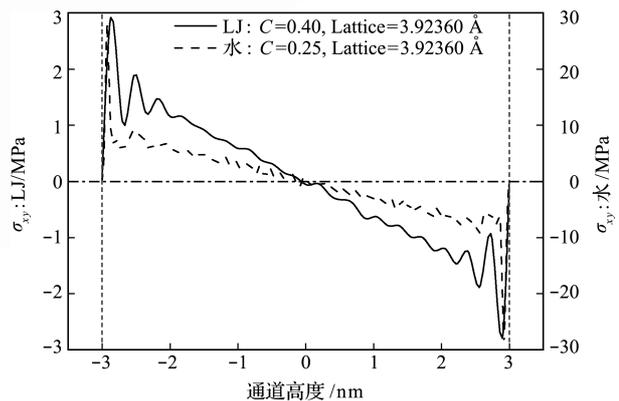


图3 金属铂纳米通道中 LJ 流体和水的应力分量 σ_{xy} 随通道高度的分布曲线
Fig. 3 Distributions of σ_{xy} of LJ fluid and water along channel height in the platinum nanochannel

基于应力分量 σ_{xy} , 可由式(1)进一步得到通道内流体粘性沿高度变化的分布情况,如图4所示。图中虚线为两种流体的体态粘性,分别为 $280.64 \mu\text{Pa}\cdot\text{s}$ (LJ 流体)和 $748.15 \mu\text{Pa}\cdot\text{s}$ (水),与已有工作的相关结果基本吻合^[25,26]。由于泊肃叶流在通道沿高度的中

部区域内的速度梯度趋近无穷大,使得粘性的计算结果在体态粘性附近波动,结果范围分别为 $240 \mu\text{Pa}\cdot\text{s} \sim 320 \mu\text{Pa}\cdot\text{s}$ 和 $680 \mu\text{Pa}\cdot\text{s} \sim 800 \mu\text{Pa}\cdot\text{s}$,表明中部区域的粘性几乎不会受到限域的影响。

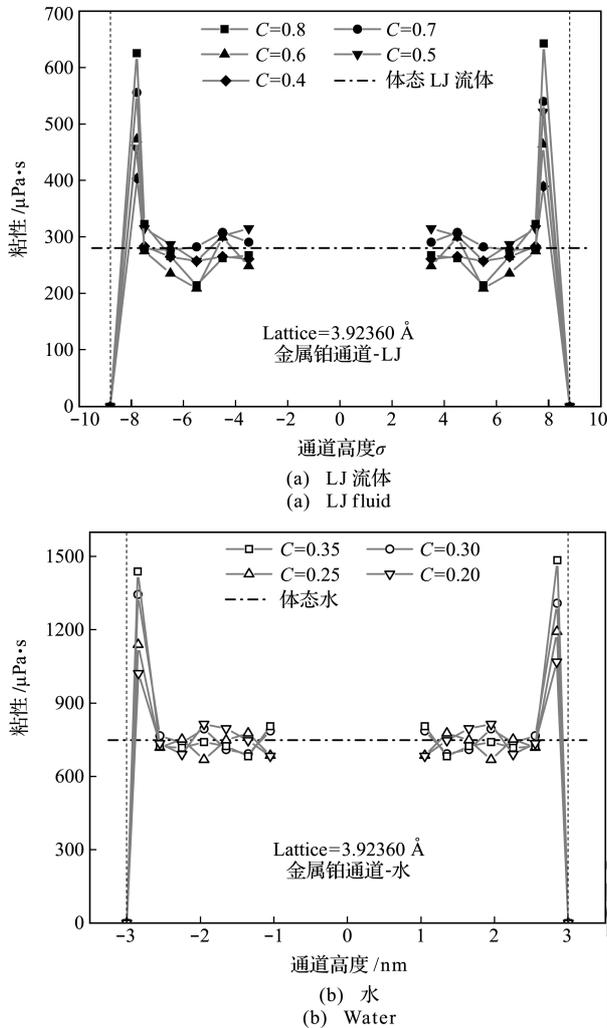


图4 金属铂纳米通道中 LJ 流体和水的粘性随通道高度的分布
Fig. 4 Distributions of viscosity of LJ fluid and water with channel height in the platinum nanochannel

综合密度、剪切应力和粘性的分布情况可以看出, LJ 流体和水在靠近通道壁面区域内的上述性质均会出现较为明显的震荡。相比于密度的宽区域震荡,剪切应力 σ_{xy} 和粘性仅在靠近壁面的第一个分子层内存在明显波动,其距离通道壁面分别约为 4.8 \AA 和 4.6 \AA ,本文将此区域内的流体认定为界面流体。可以看出,界面流体在边界层的性质与体态情况有显著不同,深刻理解界面流体的粘性变化规律对于微纳米尺度通道内流体的等效粘性以及整体流动行为的认识至关重要。

3.2 边界层的粘性

根据由边界层尺寸定义的界面流体,由式(1)

计算了两种流体的粘性,如图 5 所示。计算结果表明,在通道表面结构(晶格常数)不变的情况下,处于边界层内的 LJ 流体和水的粘性均会随着 LJ 势能作用的强度因子的增加而增加。然而,当 LJ 势能作用的强度因子保持不变时,界面 LJ 流体的粘性会随着晶格常数的增加而减少。为了揭示边界层粘性变化的机理,并阐明固-液相互作用和晶格常数对界面流体粘性的影响机制,在模拟系统达到平衡状态后考察了不同情况下边界层内临近壁面流体分子的分布情况,如图 6 所示。可以看出,对于相同的固体表面结构, LJ 势能强度因子的增加可以吸附更多的流体分子,形成更为致密的分子层,相比稀疏结构,这种致密的分子结构提高了分子能够发生相对运动的临界能量,从而提高了粘性。然而,当 LJ 势能强度因子相同时,晶格常数的降低可以在单位面积内为流体分子提供更多的吸附位点,致使其可以捕获更多的流体分子,进一步增加了边界层内的流体密度,使粘性进一步提高。

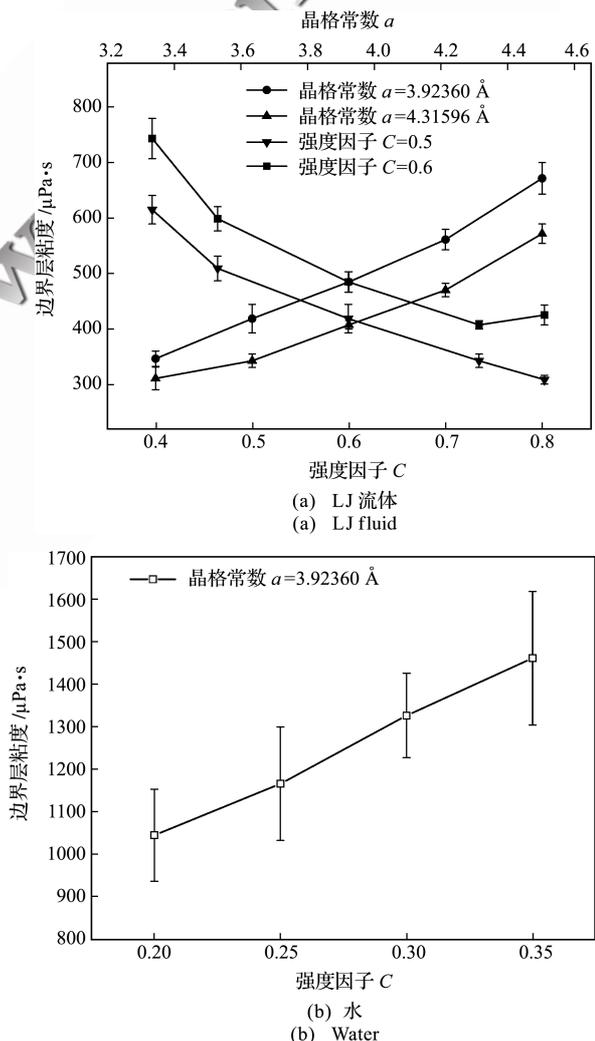


图5 金属铂纳米通道中界面流体的粘性
Fig. 5 Viscosity of interfacial fluids in the platinum nanochannel

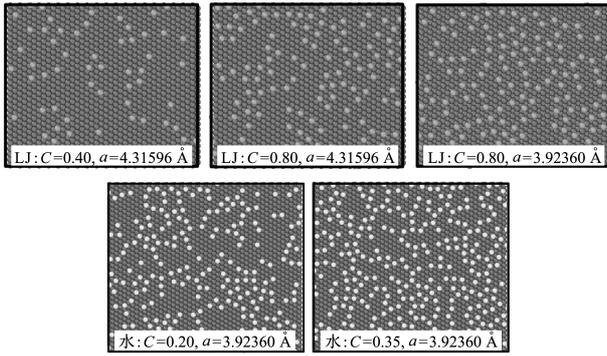


图6 金属铂纳米通道中靠近通道壁面的LJ流体和水的分子分布
Fig. 6 Distribution diagrams of LJ fluid and water molecules close to the platinum wall

实际上,流固之间LJ势能的强度因子以及固体表面晶格常数的变化都会引起边界层内流体分子结构及性质的变化,其本质机理可以进一步认为是强度因子和晶格常数等因素的改变促使通道壁面与边界层内流体之间耦合作用发生了变化。相比于中部流体仅与流体分子接触不同,界面流体的一个边界紧邻着固体壁面,其在发生剪切运动时需克服来自通道壁面的吸附势垒。在宏观尺度通道内,由于中部流体的体积占比显著高于界面流体,因此其粘性与体态粘性相比几乎相同。但是,在微纳米尺度通道中,表面占比的大幅提高使得通道内整体粘性的变化无法忽视。从图4可以看出,界面流体的粘性是影响限域流体等效粘性的关键。因此,为了方便估算界面流体的粘性,本文从流固耦合作用方面建立定量关系。流固之间的耦合作用以它们之间的黏附能 W_a 进行表征,可表示为^[27]

$$W_a = \gamma_{LV}(1 + \cos\theta) \quad (4)$$

式中 γ_{LV} 是流体的表面张力, θ 为流体在固体表面的接触角。假设界面流体粘性相对于体态粘性的变化与流固耦合作用相对于流体分子之间作用的变化相关,那么界面粘性与体态粘性的比值 $\eta_{rela} = \eta_{inter}/\eta_{bulk}$ (相对粘性,描述粘性的变化量)与流固黏附能和流体表面张力的比值 $W_a/\gamma_{LV} = 1 + \cos\theta$ (描述相互作用的变化量)亦相关,即相对粘性与接触角余弦有关。图7给出了本文考虑的LJ流体和水的相对粘性与接触角余弦值的关系,基于本文的数值计算结果拟合可得

$$\eta_{rela} = 1.0711\cos\theta + 1.8436 \quad (5)$$

式(5)的接触角是通过独立算例获得的,其计算模型如图7插图所示。同时,为了进一步考察公式的适用性,在铂通道的基础上进一步计算水在石

墨烯通道中的相对粘性(图7菱形数据点),其计算结果也与公式计算结果基本吻合。此外,Wu等^[17]基于已有的受限于多种类型通道中的流体界面粘性结果,建立了相对粘性与接触角的关系为 $\eta_{rela} = -0.018\theta + 3.25$,结果如图7点划线所示。可以看出,在本文数据集中的非极端润湿性区域,式(5)的计算结果与文献[17]的结果变化趋势几乎一样,但数值略高,这主要是由于文献[17]获得的界面粘性所考虑的边界层尺寸更高(约7 Å),使得界面粘性的结果向着体态粘性靠近而有所减少。

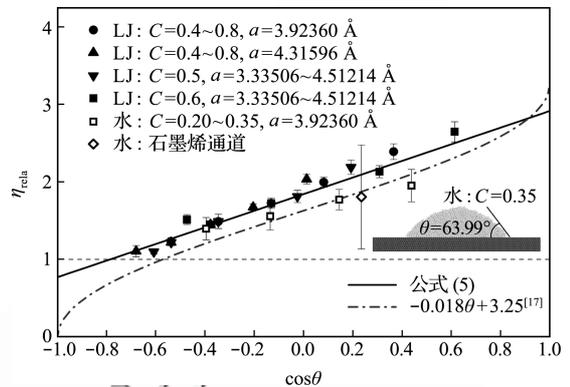


图7 流体相对粘性(界面粘性与体态粘性的比值)与 $\cos\theta$ 的关系
(插图为接触角计算模型)
Fig. 7 Variation of relative viscosity (the ratio between interfacial viscosity and bulk viscosity) with $\cos\theta$ (the inset illustrates the computational model for evaluating contact angle)

4 结论

本文基于分子动力学方法在二维金属铂通道中形成了LJ流体和水的泊肃叶流动,考虑固-液相互作用强度和固体表面分子结构这两种主要因素,分别计算了通道中两种流体的密度、应力以及粘性分布,并确定了两种流体的边界层厚度。计算结果表明,处于边界层中的界面流体粘性相比其体态粘性有所增加,且随着固-液相互作用强度的增加而增加,随着固体壁面原子晶格常数的增加而减小。基于本文的计算结果,进一步揭示了界面流体粘性与接触角的关系,即相对粘性与接触角余弦值呈现了较好的线性关系,并给出了具有一定普适性的流体界面粘性计算公式为 $\eta_{rela} = 1.0711\cos\theta + 1.8436$ 。研究工作可结合界面流体在通道截面内的体积占比以及体态粘性来估算流体等效粘性,从而为包括Navier-Stokes方程的跨尺度应用和微流控通道设计等微纳米尺度流动问题的研究提供重要参考。

参考文献(References):

- [1] 刘曰武, 高大鹏, 李奇, 等. 页岩气开采中的若干力学前沿问题[J]. 力学进展, 2019, **49**: 1-236. (LIU Yue-wu, GAO Da-peng, LI Qi, et al. Mechanical frontiers in shale-gas development[J]. *Advances in Mechanics*, 2019, **49**: 1-236. (in Chinese))
- [2] 张锡奇, 闻利平, 江雷. 低维限域结构中水与物质的输运[J]. 物理学报, 2019, **68**(1): 56-76. (ZHANG Xi-qi, WEN Li-ping, JIANG Lei. Water and mass transport in low-dimensional confined structures[J]. *Acta Physica Sinica*, 2019, **68**(1): 56-76. (in Chinese))
- [3] Feng P X L, Young D J, Zorman C A. *MEMS/NEMS Devices and Applications*[M]. Springer Handbook of Nanotechnology, Springer, Berlin, Heidelberg, 2017.
- [4] Bhaskar U K, Banerjee N, Abdollahi A, et al. A flexoelectric microelectromechanical system on silicon[J]. *Nature Nanotechnology*, 2016, **11**(3): 263-266.
- [5] Shembekar N, Chaipan C, Utharala R, et al. Droplet-based microfluidics in drug discovery, transcriptomics and high-throughput molecular genetics[J]. *Lab on a Chip*, 2016, **16**(8): 1314-1331.
- [6] 王奉超, 朱银波, 吴恒安. 纳米通道受限液体的结构和输运[J]. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2018, **48**(9): 117-133. (WANG Feng-chao, ZHU Yin-bo, WU Heng-an. Structure and transport of confined liquid in nanochannels[J]. *Scientia Sinica (Physica, Mechanica & Astronomica)*, 2018, **48**(9): 117-133. (in Chinese))
- [7] 沈海军. 碳纳米管在水中的运动阻力特性[J]. 计算力学学报, 2009, **26**(4): 552-556. (SHEN Hai-jun. Kinetic resistance of carbon nano-tubes in water[J]. *Chinese Journal of computational Mechanics*, 2009, **26**(4): 552-556. (in Chinese))
- [8] 刘冬薇, 宁智, 吕明, 等. 液滴撞击超疏水壁面反弹及破碎行为研究[J]. 计算力学学报, 2016, **33**(1): 107-113. (LIU Dong-wei, NING Zhi, LÜ Ming, et al. Study on the rebound and breakup of the droplet after impacting on the super-hydrophobic wall[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2016, **33**(1): 107-113. (in Chinese))
- [9] 曹国鑫. 压力驱动纳米流控行为的计算模拟研究[J]. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2017, **47**(7): 142-170. (CAO Guo-xin. Computational simulations of pressure-driven nanofluidic behavior[J]. *Scientia Sinica (Physica, Mechanica & Astronomica)*, 2017, **47**(7): 142-170. (in Chinese))
- [10] 林建忠, 包福兵, 张凯. 微纳流动理论及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2010. (LIN Jian-zhong, BAO Fu-bing, ZHANG Kai. *Theory and Application of Micro-Nano Flows*[M]. Beijing: Science Press, 2010. (in Chinese))
- [11] 骆双双, 包福兵, 林建忠. 纳米尺度通道中气体粘度的分子动力学模拟[J]. 低温工程, 2015(2): 28-32. (LUO Shuang-shuang, BAO Fu-bing, LIN Jian-zhong. Molecular dynamics simulation of gas viscosity in nano-scale channels[J]. *Cryogenics*, 2015(2): 28-32. (in Chinese))
- [12] Todd B D, Hansen J S. Nonlocal viscous transport and the effect on fluid stress[J]. *Physical Review E*, 2008, **78**(5): 051202.
- [13] 张忠强, 叶宏飞, 程广贵, 等. 电润湿作用下水在石墨烯表面流动的边界滑移及界面摩擦[J]. 新型炭材料, 2013, **28**(6): 475-479. (ZHANG Zhong-qiang, YE Hong-fei, CHENG Guang-gui, et al. Boundary slip and interfacial friction properties of confined-water flow on graphene under electrowetting[J]. *New Carbon Materials*, 2013, **28**(6): 475-479. (in Chinese))
- [14] Eslami H, Müller-Plathe F. Viscosity of nanoconfined polyamide-6,6 oligomers: Atomistic reverse nonequilibrium molecular dynamics simulation[J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2010, **114**(1): 387-395.
- [15] Chen Y K, Xu Z J, Zhan M, et al. Viscosity and structure of water and ethanol within GO nanochannels: A molecular simulation study[J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2020, **124**(48): 10961-10970.
- [16] Vo T Q, Barisik M, Kim B. Near-surface viscosity effects on capillary rise of water in nanotubes[J]. *Physical Review E*, 2015, **92**(5): 053009.
- [17] Wu K, Chen Z, Li J, et al. Wettability effect on nanoconfined water flow[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2017, **114**(13): 3358-3363.
- [18] Morciano M, Fasano M, Nold A, et al. Nonequilibrium molecular dynamics simulations of nanoconfined fluids at solid-liquid interfaces[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2017, **146**(24): 244507.
- [19] 曹炳阳, 陈民, 过增元. 纳米通道内液体流动的滑移现象[J]. 物理学报, 2006, **55**(10): 5305-5310. (CAO Bing-yang, CHEN Min, GUO Zeng-yuan. Velocity slip of liquid flow in nanochannels[J]. *Acta Physica Sinica*, 2006, **55**(10): 5305-5310. (in Chinese))
- [20] Chan H, Cherukara M J, Narayanan B, et al. Machine learning coarse grained models for water[J]. *Nature Communications*, 2019, **10**(1): 379.
- [21] Zhu S B, Philpott M R. Interaction of water with metal surfaces[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1994, **100**(9): 6961-6968.
- [22] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, **117**(1): 1-19.

- [23] Xu P, Cagin T, Goddard W A. Assessment of phenomenological models for viscosity of liquids based on nonequilibrium atomistic simulations of copper[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2005, **123**(10): 104506.
- [24] Hoover W G, Evans D J, Hickman R B, et al. Lennard-Jones triple-point bulk and shear viscosities, Green-Kubo theory, Hamiltonian mechanics, and non-equilibrium molecular dynamics[J]. *Physical Review A*, 1980, **22**(4): 1690-1697.
- [25] González M A, Abascal J L. The shear viscosity of rigid water models[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2010, **132**(9): 096101.
- [26] Haynes W M. *CRC Handbook of Chemistry and Physics* (96th Edition) [M]. CRC Press/Taylor & Francis, Boca Raton, 2016.
- [27] Berthier J. *Micro-Drops and Digital Microfluidics* [M]. Elsevier, 2012.

The viscosity of interfacial fluid confined in nanoscale channel

DUAN Xiao-lu, YE Xin, ZHENG Yong-gang, ZHANG Hong-wu, YE Hong-fei*

(State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment,

Department of Engineering Mechanics, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: Fluid-filled micro- and nano- scale pores are ubiquitous in nature and have wide applications in industry. The trend is towards high precision and miniaturization. Understanding the change in the physical properties of the fluid induced by the small confinement is crucial for the relevant natural phenomena and industrial developments. In this paper, based on molecular dynamics simulations, platinum layers are utilized to construct two-dimensional nanoscale channels to examine the physical properties of the confined Lennard-Jones (LJ) fluid and water. According to the distributions of density, shear stress and viscosity along the channel height, we determine the thicknesses of the boundary layer as 4.8 Å and 4.6 Å for LJ fluid and water, respectively. Based on the interfacial fluid in the mentioned boundary region, it is revealed that the viscosity of interfacial fluid increases relatively to the viscosity of bulk fluid at macroscale. The viscosity of interfacial fluid increases with increasing the solid-fluid interaction but decreases with increasing lattice constant of channel surface. A universal equation for estimating the viscosity of interfacial fluid by contact angle is proposed on the basis of the present computational results. This work provides valuable reference and guidance for the transport performance of nanoscale channels and the relevant tunable strategy through the channel design.

Key words: interfacial fluid; molecular dynamics; nanoscale channel; density; viscosity

引用本文/Cite this paper:

段晓璐, 叶鑫, 郑勇刚, 等. 纳米尺度通道内的界面流体粘性研究[J]. 计算力学学报, 2021, **38**(3): 290-296.

DUAN Xiao-lu, YE Xin, ZHENG Yong-gang, et al. The viscosity of interfacial fluid confined in nanoscale channel[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2021, **38**(3): 290-296.