

不同润湿性纳米通道内库埃特流动的模拟¹⁾

胡海豹²⁾ 鲍路瑶 黄苏和

(西北工业大学航海学院, 西安 710072)

摘要 利用非平衡分子动力学模拟方法, 模拟了两无限大平行平板组成的纳米通道内的库埃特流动, 并给出了壁面润湿性和速度对流场密度、速度分布及壁面滑移的影响规律. 数值模拟中, 统计系综采用微正则系综, 势能函数选用 LJ/126 模型, 壁面设为刚性原子壁面, 温度校正使用速度定标法, 牛顿运动方程的求解则采用文莱特算法. 结果表明, 纳米通道内流体密度呈对称的衰减振荡分布, 且随壁面润湿性的降低, 振荡幅度减小, 振荡周期保持不变; 滑移量随壁面润湿性的提高而降低, 甚至在亲水壁面时出现负滑移现象; 随壁面速度的增加滑移速度逐渐增大, 且在流体呈现非线性流动阶段其增幅显著加大. 另外, 还发现当壁面设置为超疏水性时, 壁面滑移呈现出随润湿性降低而减小的反常现象, 并基于杨氏方程对其进行了解释.

关键词 润湿性, 库埃特流动, 分子动力学, 滑移速度, 杨氏方程

中图分类号: O647 文献标识码: A DOI: 10.6052/0459-1879-12-244

引言

近十几年来, 疏水表面在流动减阻方面的应用潜力引起了人们广泛的关注^[1-4]. Ou 等^[5] 在层流状态下测量发现, 疏水表面微通道无量纲压降比降幅超过 40%. Choi 等^[6] 试验发现在相同压力下疏水表面微通道内流率明显大于一般微通道, 并把其解释为疏水表面使流体在壁面处产生滑移. 姚朝晖等^[7] 利用碳纳米管构建了具有微纳结构的超疏水表面, 开展了该表面宏观尺度下的槽道阻力测试和基于 μ -PIV 技术的矩形截面微槽道流场测试试验, 结果表明, 层流条件下超疏水表面最大减阻量达到 36.3%, 且在壁面处流体存在明显的速度滑移. Lauga 等^[8] 基于 NS 方程, 数值计算了圆管内壁面滑移流动, 但由于引入充分发展层流假设等简化模型, 致使给出的滑移量明显偏大. 陈晓玲等^[9] 使用 FLUENT 软件对直径 6 mm 的超疏水圆管内湍流流动进行了数值模拟, 结果发现, 当雷诺数大于临界值时, 超疏水圆管内湍流流动表现为减阻作用, 反之则为增阻作用. 国内外学者已充分证实了疏水表面存在减阻效果, 但上述相关研究仍存在以下不足: (1) 对疏水性界面“滑移”现象产生机制缺乏合理解释; (2) 数值模拟依据连续介质假设, 而实际该问题涉及到微流动.

在微流动研究领域, 近年来, 也有研究者开展过一些与该问题相近的研究工作. 如 Thompson 等^[10-11] 报道了不同固液作用强度下的库埃特流动, 并给出了滑移长度随固液相互作用强度降低而单调增大的结论; Priezjev 等^[12] 报道了聚合物分子在亲水纳米通道中的库埃特流动, 得到了不同分子链长度下剪切率对滑移长度的影响规律; Soong^[13] 等研究了不同晶格平面种类等条件下的库埃特流动和泊肃叶 (Poiseuille) 流动, 也给出了固液作用强度对滑移长度的影响, 但仅计算了 4 种不同作用强度值. 曹炳阳等^[14-15] 利用分子动力学方法模拟了纳米通道内的库埃特流动, 给出了壁面润湿性对流体密度分布和速度分布的影响规律, 但是由于通道内分层数少导致相关规律尚不完善. Voronov 等^[16] 利用分子动力学模拟对库埃特流动的研究也发现了流体密度分布和滑移现象的类似规律, 但同时指出壁面接触角对滑移量的影响并非单调. Cieplak 等^[17] 以纳米通道内库埃特流动为对象, 研究了固液作用强度和流体介质类型对流动的影响, 发现流动系统的滑移长度与流体介质无关, 而与固液作用强度有直接关系.

截至目前, 亲水/疏水性对壁面滑移现象的影响规律还缺乏统一完整的认识^[14,18-19], 且驱动源强度

2012-09-07 收到第 1 稿, 2013-02-22 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金 (50835009, 51109178) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (20116102120009) 资助项目.

2) 胡海豹, 副教授, 主要研究方向: 水下特种减阻技术及微流动的数值仿真研究. E-mail: huhuibao@nwpu.edu.cn

对其影响规律也有待于探索. 为此, 论文采用非平衡分子动力学模拟方法, 开展了一系列不同润湿性纳米通道内库埃特流动的模拟研究.

1 分子动力学模拟细节

1.1 模拟系统

在分子动力学模拟时, 采用铂原子构造微通道壁面, 而液态氩作为通道内流体介质. 同时, 为提高计算效率, 本文在不影响物理模型本质的条件下, 采用二维分子动力学方法. 图 1 则为所建立的纳米通道内微流动系统示意图.

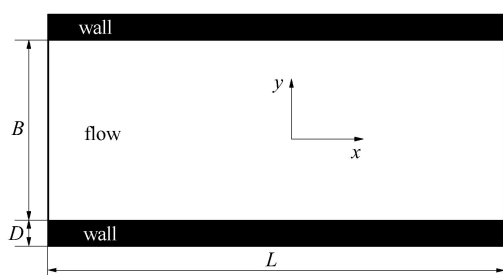


图 1 模拟系统示意图

Fig. 1 Schematic of simulation system

通道具体参数: 通道长度 $L = 17.26648$ nm, 宽度 $B = 6.27872$ nm, 壁厚 $D = 1.17726$ nm. 通道上下壁面均由 312 个铂原子按面心立方结构排列而成, 壁面原子厚度为 7 层, 晶格间距 $a = 0.39242$ nm. 通道中液氩的平衡温度为 85 K, 共包含 512 个氩原子. 通过在流动方向 (x 方向) 上应用周期性边界条件, 以实现模拟无限长通道内微流动.

1.2 数学模型

文中使用 LJ/126 势能模型来描述原子之间的相互作用, 其表达式如下

$$U = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], & r < r_c \\ 0, & r \geq r_c \end{cases} \quad (1)$$

式中, r 是相互作用两原子间的距离, r_c 是截断半径. ϵ 和 σ 是 LJ 势能的特征能量和特征长度. 对于氩原子之间的作用, $\epsilon_{\text{Ar}} = 0.01042$ eV, $\sigma_{\text{Ar}} = 0.3405$ nm; 对于铂原子之间的作用, $\epsilon_{\text{Pt}} = 0.52117$ eV, $\sigma_{\text{Pt}} = 0.25$ nm.

铂原子与氩原子之间的特征能量用来调整液氩与铂原子壁面之间的润湿性 (具体细节见 2.3 节), 而

其特征长度则由 Lorentz-Berthelot 混合法则获得

$$\sigma_{\text{ArPt}} = \frac{1}{2} (\sigma_{\text{Ar}} + \sigma_{\text{Pt}}) \quad (2)$$

氩原子的摩尔质量 $M_{\text{Ar}} = 39.948$ g/mol, 铂原子的摩尔质量 $M_{\text{Pt}} = 195.09$ g/mol, 截断半径 $r_c = 2.5\sigma_{\text{Ar}}$.

2.3 数值模拟步骤与算法

在模拟的初始时刻, 将所有铂原子的速度按照均匀分布设定为指定值, 然后在每一时间步上将所有铂原子的受力置零, 这样就实现了刚性壁面模型. 氩原子的初始位置按固体氩的晶格结构给出, 初始速度则以液体温度预期值为基础基于高斯分布规律给出. 模拟中, 壁面和流体原子位置和速度的更新, 均采用微正则系综.

模拟过程中, 采用速度定标法将流体的温度控制为预期值. 而速度定标法中计算温度时, 采用场基温控法 (profile-unbiased thermostat)^[20], 即通过减去空间速度场来去除流体宏观运动, 从而保证仅利用流体原子的热运动来计算温度.

模拟中, 纳米通道内流体分子运动满足牛顿运动方程

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} &= \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{a}_i \\ \mathbf{v}_i &= \mathbf{v}_i^0 + \mathbf{a}_i t \\ \mathbf{r}_i &= \mathbf{r}_i^0 + \mathbf{v}_i^0 t + \frac{1}{2} \mathbf{a}_i t^2 \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

该运动方程的求解采用文莱特算法

$$\left. \begin{aligned} x(t + \Delta t) &= 2x(t) - x(t - \Delta t) + (\Delta t)^2 \ddot{x}(t) \\ \dot{x}(t) &= \frac{x(t + \Delta t) - x(t - \Delta t)}{2\Delta t} + o(\Delta t)^2 \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

式中 Δt 为时间步长.

文中, 在获得流体的密度分布和速度分布时, 将整个微通道分为 658 层, 每层厚度 0.0132 nm. 待系统平衡后, 通过统计一定时间步数 (本文取 4×10^6 步) 内各层原子信息, 即可获得密度、速度等物理量.

固体表面润湿性是通过液滴在固体表面上的接触角来衡量. 通常认为, 接触角小于 90° 的固体表面具有亲水性, 接触角大于 90° 小于 150° 的固体表面具有疏水性, 接触角大于 150° 的固体表面具有超疏水性. 为反映通道壁面与流体之间不同的浸润性, 这里通过改变壁面铂原子和流体氩原子之间势能作用参数 ϵ_{PtAr} , 来调整壁面与流体之间的相互作用强度, 进而使壁面显示不同的亲/疏水性. 这也是前人

经常采用的方法^[14,15,21-22]. 这样液态氩和壁面之间的接触角 θ_{LJ} 可表示为^[23]

$$\cos \theta_{LJ} = 2 \frac{\varepsilon_{PtAr}}{\varepsilon_{ArAr}} - 1 \quad (5)$$

其中, θ_{LJ} 为液体在壁面上的接触角, ε_{PtAr} 为流体原子和固体原子之间势能作用参数, ε_{ArAr} 为流体原子之间的势能作用参数. 式中当余弦值大于 1 时, 认为接触角为 0° , 此时壁面显示超亲水性.

文中滑移速度和滑移长度的计算采用如下方法: 将流体的速度分布分为主流区和近壁面区; 通过拟合主流区的速度分布得到主流区速度分布的表达式 $v_x(y)$; 然后根据此表达式和壁面的位置, 就可得到主流区速度分布延伸至壁面处的虚拟速度 $v_{x|wall}$. 于是, 库埃特流动的滑移速度 $v_s = U - v_{x|wall}$ (U 为壁面速度); 而滑移长度 $L_s = v_s/\gamma$ (γ 为主流区速度剪切率).

3 模拟结果与讨论

3.1 壁面润湿性对流动的影响

本文分别模拟了上下壁面速度为 ± 300 m/s 下, 壁面接触角为 $30^\circ, 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ$ 及 150° 时的库埃特流动. 图 2 所示为不同壁面润湿性时, 库埃特流动的密度分布曲线. 其中, 横坐标表示到通道中心线的距离, 并用通道宽度 B 进行无量纲化处理, 而纵坐标为流体原子的数密度 (每平方纳米内的原子个数). 从图中可以看出, 通道内流体密度均呈现对称的衰减振荡分布规律, 近壁面区振幅最大, 然后逐渐过渡到密度恒定的主流区; 流体密度的振幅随壁面润湿性的降低而减小, 但密度振荡周期保持恒定.

图 3 所示是不同壁面润湿性时, 库埃特流动的速度分布. 其中, 横坐标表示到通道中心线的距离,

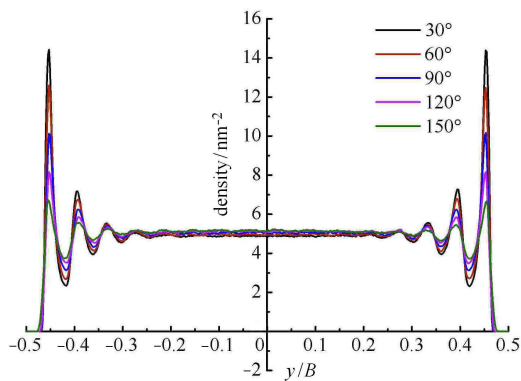


图 2 通道内库埃特流动的密度分布

Fig. 2 Density profiles of Couette flow at different contact angles

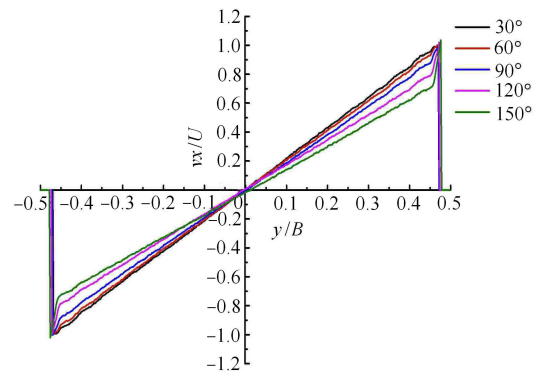


图 3 通道内库埃特流动的速度分布

Fig. 3 Velocity profiles of Couette flow at different contact angles

并用通道宽度 B 进行无量纲化处理, 而纵坐标 (v_x) 为流体 x 方向速度, 并以壁面速度 U 来无量纲化处理. 分析发现, 不同润湿性时, 壁面处流动均出现了不同程度的滑移现象, 亲水壁面时滑移速度为负, 而疏水壁面时滑移速度为正, 且滑移量随壁面润湿性的降低而增大.

表 1 为不同壁面润湿性时, 通道内主流区速度分布的拟合公式列表. 而式 (6) 则是依据两无限大平行平板间充分发展库埃特流动的解析解^[24], 推导出的该纳米通道内速度分布公式 (取流动方向上单位压降为 0). 对比二者可见, 壁面润湿性导致近壁面区流体速度分布异常 (出现速度滑移), 但在通道内主流区的速度分布仍呈现与宏观库埃特流动类似的线性分布规律; 通道内主流区速度线性分布的斜率, 随壁面润湿性的降低而逐渐降低 (接触角约 75° 时, 主流区的速度分布与宏观线性分布斜率相一致), 而滑移量则逐渐增大.

$$v_x = 0.09556y \quad (6)$$

为进一步说明壁面润湿性对滑移量的影响规律, 图 4 和图 5 分别给出了不同壁面润湿性时, 通道壁面处滑移速度和滑移长度的变化曲线. 从中可看出, 在

表 1 通道内主流区速度分布拟合方程

Table 1 Fitting equations of velocity profiles in central part of channel

$\theta_{LJ}/(^\circ)$	Fitting equations
30	$v_x = 0.101600y + 0.009, R^2 = 0.999$
60	$v_x = 0.098267y + 0.003, R^2 = 1.000$
75	$v_x = 0.095000x + 0.000, R^2 = 1.000$
90	$v_x = 0.092267y - 0.003, R^2 = 0.999$
120	$v_x = 0.082533y + 0.009, R^2 = 0.999$
150	$v_x = 0.075200y - 0.039, R^2 = 0.999$

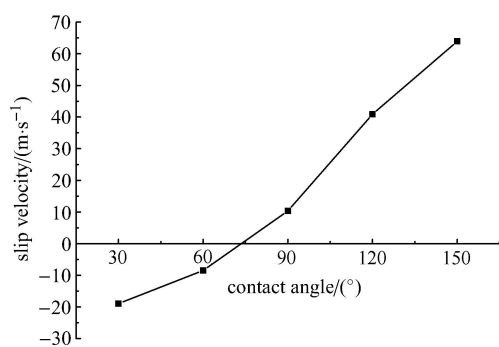


图 4 滑移速度随润湿性的变化规律

Fig. 4 Slip velocity at different contact angles

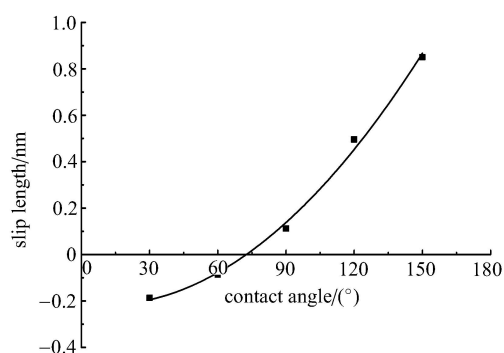


图 5 滑移长度随润湿性的变化规律, 图中实线为对数据点的抛物线拟合

Fig. 5 Slip length at different contact angles, the solid line is the parabolic curve fitting of the data

润湿性由亲水性逐渐变为疏水性时, 壁面滑移速度和滑移长度均由负值变为 0, 再变为正值, 而对应的边界条件也由负滑移变为无滑移, 再到正滑移。

当然, 这里的滑移速度和滑移长度为负值, 并不意味着流体出现逆向流动 (从图 3 速度分布曲线可以看出)。这是由于当壁面亲水时, 固液相互作用非常强, 以至于在最靠近壁面处的流体原子被壁面原子的势阱完全“俘获”, 而呈现出类似壁面的固体晶格结构排列^[15]; 当壁面以一定速度运动时, 这些被“俘获”的流体原子就会在壁面附近形成追随壁面的液体原子近似同步层; 且随壁面亲水性增强, 该同步层逐步增厚 (等同于“壁面上移”)。该现象与“正滑移”时所表征的“壁面下移”效果正好相反。因此, 按照滑移速度和滑移长度的计算方法, 所得的滑移量就为负值, 且负滑移值大, 仅表示“壁面上移”多。为直观说明负滑移含义, 图 6 又给出了正、负滑移速度时通道内流速分布示意图, 图中 U 为壁面速度, $v_{x|_{wall}^+}$, $v_{x|_{wall}^-}$ 分别为产生正、负滑移时主流区速度分布延伸至壁面处的虚拟速度, 滑移速度 $v_s = U - v_{x|_{wall}^-}$ 。

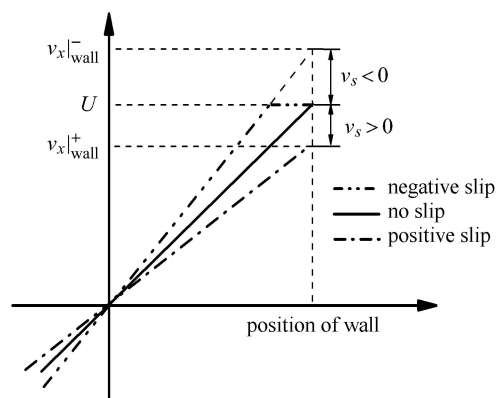


图 6 正、负滑移量示意图

Fig. 6 Schematic of positive/negative slip

另外, 随着壁面亲水性的减弱, 流动系统的滑移量逐渐增加最终变为正值 (见图 4 和图 5), 这也侧面说明将滑移量推广至负值范围不仅物理意义明确, 而且在正、负区间之间满足计算结果的连续性。

此外, 在 2008 年, Huang 等^[25]利用分子动力学模拟了 3 种通道表面上 (单层硅烷修饰表面、类金刚石表面和 Lennard-Jones 模型表面) 上液态水的 Couette 流动, 他们的研究表明在不同类型的表面上滑移长度与壁面静态接触角之间的函数关系都可以用公式 $b(\theta_c) \propto (\cos \theta_c + 1)^{-2}$ 来近似表示, 其中 b 为滑移长度, θ_c 为通道表面的静态接触角。但是对本文图 5 中数据点做抛物线拟合后的结果为

$$L_s = 0.1807\theta_{LJ}^2 - 0.0606\theta_{LJ} - 0.2129 \quad (7)$$

其中, θ_{LJ} 的单位为弧度, L_s 的单位仍为 nm, 公式拟合后的 $R^2 = 0.9961$ 。由此可见, 对于类似于液态氩的 LJ 流体在光滑通道内流动的滑移长度应当是以二次函数的方式依赖于壁面接触角, 而非 Huang 等提出的理论。

3.2 壁面速度对流动的影响

本文还研究了通道壁面呈疏水性时, 壁面速度对库埃特流动的速度、密度分布及滑移量的影响规律。模拟中, 取壁面接触角为 120° , 下壁面始终保持静止, 上壁面速度则从 300 m/s 逐渐增大到 3 km/s。这里的上壁面速度似乎过高了 ($U > 1$ km/s), 但是研究这样大范围速度内的流动可以得到更具一般性的结论, 所以在利用分子动力学模拟研究驱动强度 (如本文中的壁面速度) 对微流动的影响时, 研究者经常会设置类似大范围的速度变化^[16,26-27]。图 7 所示为不同壁面速度时通道内速度分布曲线。其中, 横坐标表

示与通道中心线的距离，并用通道宽度 B 无量纲化处理，纵坐标 (v_x) 为 x 方向流体速度，并以上壁面速度 U 来无量纲化处理。从中可以看出，随壁面速度的增加，流体流动依次呈现近似线性流、非线性流和过剪切流 3 种状态。图 8 所示为 3 种流动类型对应的流体密度分布曲线。该流动特点也与 Xin 等^[27]在两亲水铜板间微流动模拟中发现的规律相一致。

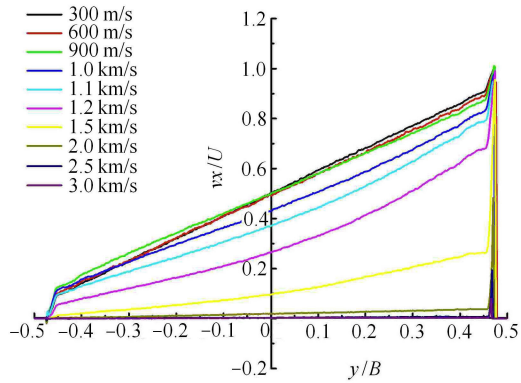


图 7 不同壁面速度时通道内速度分布曲线

Fig. 7 Velocity profiles of Couette flow at different wall speeds

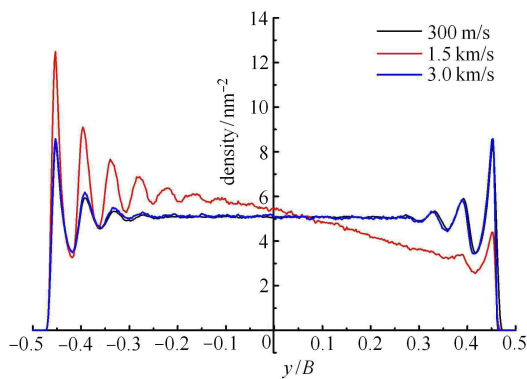


图 8 不同流动形态时流体密度分布曲线

Fig. 8 Density profiles at different flow styles

图 9 ~ 图 11 所示为不同壁面驱动速度时，滑移速度、主流区速度剪切率和滑移长度变化情况。从中可以发现：

(1) 3 种流动类型下，流体流动的滑移速度均随壁面速度增加而增大，尤其是当流体的流动类型转入非线性流动后，滑移速度随壁面速度的增加而迅速增加；

(2) 随上壁面驱动速度的增大，通道内主流区速度剪切率呈现先增大而后逐步降低的趋势，且在驱动速度约 1.3 km/s 时，斜率达到最大，约 0.3 ps⁻¹；

(3) 滑移长度随壁面驱动速度的变化分 3 阶段：当流动类型为线性时，滑移长度随上壁面驱动速度

近似线性增大；当流动类型转为非线性时，滑移长度表现为先减后增；而当流动类型转入过剪切时，滑移长度则又迅速增加。这一规律与 Troian 等^[11]所得结果在变化趋势上是一致的。但是在流动转入过剪切后，由于本文的壁面速度较 Troian 等论文中的算例大的多，因此导致此时的滑移长度在量值上比 Troian 等论文中的结果大一个数量级。

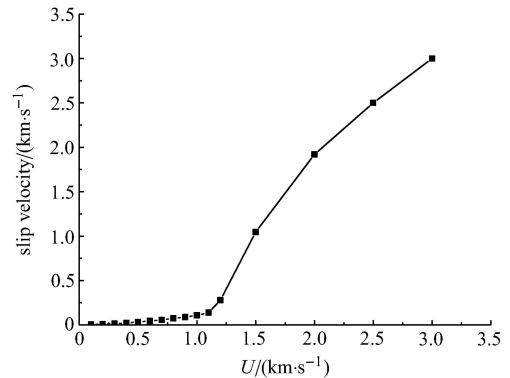


图 9 不同壁面速度时通道内滑移速度变化曲线

Fig. 9 Slip velocity of Couette flow at different wall speeds

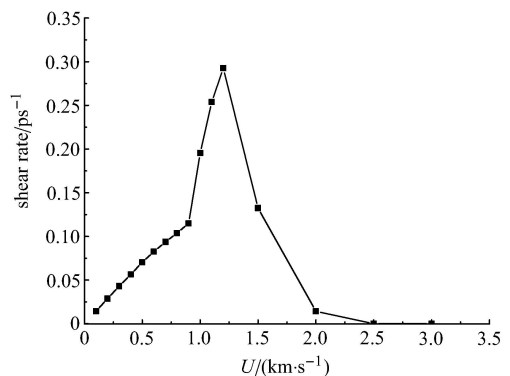


图 10 不同壁面速度时主流区速度剪切率变化曲线

Fig. 10 Share rates of Couette flow at different wall speeds

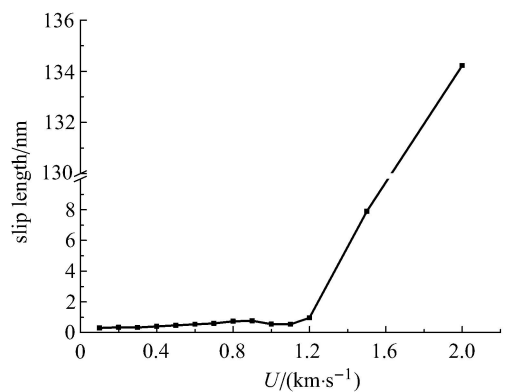


图 11 不同壁面速度时通道内滑移长度变化曲线

Fig. 11 Slip length of Couette flow at different wall speeds

3.3 超疏水纳米通道内流动模拟

为探索壁面呈超疏水性时纳米通道内滑移流动特性, 本文又研究了壁面接触角为 110° , 120° , 130° , 140° , 145° , 150° , 152° , 154° , 156° , 158° , 160° , 162° , 164° , 166° , 168° , 170° , 172° , 174° , 176° 和 178° 时, 库埃特流动的滑移速度和滑移长度. 模拟中, 上下壁面速度始终保持 ± 300 m/s.

图 12 为滑移速度随接触角的变化规律, 图 13 则为滑移长度随接触角的变化规律. 从两图中发现, 通道壁面处的滑移速度和滑移长度均在壁面接触角约为 150° 时取得最大值; 在壁面接触角小于 150° 时, 滑移速度和滑移长度随接触角的增大而增大; 当壁面接触角大于 150° 时, 滑移速度和滑移长度却呈现出随接触角的增大而减小的反常现象.

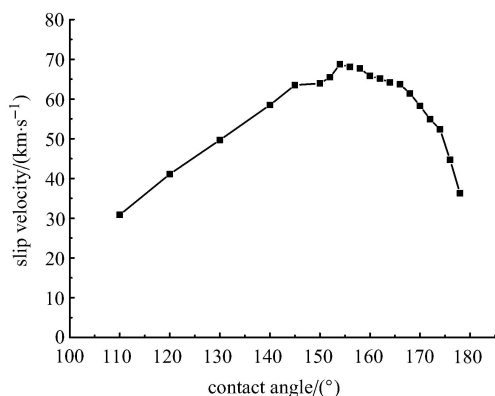


图 12 滑移速度随壁面接触角的变化规律

Fig. 12 Slip velocity of Couette flow at different contact angles

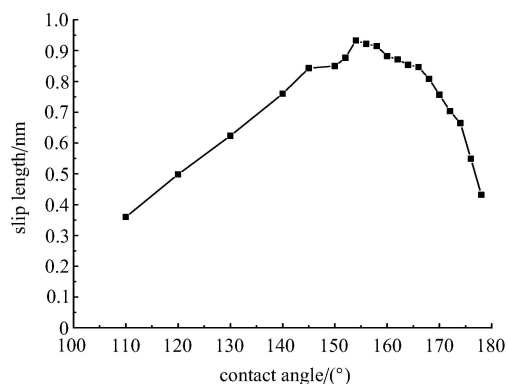


图 13 滑移长度随壁面接触角的变化规律

Fig. 13 Slip length of Couette flow at different contact angles

上述反常现象违背了前述 3.1 节中壁面润湿性对流动的影响规律, 也与相关试验报道结论不符^[4-5,7]. 由壁面疏水性概念可知, 壁面疏水性越好, 壁面的接触角越大, 滚动角也越小, 流体在壁面上越

容易流动, 所以壁面疏水性越好, 流动系统的滑移速度和滑移长度就应越大.

为证实该反常问题, 作者又对所有模拟工作进行了重复, 排除了数值计算错误的可能.

最终论文发现该反常现象产生的原因在于: 本文模拟中, 通过改变壁面与流体之间的势能参数 $\varepsilon_{\text{PtAr}}$ 来调控壁面的表面能, 进而改变壁面润湿性, 即采用式 (5) 来设置不同壁面接触角.

基于界面物理理论, 光滑固体表面接触角可由杨氏方程^[28]来计算

$$\cos \theta = \frac{\sigma_{\text{sg}} - \sigma_{\text{sl}}}{\sigma_{\text{lg}}} \quad (8)$$

式中, σ_{sg} , σ_{sl} 和 σ_{lg} 分别是固气, 固液和液气界面的界面张力.

由方程 (7) 可知, 固体表面能越低其表面的接触角就越大, 如图 14 所示. 该曲线清楚显示, 利用降低表面能的方法来构造具有超疏水性的固体表面, 就必须使固体的表面能降得非常低, 甚至接近 0. 而事实上自然界根本不存在如此低表面能的物质, 所以仅通过降低表面能无法使壁面具有超疏水性. 可见, 要准确研究超疏水通道壁面上的滑移特性, 就需要同时考虑其表面能和表面结构的影响.

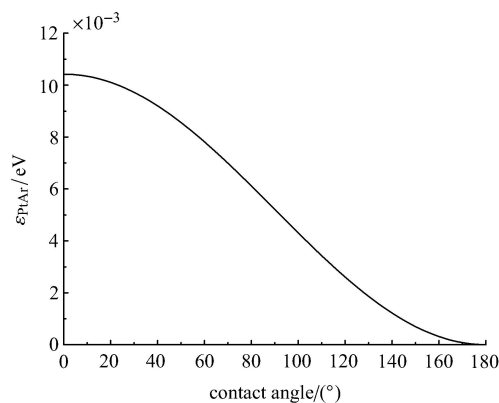


图 14 壁面接触角与势能参数 $\varepsilon_{\text{PtAr}}$ 的关系

Fig. 14 Relationship between contact angle and potential energy parameter

4 结 论

(1) 随壁面润湿性的变化, 纳米通道内流体密度呈对称的衰减振荡分布, 且振荡幅度随壁面润湿性降低而减小.

(2) 滑移量随壁面润湿性的提高而降低, 甚至在亲水壁面时出现负滑移现象.

(3) 随壁面驱动速度的提高, 通道内流动依次呈现线性、非线性及过剪切 3 种流动类型。

(4) 随壁面速度的增加滑移速度逐渐增大, 且在流体呈现非线性流动阶段滑移速度增大迅速。

(5) 仅采用改变壁面与流体之间势能参数来表征壁面润湿性的方法, 不能准确表征超疏水壁面对流动的影响。

参 考 文 献

- 1 蒋雄, 乔生儒, 张程煜等. 疏水表面及其减阻研究. 化学进展, 2008, 20(4): 450-456 (Jiang Xiong, Qiao Shengru, Zhang Chenyu, et al. Hydrophobic surface and its application to drag reduction. *Progress in Chemistry*, 2008, 20(4): 450-456 (in Chinese))
- 2 Luo Zhuangzhu, Zhang Zhaozhu, Hu Litian, et al. Stable bionic superhydrophobic coating surface fabricated by a conventional curing process. *Advanced Materials*, 2008, 14(20): 970-974
- 3 余永生, 魏庆鼎. 疏水性材料减阻特性实验研究. 流体力学实验与测量, 2005, 19(2): 60-66 (Yu Yongsheng, Wei Qingding. Experiments on the drag-reduction of non-wetting materials. *Experiments and Measurements in Fluid Mechanics*, 2005, 19(2): 60-66 (in Chinese))
- 4 霍素斌, 于志家, 李艳峰等. 超疏水表面微通道内水的流动特性. 化工学报, 2007, 58(11): 2721-2726 (Huo Subin, Yu Zhijia, Li Yanfeng, et al. Flow characteristics of water in microchannel with super-hydrophobic surface. *Journal of Chemical Industry and Engineering*, 2007, 58(11): 2721-2726 (in Chinese))
- 5 Ou J, Perot B, Rothstein JP. Laminar drag reduction in microchannels using ultrahydrophobic surfaces. *Physics of Fluids*, 2004, 16: 4635
- 6 Choi CH, Kim CJ. Large slip of aqueous liquid flow over a nanoengineered superhydrophobic surface. *Physical Review Letters*, 2006, 96(6): 066001
- 7 卢思, 姚朝晖, 郝鹏飞等. 具有微纳结构超疏水表面的槽道减阻特性研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2010, 40(7): 916-924 (Lu Si, Yao Zhaohui, Hao Pengfei, et al. Investigation of drag reduction of superhydrophobic surface with micro-nanostructure. *Scientia Sinica Phys, Mech & Astron*, 2010, 40(7): 916-924 (in Chinese))
- 8 Lauga E, Stone HA. Effective slip in pressure-driven Stokes flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 2003, 489: 55-77
- 9 吕田, 陈晓玲. 超疏水性圆管湍流减阻的数值模拟. 上海交通大学学报, 2009, 43(8): 1280-1283 (Lü Tian, Chen Xiaoling. Numerical simulation of drag reduction of circular pipe with superhydrophobic wall in turbulent flow. *Journal of Shanghai Jiaotong University*, 2009, 43(8): 1280-1283 (in Chinese))
- 10 Thompson PA, Robbins MO. Shear flow near solids: epitaxial order and flow boundary conditions. *Physical Review A*, 1990, 41: 6830
- 11 Thompson PA, Troian SM. A general boundary condition for liquid flow at solid surfaces. *Nature*, 1997, 389: 360
- 12 Priezjev NV, Troian SM. Molecular origin and dynamic behavior of slip in sheared polymer films. *Physical Review Letters*, 2004, 92: 018302.
- 13 Soong CY, Yen TH, Tzeng PY. Molecular dynamics simulation of nanochannel flows with effects of wall lattice-fluid interactions. *Physical Review E*, 2007, 76: 036303
- 14 曹炳阳, 陈民, 过增元. 纳米通道滑移流动的分子动力学研究. 工程热物理学报, 2003, 24(4): 670-672 (Cao Bingyang, Chen Min, Guo Zengyuan. Molecular dynamics study of slip flow in nanochannel. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2003, 24(4): 670-672 (in Chinese))
- 15 曹炳阳, 陈民, 过增元. 纳米通道内液体流动的滑移现象. 物理学报, 2006, 10(55): 5305-5310 (Cao Bingyang, Chenmin, Guo Zengyuan. Velocity slip of liquid flow in nanochannels. *Acta Physica Sinica*, 2006, 10(55): 5305-5310 (in Chinese))
- 16 Voronov RS, Dimitrios VP, Lloyd LL. Slip length and contact angle over hydrophobic surfaces. *Chemical Physics Letters*, 2007, 441: 273-276
- 17 Cieplak M, Koplik J, Jayanth RB. Boundary conditions at a fluid-solid interface. *Physical Review Letters*, 2001, 86(5): 803-806
- 18 Gogte S, Vorobieff P, Truesdell R, et al. Effective slip on textured superhydrophobic surfaces. *Physics of Fluids*, 2005, 17: 051701
- 19 Ellis JS, McHale G, Hayward GL, et al. Contact angle-based predictive model for slip at the solid-liquid interface of a transverse-shear mode acoustic wave device. *Applied Physics Letters*, 2003, 94: 6201
- 20 Evans DJ, Morriss GP. Shear thickening and turbulence in simple fluids. *Physical Review Letters*, 1986, 56: 2172
- 21 向恒, 姜培学, 刘其鑫等. 纳米通道内液体流动的分子动力学研究. 工程热物理学报, 2008, 29(9): 1557-1560 (Xiang Heng, Jiang Peixue, Liu Qixin, et al. Molecular dynamics investigation of fluid flow in nanochannels. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2008, 29(9): 1557-1560 (in Chinese))
- 22 Voronov RS, Dimitrios VP, Lloyd LL. Boundary slip and wetting properties of interfaces: Correlation of the contact angle with the slip length. *Journal of Chemical Physics*, 2006, 124: 204701
- 23 De Gennes PG. Wetting: Statics and dynamics. *Reviews of Modern Physics*, 1985, 57 (3): 827-863
- 24 卡尼亚达克斯, 柏斯克克. 微流动 - 基础与模拟. 北京: 化学工业出版社, 2005 (Karniadakis GE, Beskok A. *Micro Flows Fundamentals and Simulation*. Beijing: Chemical Industry Press, 2005 (in Chinese))
- 25 Huang DM, Sendner C, Horinek D, et al. Water slippage versus contact angle: A quasiuniversal relationship. *Physical Review Letters*, 2008, 101: 226101
- 26 Ma MD, Shen LM, Sheridan J, et al. Friction of water slipping in carbon nanotubes. *Physical Review E*, 2011, 83: 036316
- 27 Xin Y, Lucy TZ. Investigating liquid-solid interfacial phenomena in a Couette flow at nanoscale. *Physical Review E*, 2010, 82: 056313
- 28 Young T. An essay on the cohesion of fluids. *Phil Trans R Soc Lond*, 1805, 95: 65-87

SIMULATION OF THE LIQUID COUETTE FLOW IN A NANO-CHANNEL WITH DIFFERENT WETTABILITY¹⁾

Hu Haibao²⁾ Bao Luyao Huang Suhe

(College of Marine, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract The relation between characteristics of solid surfaces and properties of destiny, velocity and slip in a nanochannel with different wettabilities is explored, using molecular dynamics simulation (MDS). In these simulations, the liquid Couette flow confined between two infinite parallel planar walls is considered, and statistical ensemble is set as NVT, and the interaction between atoms is calculated using Lennard-Jones potential energy function. The hydrophobic wall which is set to rigid surface is characterized by the low solid-liquid relative energy parameter. For all simulations, velocity-rescale method is used to keep the temperature constant and the Verlet algorithm is used to solve the Newton equations. Some conclusions are presented from the simulation results in this paper. Firstly, fluid density profiles which are adjacent to solid surfaces oscillate around the value of major fluid density, and the extents of oscillation decay, the periods of oscillation remain unchanged with the hydrophobicity increase of the solid surface. Secondly, greater hydrophobic walls lead to larger slip velocity, and the hydrophilic surface even leads to negative slip. Thirdly, slip velocity increases with the accretion of velocity of the solid surface in Couette flow, and accretion of slip velocity is accelerated greatly when the flow is in layer regime. Besides, we also find the superhydrophobic walls generate smaller slippage than hydrophobic walls, which varies from the common conception, and we explain this result basing Young's equation.

Key words wettability, Couette flow, molecular dynamics, slip velocity, Young's equation

Received 7 September 2012, revised 22 February 2013.

1) The project was supported by the National Natural Science Foundation of China (50835009, 51109178) and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (20116102120009).

2) Hu haibao, associate professor, research interests: special drag reduction under water and numerical simulation of microfluidics.

E-mail: huhaibao@nwpu.edu.cn