

УДК 532.5.013

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ ТЕЧЕНИЯ ПУАЗЕЙЛЯ НАНОЖИДКОСТИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Н. Размара

Азербайджанский университет Шахида Мадани, Тебриз, Иран

E-mail: N.razmara@azaruniv.edu

С использованием метода молекулярной динамики путем статистического анализа исследуется микроскопическая структура наножидкостей в случае течения Пуазейля в наноканале. Установлено, что при течении наножидкости в наноканале наблюдается эффект кластеризации. Кластер перемещается вдоль средней линии наноканала, где скорость течения Пуазейля максимальна. Сделано предположение, что кластеризация наночастиц происходит вследствие наличия силы притяжения.

**Ключевые слова:** кластеризация, молекулярная динамика, наножидкость, наноканал, течение Пуазейля.

DOI: 10.15372/PMTF20150517

**Введение.** Интерес к исследованию наночастиц обусловлен их применением во многих сферах производства (катализаторы, электроника, фармацевтическая, косметическая, текстильная промышленность). Поскольку экспериментальное исследование течений наночастиц в наноканалах является дорогостоящим и трудоемким, разрабатываются теоретические и численные модели, описывающие поведение различных наножидкостей.

Во многих экспериментах установлено, что теплопроводность, вязкость и коэффициент тепловой конвекции наножидкостей больше, чем у обычных жидкостей. Тем не менее степень увеличения соответствующих коэффициентов переноса не всегда описывается классической теорией эффективной среды. Имеющиеся данные о теплопроводности наножидкостей существенно различаются. Вследствие отсутствия систематических экспериментальных данных исследование процессов, происходящих в наножидкостях, существенно затруднено. Большинство теоретических моделей, описывающих эти процессы, включает некоторые эмпирические константы. Корректируя значения этих констант, можно достаточно точно предсказать результаты эксперимента. Тем не менее в настоящее время теоретической модели наножидкостей, учитывающей все параметры, не существует. Поведение и пространственная структура жидкостей на наноразмерном уровне существенно отличаются от их поведения и структуры на макроразмерном уровне.

Метод молекулярной динамики (ММД) используется при моделировании и исследовании поведения наножидкостей в наноразмерных каналах. Данный метод, являющийся детерминистическим, заключается в вычислении траекторий движения атомов путем численного решения уравнений движения Ньютона с использованием конкретного межатомного потенциала взаимодействия при заданных начальных и граничных условиях [1–6].

В работе [6] с помощью равновесного ММД исследовано формирование слоя атомов на поверхности раздела жидкость — твердое тело в наножидкости. Показано, что на поверхности раздела между наночастицей и жидкостью формируется абсорбируемый слой скольжения жидкости. В результате анализа распределения плотности жидкости вблизи наночастицы в [6] установлено, что при используемых параметрах толщина слоя составляет приблизительно 0,5 нм. Рассматриваемая наножидкость состояла из жидкого аргона и распределенных в нем твердых наночастиц меди. Межатомный потенциал для обоих веществ описывался известным потенциалом Леннарда-Джонса. В [6] при моделировании характеристик течения наножидкости отсутствовали твердые границы.

В работе [7] с использованием кинетической теории, основанной на анализе теплового потока в наножидкостях, показано, что гидродинамические эффекты, обусловленные броуновским движением, оказывают незначительное влияние на теплопроводность наножидкости. Этот вывод был сделан на основе результатов моделирования с помощью ММД теплового потока наножидкости с равномерно распределенными частицами. В модели восемь наночастиц и атомы жидкости были распределены в кубическом объеме с периодическими условиями на его границах. В течение всего времени расчета частицы перемещались беспорядочно, не образуя кластерные структуры. Анализ полученных результатов позволил сделать вывод, что некоторые процессы, такие как кластерообразование частиц, приводят к существенному увеличению теплопроводности.

В [8] с использованием ММД для моделей многоатомных жидкостей и более грубых моделей Леннарда-Джонса одноатомных жидкостей рассмотрен процесс теплообмена вблизи сильно нагретых наночастиц. С помощью моделей для частиц золота, распределенных в октане или воде, изучены различные типы молекулярных взаимодействий. Моделируемая система представляла собой кубический объем с единственной наночастицей золота в середине сферы с периодическими граничными условиями. Установлено, что простая модель, основанная на потенциале взаимодействия Леннарда-Джонса, описывает результаты экспериментов.

В работе [9] методом молекулярной динамики моделировалось сдвиговое течение наножидкости между плоскими пластинами. Наножидкость состояла из 12 сферических наночастиц меди и атомов аргона в качестве основной жидкости. Для описания взаимодействия атомов использовался потенциал Леннарда-Джонса. Получены траектории движения наночастиц, а также проведен анализ поведения течения наножидкости, находящейся между плоскими пластинами, в различные моменты времени. Результаты исследования показывают, что вокруг каждой наночастицы имеется абсорбируемый слой атомов аргона, оказывающий незначительное влияние на движение наночастиц, но существенно влияющий на процесс теплопереноса в наножидкостях. При сдвиговом течении помимо основного течения жидкого аргона наблюдались вибрация и вращение наночастиц.

В [10] методом молекулярной динамики исследованы соударение частиц и трение в системе Cu–Ag, состоящей из двух медных пластин и наножидкости. Модель наножидкости Cu–Ag состояла из восьми сферических наночастиц меди и атомов аргона в качестве основной жидкости. Для описания взаимодействия атомов использовался потенциал Леннарда-Джонса. Получены траектории движения наночастиц в различные моменты времени, проведен анализ процессов соударения и трения наночастиц. В процессе трения наночастицы совершали вращательное движение, но при сжатии взаимодействие наночастиц приводило к замедлению их вращения. При этом наблюдалось скопление наночастиц, размеры которого увеличивались с увеличением давления. Соединенные наночастицы могут обеспечить стабильную скорость течения во всем канале и в то же время уменьшить площадь контакта двух поверхностей трения, а следовательно, уменьшить трение. При большом положительном давлении и высокой скорости наночастиц в середине наноканала при наличии энергии сильного взаимодействия происходит скопление наночастиц.

Параметры потенциала Леннарда-Джонса

Компонент наножидкости	$\sigma$ , нм	$\varepsilon \cdot 10^{21}$ , Дж	$m \cdot 10^{26}$ , кг
Аргон	0,3405	1,6539	6,69
Медь	0,2338	65,5815	10,64

В данной работе приведены результаты исследования течений Пуазейля некоторых наножидкостей методом молекулярной динамики.

**1. Математическая модель.** Методом молекулярной динамики проведен расчет течения Пуазейля для наножидкости, включающей четыре наночастицы, погруженные в основную жидкость. Уравнение Ньютона для каждой молекулы жидкости записывается в виде

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_{ij}}{dt^2} = \sum_{j \neq i, j=1}^N \mathbf{F}_{ij} + \sum_{j_w \neq i, j=1}^{N_w} \mathbf{F}_{ijw} + \mathbf{F}_{ext}, \quad (1)$$

где нижний индекс  $i$  соответствует  $i$ -й частице;  $\mathbf{F}_{ext}$  — внешняя сила, действующая на молекулу. Первый член в правой части уравнения (1) представляет собой молекулярную силу любого типа, действующую на  $i$ -ю частицу со стороны других частиц жидкости в расчетной области, второй член — молекулярную силу между  $i$ -й частицей и твердой стенкой или наночастицами, последний член — внешнюю силу, которая вызывает отклонение жидкости от состояния равновесия (пристенная сила сдвига, сила тяжести, электрическая сила и т. д.).

При использовании модели потенциала для двух тел уравнение Ньютона принимает вид

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_{ij}}{dt^2} = \sum_{j \neq i} \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}_{ij})}{\partial \mathbf{r}_{ij}} + \mathbf{F}_{ext},$$

где  $\varphi(\mathbf{r}_{ij})$  — потенциальная функция взаимодействия  $i$ -й и  $j$ -й частиц.

В настоящее время в большинстве классических моделей приняты эмпирические или полуэмпирические корреляции движения частиц [11, 12]. Потенциал Леннарда-Джонса, являющийся моделью взаимодействия двух тел, имеет вид

$$\varphi(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]. \quad (2)$$

Здесь  $r_{ij}$  — расстояние между  $i$ -м и  $j$ -м атомами;  $\varepsilon$  — энергия связи;  $\sigma$  — диаметр молекулы (расстояние, на котором потенциал взаимодействия равен нулю). Величины  $\varepsilon$  и  $\sigma$  зависят от типа молекул. В модели Леннарда-Джонса учитываются также короткодействующие силы отталкивания при сближении и силы притяжения на большом расстоянии. Значения параметров потенциала Леннарда-Джонса для аргона и меди приведены в таблице [1].

Параметры наножидкости Cu–Ag вычислены в соответствии с законом смешения Лоренца — Берглола [2]:

$$\sigma_{\text{Cu-Ar}} = \frac{\sigma_{\text{Cu}} + \sigma_{\text{Ar}}}{2}, \quad \varepsilon_{\text{Cu-Ar}} = \sqrt{\varepsilon_{\text{Cu}} \varepsilon_{\text{Ar}}}.$$

Безразмерные физические величины используются для удобства масштабирования схемы. В данной работе для обезразмеривания физических величин используются следующие параметры:  $\sigma$  — диаметр молекулы, м;  $\varepsilon$  — энергия, Дж;  $m$  — масса, кг;  $\sigma(m/\varepsilon)^{1/2}$  —

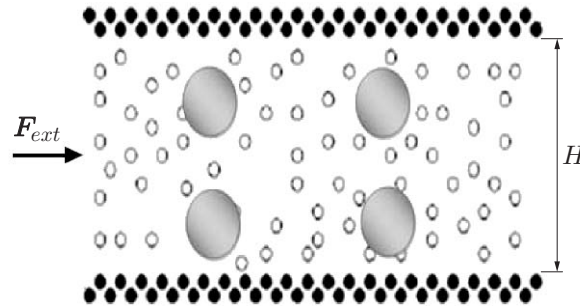


Рис. 1. Схема течения Пуазейля наножидкости в наноканале

время, с;  $\rho\sigma^3$  — плотность, кг/м<sup>3</sup>;  $(m/\varepsilon)^{1/2}$  — скорость, м/с;  $\varepsilon/\sigma^2$  — сила, Н;  $\varepsilon/k_B$  — температура, К ( $k_B$  — постоянная Больцмана).

В расчетах было выбрано расстояние обрезки  $r_c = 3\sigma$ . Потенциал Леннарда-Джонса изменен таким образом, чтобы и энергия, и сила были равны нулю на этом расстоянии. Все атомы находятся в гранецентрической кубической (ГЦК) решетке, а твердые наночастицы представляют собой сферы, вырезанные из ГЦК-решетки атомов. При моделировании твердых частиц меди полагалось, что массы атомов, формирующих наночастицы, в 1,590 53 раза больше массы атома жидкости.

Схема течения Пуазейля приведена на рис. 1.

В данной работе при моделировании методом молекулярной динамики используется общедоступное программное обеспечение [13]. Длина ребер расчетной области равна  $L_x = 30\sigma$ ,  $L_y = 24\sigma$ ,  $L_z = 8\sigma$ .

В предлагаемой модели четыре сферические наночастицы меди распределены в аргоне — основной жидкости, включающей 3419 атомов. В наночастицах содержится 361 атом, что соответствует диаметру наночастицы  $r_{np} = 3\sigma$ , общее количество атомов в модели равно 5220. В качестве основной жидкости выбран жидкий аргон, поскольку он является стабильным и взаимодействие его атомов описывается простой потенциальной функцией [11].

Две неподвижные медные стенки расположены в плоскости  $(x, y)$ , расстояние между ними равно  $18\sigma$ . В направлении течения заданы периодические граничные условия. Наножидкость течет в направлении  $y$  вследствие наличия внешней силы, приложенной к системе.

Для моделирования наножидкости методом молекулярной динамики выбран канонический ансамбль NVT, температура системы, которой управляет термостат Ноуза — Хувера [1], принята равной  $T = 0,71$ .

В начале расчета ориентация каждой частицы является случайной, начальная скорость каждой частицы выбирается случайным образом из распределения Максвелла — Больцмана [1].

Перед началом расчета течения Пуазейля система была уравновешена при постоянных объеме и температуре. Временной шаг интегрирования уравнений движения составлял  $0,001\tau$  ( $\tau$  — характерное время), во всех расчетах применялся алгоритм интегрирования Verlet [1]. Для моделирования макроскопических данных использовалось 2 000 000 временных шагов.

Моделируемая наножидкость, в которой атомы находятся в относительно равновесном положении, после релаксации показана на рис. 2.

После релаксации ко всем частицам течения прикладывается сила  $F_{ext} = 0,036$  в направлении течения вдоль оси  $y$ .

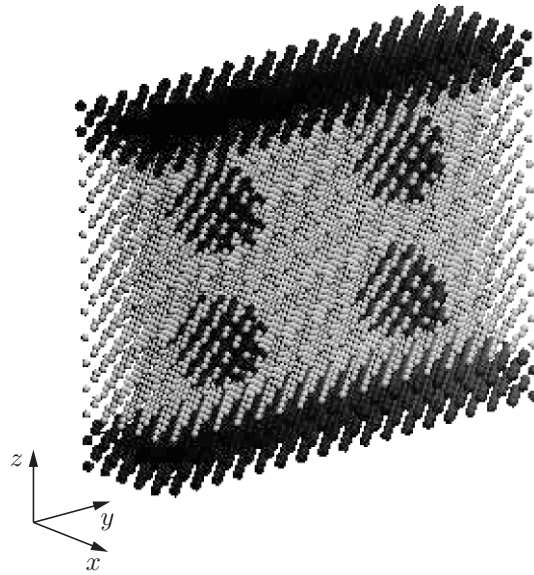


Рис. 2. Положения атомов наножидкости, включающей четыре кристаллические наночастицы, погруженные в жидкость в наноканале

**2. Результаты исследования и их обсуждение.** Сходимость результатов проведенного моделирования для течения Пуазейля определяется сходимостью энергии системы (рис. 3). На рис. 3 по оси абсцисс отложено количество шагов интегрирования  $N$ , по оси ординат — энтальпия  $h$ . Видно, что энтальпия системы сначала увеличивается, затем уменьшается, после чего становится практически постоянной. Время полного установления энергии составляет приблизительно 500 000 временных шагов ММД. Для обеспечения относительно устойчивого положения микроструктур наножидкостей общее количество временных шагов увеличивалось до 2 000 000.

На рис. 4 показано распределение скорости течения Пуазейля в наноканале.

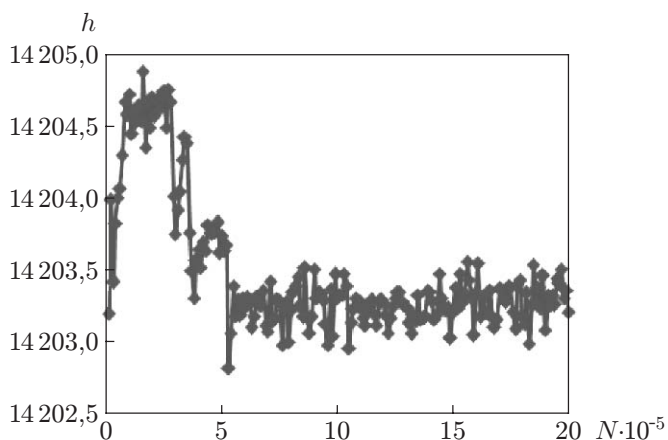


Рис. 3

Рис. 3. Сходимость энтальпии системы

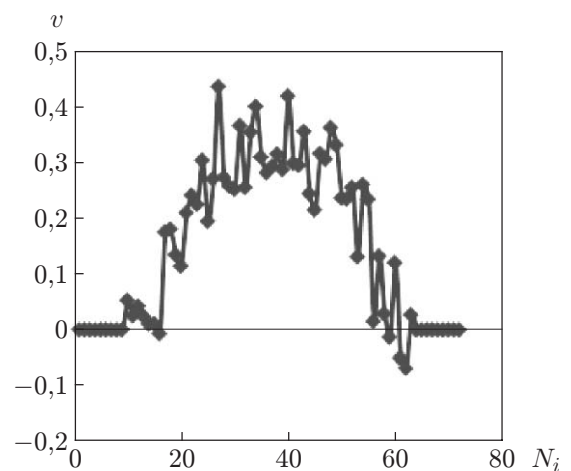


Рис. 4

Рис. 4. Распределение скорости течения Пуазейля наножидкости



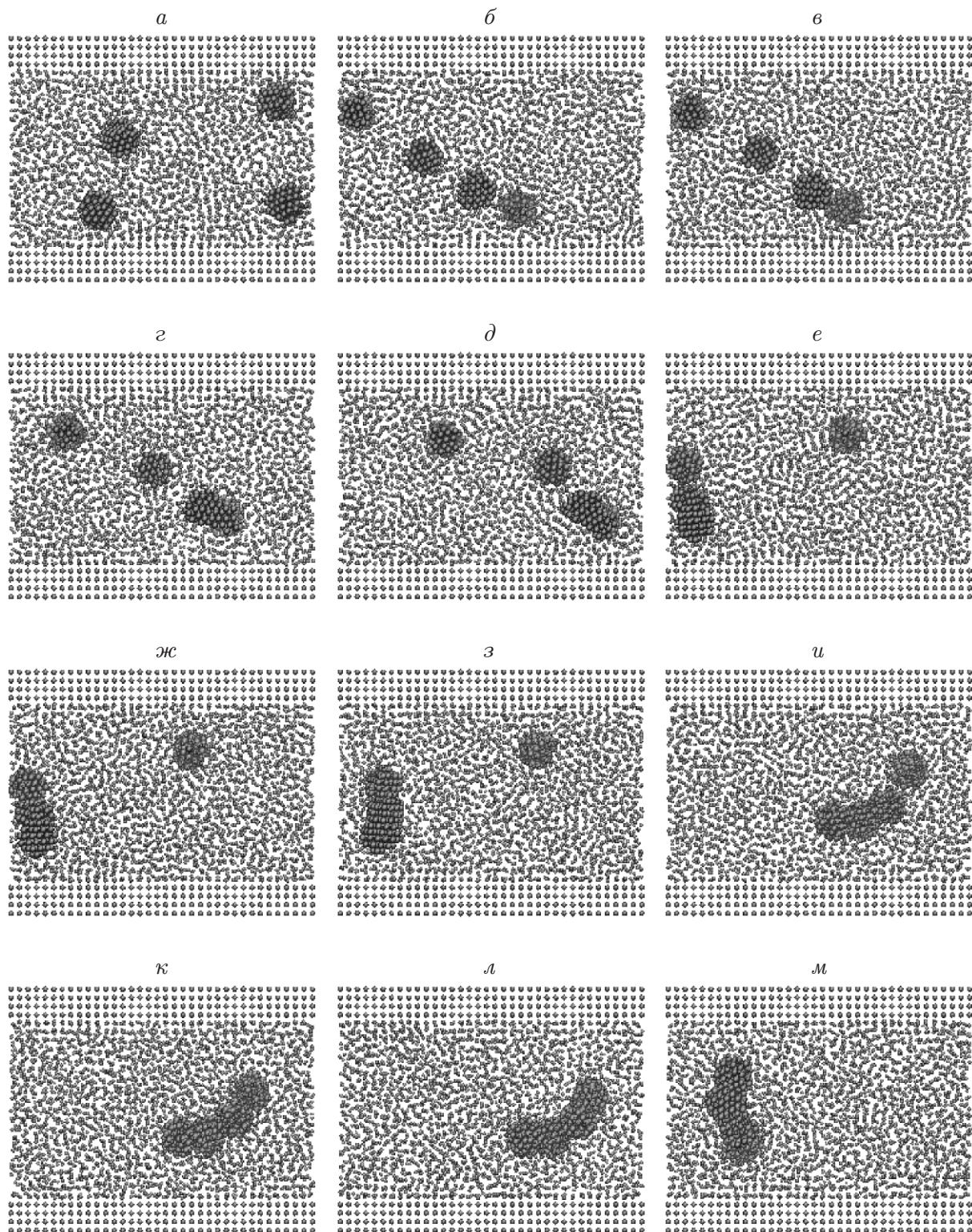


Рис. 5. Траектории наночастиц и атомов жидкости в течении Пуазейля в различные моменты времени:

$a - t = 400$  пс,  $b - t = 650$  пс,  $в - t = 700$  пс,  $г - t = 800$  пс,  $д - t = 850$  пс,  $e - t = 1200$  пс,  $ж - t = 1260$  пс,  $з - t = 1290$  пс,  $и - t = 1360$  пс,  $к - t = 1390$  пс,  $л - t = 1400$  пс,  $м - t = 2000$  пс

Профиль скорости течения Пуазейля, полученный с помощью ММД, описывается многочленом второго порядка [14]. Для того чтобы вычислить скорость наножидкости, вдоль направления  $z$  область моделирования была разделена на 72 подобласти  $N_i$ . Распределение скорости хорошо согласуется с аналитическим решением, полученным на основе уравнений Навье — Стокса. В отличие от течения Пуазейля без наночастиц для течения Пуазейля наножидкости наблюдались флуктуации профиля скорости.

На рис. 5 показана эволюция микроструктуры при внешней движущей силе, равной 0,036. Видно, что наночастицы меди соединяются в структуры, подобные цепи, а затем образуют кластер, движущийся в середине канала под действием внешней силы. Наличие потенциала взаимодействия и внешней силы обуславливает скопление наночастиц в течении Пуазейля. Данный результат свидетельствует о том, что наножидкости гидродинамически неустойчивы. Если силы взаимодействия наночастиц существенно больше сил взаимодействия наночастиц с молекулами основной жидкости и больше внешней потенциальной силы, то произойдет группирование частиц. При наличии внешней силы все наночастицы движутся в направлении течения случайным образом. Когда две наночастицы оказываются рядом, они склеиваются, образуя одну большую наночастицу, к которой приближаются остальные наночастицы. В результате четыре наночастицы образуют структуру, подобную кластеру, который движется в направлении течения главным образом в середине наноканала.

В настоящее время используются различные способы, препятствующие группированию частиц, но в конечном счете кластерообразование неизбежно.

Группирование частиц обусловлено влиянием сил Ван-дер-Ваальса, особенно в случае металлических частиц, так как в молекулах этих частиц могут появляться диполи, что вызывает притяжение других близкорасположенных диполей. Сила Ван-дер-Ваальса возникает вследствие притяжения диполей, которые могут быть созданы даже в инертных частицах.

**Заключение.** В работе методом молекулярной динамики изучены микроструктура и поведение течения наножидкостей, вызванного наличием внешней движущей силы. Исследована энергия системы при эволюции ее микроструктуры. Результаты моделирования распределения скорости в течении Пуазейля с наночастицами согласуются с аналитическим решением в виде полинома второго порядка. Результаты моделирования показывают, что наночастицы меди в жидком аргоне соединяются в кластеры. Наличие потенциала сильного взаимодействия наножидкостей с частицами меди приводит к увеличению силы притяжения наночастиц. Наличие стационарной внешней силы вызывает скопление наночастиц в средней части наноканала, где скорость больше.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Allen M. P.** Computer simulations of liquids / M. P. Allen, D. J. Tildesley. Oxford: Clarendon Press, 1987.
2. **Sarkar S., Selvam R. P.** Molecular dynamics simulation of effective thermal conductivity and study of enhanced thermal transport mechanism in nanofluids // J. Appl. Phys. 2007. V. 102. 074302.
3. **Sankar N., Mathew N., Sobhan C. B.** Molecular dynamics modeling of thermal conductivity enhancement in metal nanoparticle suspensions // Intern. Comm. Heat Mass Transfer. 2008. V. 35. P. 867–872.
4. **Li L., Zhang Y., Ma H., Yang M.** Molecular dynamics simulation of effect of liquid layering around the nanoparticle on the enhanced thermal conductivity of nanofluids // J. Nanopart. Res. 2010. V. 12. P. 811–821.

5. **Xue L., Keblinski P., Phillpot S. R., et al.** Effect of liquid layering at the liquid-solid interface on thermal transport // Intern. J. Heat Mass Transfer. 2004. V. 47. P. 4277–4284.
6. **Li L., Zhang Y., Ma H., Yang M.** An investigation of molecular layering at the liquid-solid interface in nanofluids by molecular dynamics simulation // Phys. Lett. A. 2008. V. 372. P. 4541–4544.
7. **Evans W., Fish J., Keblinski P.** Role of Brownian motion hydrodynamics on nanofluid thermal conductivity // Appl. Phys. Lett. 2006. V. 88. 093116.
8. **Merabia S., Shenogin S., Joly L., et al.** Heat transfer from nanoparticles: A corresponding state analysis // Appl. Phys. Sci. 2009. V. 106, N 36. P. 15113–15118.
9. **Lv J. Z., Cui W. Z., Bai M. L., Li X. J.** Molecular dynamics simulation on flow behavior of nanofluids between flat plates under shear flow condition // Microfluid Nanofluid. 2011. V. 10. P. 475–480.
10. **Lv J., Mai M., Cui W., Li X.** The molecular dynamic simulation on impact and friction characters of nanofluids with many nanoparticles system // Nanoscale Res. Lett. 2011. V. 6. P. 200.
11. **Cui W., Bai M., Lv J., Li X.** On the microscopic flow characteristics of nanofluids by molecular dynamics simulation on Couette flow // Open Fuels Energy Sci. J. 2012. V. 5. P. 21–27.
12. **Cui W., Bai M., Lv J., et al.** On the flow characteristics of nanofluids by experimental approach and molecular dynamics simulation // Exp. Thermal Fluid Sci. 2012. V. 39. P. 148–157.
13. **Plimpton S.** Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comput. Phys. 1995. V. 117, N 1. P. 1–19.
14. **Ziarani A. S., Mohamad A. A.** A molecular dynamics study of perturbed Poiseuille flow in a nanochannel // Microfluid Nanofluid. 2005. V. 2. P. 12–20.

*Поступила в редакцию 9/1 2014 г.*

---