

磁流体微观结构的模拟与控制方法研究

李 强* 宣益民 李 斌

(南京理工大学动力工程学院, 南京 210094)

摘要 考虑磁流体中粒子受力及运动特性, 运用分子动力学模拟方法研究了磁流体的三维微观结构, 计算模拟了磁流体在有、无外加磁场作用下的微观结构, 分析了粒子体积份额、磁偶极子作用势以及外加磁场作用势对磁流体微观结构的影响. 结果表明在无外加磁场作用时, 磁流体中的磁性粒子呈现无序状态, 粒子会聚集成团; 在外加磁场条件下, 磁流体中的磁性粒子沿磁场方向取向形成链状结构, 且随着粒子体积份额的增加、磁偶极子作用势以及外加磁场作用势的增大, 链状结构更为明显.

关键词 磁流体 分子动力学模拟 微观结构 链状聚集

磁流体(magnetic fluid)是由纳米级(小于 10 nm)的铁磁性或超顺磁性微细颗粒, 借助于表面活性剂稳定地分散于基液(如油、水等液体)中形成的一类兼具磁体的磁性和液体流动性的功能流体. 自磁流体的概念出现以来, 国内外研究人员对磁流体的应用研究十分活跃. 目前, 磁流体已逐渐在磁液密封、电声器件、润滑、选矿、磁回路、医疗卫生、生物磁学等诸多领域得到应用 [1-2].

磁流体具有其他固态磁性材料和其他液体所没有的一系列新现象, 比如: 磁热效应、热磁对流、磁光效应等. 在外加磁场的作用下, 磁流体中的磁性粒子会沿磁场方向形成链状结构, 磁流体呈现各向异性特征, 磁性粒子的链状分布结构对磁流体的物性参数(导热系数和黏度等)和特征有至关重要的影响, 磁流体的物性参数会随着外加磁场的强度、方向以及磁场性质的变化而改变, 从而成为一种“可控”的功能流体. 实验研究表明 [3], 外加与磁流体流动方向垂直的磁场, 磁流体的黏度大于其在相同磁场强度的平行方向磁场作用下的黏度, 这主要由于磁性粒子的链状结构方向不同所致; 当外加与热流传播方向平行的磁场, 由于磁性粒子沿热量传递方向形成链状结构, 磁流体的导热系数大于相同磁场强度的与热流传播方向垂直的磁场作用下的导热系数. 因此, 要研究磁流体的独特性能, 必须描述粒子在外加磁场作用下的运动规律, 研究磁流体的微观结构, 探索磁流体微观结构的控制方法.

目前, 关于磁流体微观结构的研究主要有蒙特卡洛(Monte Carlo, MC)和分子动力学模拟

(Molecular Dynamics, MD)方法. 例如, Akira等人^[4-6]提出了“Cluster-Moving” MC方法, 研究发现磁流体中磁性颗粒会由于彼此间的引力作用形成团簇, 在外加磁场的作用下形成链状结构; Castro等人^[7]提出了一个多粒径分布的模型, 应用MC方法得到了磁流体的微观结构; 张齐等人^[8]提出了一个服从对数分布的聚团粒子相互作用模型, 利用MC方法对磁流体薄膜在有、无外加磁场作用下所形成的三维空间结构进行模拟. Yoshihisa等人^[9]应用MD方法, 模拟了在不同外加条件下, 球形以及椭圆形磁性颗粒的聚集结构; Akira等人^[10]应用布朗MD、斯托克思MD方法模拟了在不同强度外加磁场作用下磁流体的三维微观结构, 并对各种情况进行了分析比较.

但是, 由于在外加磁场作用下, 悬浮的磁性纳米颗粒同时受磁偶极子作用力、外加磁场作用力、粒子间排斥力、范德华力以及重力、浮力等作用, 磁性颗粒的运动和磁流体的形态非常复杂, 关于磁流体微观结构的研究依然存在着一些急需完善之处, 突出体现在以下几个方面: MC方法采用概率模型来确定磁性粒子的运动过程, 没有真实、具体地描述磁性粒子在各种作用势综合作用下的运动规律和过程; 应用MD方法模拟磁流体微观结构时, 磁性粒子间斥力是用LJ势函数导出的^[9], 但LJ势函数适用于非极性分子间的作用, 对于极性的磁性粒子并不适合; 未考虑微观结构随时间的演变过程^[10]; 未能深入研究不同磁性粒子体积份额以及不同粒子间作用势对磁流体微观结构的影响^[9,10]等, 研究工作亟待进一步深化.

基于以上分析, 本文的主要目的在于运用 MD 方法, 对磁流体在有、无外加磁场作用下的三维微观结构进行计算模拟, 描述磁流体结构随时间的演变过程, 研究不同粒子体积份额的磁流体在不同磁偶极子作用势以及不同强度的外加磁场作用下形成的微观结构, 分析磁流体微观结构的影响因素, 探究磁流体内部粒子运动规律, 研究磁流体微观结构与外加磁场间的本构关系和微观结构的控制方法.

1 物理模型

1.1 粒子模型

磁流体中的磁性粒子考虑为单一的大小相同的球形粒子, 粒子表面包裹一层活性剂分子. 磁性粒子所受的作用势主要有磁偶极子作用势 u_{ij}^m ^[11]、外加磁场作用势 u_i^h ^[1]、由活性剂分子层引起的排斥势 u_{ij}^r ^[12]和粒子间范德华吸引势 u_{ij}^v ^[13], 其表达式分别为:

$$u_{ij}^m = \frac{\mu_0 m^2}{4\pi d_p^3} \cdot \left(\frac{d_p}{r_{ij}}\right)^3 \{ \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j - 3(\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{t}_{ij})(\mathbf{n}_j \cdot \mathbf{t}_{ij}) \}, \quad (1)$$

$$u_i^h = -\mu_0 m H \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{h}, \quad (2)$$

$$u_{ij}^r = \frac{\pi d_p^2 \xi}{2} \left\{ 2 - \frac{2r_{ij}}{\delta} \ln \left(\frac{d}{r_{ij}} \right) - \frac{r_{ij} - d_p}{\delta} \right\}, \quad (3)$$

$$u_{ij}^v = -\frac{A}{6} \left\{ \frac{2}{L_v^2 + 4L_v} + \frac{2}{(L_v + 2)^2} + \ln \frac{L_v^2 + 4L_v}{(L_v + 2)^2} \right\}, \quad (4)$$

其中下标 i 和 j 表示粒子的标号; μ_0 为真空磁导率; d_p 为粒子直径; δ 为表面活性剂分子层厚

度; r_{ij} 为粒子间间距; d 为粒子包括表面活性剂分子层的整体直径, $d = d_p + 2\delta$; ξ 表示磁性粒子单位面积上的表面活性剂分子数; A 为 Hamaker 常数; $L_v = 2r_{ij}/d_p - 2$; g 为重力加速度; $\Delta\rho$ 为磁性材料与基液密度差; Δz 为磁性粒子在竖直方向的位移; \mathbf{n}_i 为粒子磁矩单位向量, $\mathbf{n}_i = \mathbf{m}_i/m_i$, \mathbf{m}_i 为磁性粒子固有的磁矩向量, $m_i = |\mathbf{m}_i|$; \mathbf{t}_{ij} 为表示粒子间相对位置的单位向量, $\mathbf{t}_{ij} = \mathbf{r}_{ij}/r_{ij}$, 其中 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$, \mathbf{r}_i 表示粒子位置的向量; \mathbf{h} 为外加磁场单位向量, $\mathbf{h} = \mathbf{H}/H$, $H = |\mathbf{H}|$.

为了研究磁偶极子作用势、外加磁场作用势以及粒子间排斥势对磁流体结构的影响, 定义以下无量纲参数:

$$\lambda_m = \frac{\mu_0 m^2}{4\pi d_p^3 kT}, \quad (5)$$

$$\lambda_h = \frac{\mu_0 mH}{kT}, \quad (6)$$

$$\lambda_r = \frac{\pi d_p^2 \xi}{2}, \quad (7)$$

其中 λ_m 表示磁偶极子作用势强度; λ_h 表示外加磁场作用势强度; λ_r 表示由活性剂分子层引起的排斥势强度. k 为玻尔兹曼常数; T 为磁流体的绝对温度.

磁流体中磁性粒子的运动包括平动运动和转动运动^[8], 平动运动指粒子在各种力的作用下的直线运动, 转动运动指粒子磁矩在各种转矩的作用下的旋转运动. 根据磁性粒子所受的作用势表达式, 通过对粒子位置矢量求导, 可以得到粒子受力和力矩作用的表达式:

$$\mathbf{F}_{ij}^m = -kT\lambda_m \frac{3d_p^3}{r_{ij}^4} \left[-(\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j) \mathbf{t}_{ij} + 5(\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{t}_{ij}) \times (\mathbf{n}_j \cdot \mathbf{t}_{ij}) \mathbf{t}_{ij} - ((\mathbf{n}_j \cdot \mathbf{t}_{ij}) \mathbf{n}_i + (\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{t}_{ij}) \mathbf{n}_j) \right], \quad (8)$$

$$\mathbf{F}_i^h = \mu_0 (\mathbf{m}_i \cdot \nabla) \mathbf{H}, \quad (9)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^r = kT\lambda_r \frac{1}{\delta} \cdot \mathbf{t}_{ij} \ln \left(\frac{d}{r_{ij}} \right), \quad (10)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^v = \frac{16A}{(L_v + 2)^3 \cdot (L_v^2 + 4L_v)^2}, \quad (11)$$

$$\mathbf{F}_i^b = \sqrt{C/\Delta t} \mathbf{G}, \quad (12)$$

$$\mathbf{F}_i^g = \frac{4}{3} \pi r_p^3 g \Delta\rho, \quad (13)$$

$$\mathbf{T}_{ij}^m = -kT\lambda_m \left(\frac{d_p}{r_{ij}} \right)^3 \left[\mathbf{n}_i \times \mathbf{n}_j - 3(\mathbf{n}_j \cdot \mathbf{t}_{ij}) \mathbf{n}_i \times \mathbf{t}_{ij} \right], \quad (14)$$

$$\mathbf{T}_i^h = \mu_0 m H \mathbf{n}_i \times \mathbf{h} = \mu_0 m \mathbf{n}_i \times \mathbf{H} = \mu_0 \mathbf{m} \times \mathbf{H}. \quad (15)$$

其中 \mathbf{F}_{ij}^m , \mathbf{F}_i^h , \mathbf{F}_{ij}^r , \mathbf{F}_{ij}^v , \mathbf{F}_i^b 和 \mathbf{F}_i^g 分别表示粒子所受的磁偶极子作用力、外加磁场作用力、

粒子间排斥力、粒子间范德华力、布朗力、重力与浮力差; $C = 6\pi\eta_c d_p k_B T$, Δt 为时间间隔, G 为满足标准正态分布的随机数. \mathbf{T}_{ij}^m 和 \mathbf{T}_i^h 分别为磁偶极子作用产生的转矩和外加磁场作用产生的转矩. 其中粒子间的磁偶极子作用力 \mathbf{F}_{ij}^m 和范德华引力 \mathbf{F}_{ij}^v 作用范围为 $r_{ij} \leq r_c$, r_c 为截断半径, 超出此范围引力为零; 粒子间的斥力作用 \mathbf{F}_{ij}^r 仅在范围 $d_p \leq r_{ij} \leq d$ 内有效, 超出此范围斥力为零. 本文模拟中, 外加磁场为均匀梯度磁场, 方向沿 Z 轴正向(取竖直向上方向).

1.2 运动方程

磁流体中的磁性粒子既要作平动运动, 又要作转动运动, 因此表述其运动的控制方程有两个. 对于低体积份额的磁流体^[10], 假设: (i) 基液对磁性颗粒的流体动力仅考虑 Stokes 阻力; (ii) 表面活性剂分子间作用力仅表现为斥力; (iii) 由热噪声引起的作用在磁性颗粒上的随机力和转矩忽略不计; (iv) 磁性颗粒的平动和转动惯性效果忽略不计.

基于以上假设条件, 得到简化情况下磁性粒子的运动方程为^[10]

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{1}{\zeta_t} \left[\sum (\mathbf{F}_{ij}^m + \mathbf{F}_i^h + \mathbf{F}_{ij}^r + \mathbf{F}_{ij}^v + \mathbf{F}_i^g) \right], \quad (16)$$

$$\frac{d\mathbf{n}_i}{dt} = \frac{1}{\zeta_r} \left[\sum (\mathbf{T}_{ij}^m + \mathbf{T}_i^h) \right] \times \mathbf{n}_i, \quad (17)$$

其中 \mathbf{r}_i 和 \mathbf{n}_i 分别表示粒子位置和磁矩的单位向量; ζ_t 和 ζ_r 分别表示平动阻力系数和转动阻力系数, 其中 $\zeta_t = 3\pi d_p \eta$, $\zeta_r = \pi d_p \eta$, η 表示基液黏度.

模拟时, 在 x, y, z 三个方向均采用周期性边界条件, 粒子引力作用的截断半径取 $r_c = 10d_p$. 每次循环 N 个粒子一起运动, 此过程作为一个时间步. 磁性粒子在相互作用力以及外力的作用下运动, 其运动方程采用 Euler 法来求解, 从而可以确定每个时刻粒子的位置和磁矩向量, 由此得到磁流体的微观结构.

1.3 模拟参数

模拟对象为一边长为 L 的立方体, 其中含有 N 个磁性粒子, 悬浮在黏度为 η 的基液中, 粒子所占的体积份额为 ϕ . 磁性粒子形状相同, 均为球形, 直径为 d_p . 粒子表面覆有表面活性剂层, 厚度为 δ , 单位面积上的表面活性剂分子数为 ξ . 由于粒子有磁性, 各个粒子都有一定的磁矩 m , 且 m 大小相同. 模拟过程时间步长为 dt .

模拟时的一些基本参数有: $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$, $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N} \cdot \text{A}^{-2}$, $T = 300 \text{ K}$, $dt = 2 \times 10^{-8} \text{ s}$, $d_p = 10 \text{ nm}$, $\xi = 10^{18} / \text{m}^2$, $\delta = 1.5 \text{ nm}$, $\eta = 0.1 \text{ Pa} \cdot \text{s}$, $A = 2 \times 10^{-9} \text{ N} \cdot \text{m}$, $g = 9.8 \text{ m/s}^2$, $\Delta\rho = (5240 - 1000) \text{ kg/m}^3$.

为了模拟不同强度磁偶极子作用势与外加磁场作用势条件下磁流体的微观结构, 设定 m 和 H 为可变量, m 的量级为 $10^{-19} \text{ A} \cdot \text{m}^2$, H 的量级为 10^5 A/m . 根据以上参数可得 $\lambda_r = 157$, λ_m 和 λ_h (待定, 与 m 和 H 有关).

根据公式 $\phi = N\pi d_p^3 / (6L^3)$, 可得 N , L 和 ϕ 之间的关系. 当 $N = 400$ 和 $\phi = 0.01$ 时, 可得

$L = 2.75 \times 10^{-7} m$. 模拟不同粒子体积份额时的磁流体微观结构, 立方体边长不变, 体积份额 ϕ 取 0.005, 0.01, 0.02 和 0.04, 对应的粒子数 N 分别为 200, 400, 800 和 1600. 取 $\lambda_h = 30$, $\lambda_m = 3, 6, 9$ 和 30 以模拟不同磁偶极子作用势强度时磁流体的微观结构; 取 $\lambda_m = 6$, $\lambda_h = 1, 5, 20$ 和 40 以模拟不同外加磁场作用势强度时磁流体的微观结构. 上述过程均在 $N = 400$ 和 $\phi = 0.01$ 的条件下实现.

2 模拟结果与讨论

2.1 无外加磁场时磁流体的微观结构

图1给出了 $N = 400$, $\phi = 0.01$, $\lambda_r = 157$ 和 $\lambda_m = 6$ 时, 在无外加磁场作用下磁流体微观结构的形成过程. 图1(a)表示初始状态下磁性粒子的分布状况, 此状态由随机过程确定, 各个粒子的位置随机分布; 图1(b)~(d)分别为 10^4 , 10^5 和 5×10^5 个时间步后粒子的分布状况. 由图可见, 由于磁性粒子间的相互作用, 粒子由最初的任意分布而逐渐聚集到一起形成了一定大小的聚团结构, 且随着时间的推移, 磁性粒子的聚集现象越来越明显, 达到热平衡时, 粒子以短的粒子聚集体的形式存在, 没有明显的取向趋势, 整体上呈现分形结构特征.

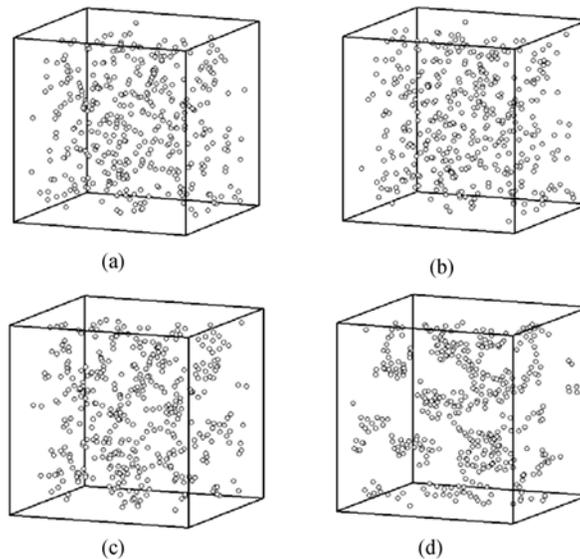


图1 无外加磁场作用时磁流体微观结构的形成过程

(a) $N_{\text{step}}=0$; (b) $N_{\text{step}}=10^4$; (c) $N_{\text{step}}=10^5$; (d) $N_{\text{step}}=5 \times 10^5$

为了研究不同磁性粒子体积份额对磁流体的微观结构的影响, 进行了不同粒子体积份额的磁流体微观结构的模拟. 图2显示了在无外加磁场作用下, 粒子体积份额分别为 0.005, 0.01, 0.02 和 0.04 的磁流体, 经过 5×10^5 个时间步后微观结构的模拟结果. 计算模拟结果表明, 在不同体积份额条件下, 磁流体均出现了较为明显的聚集现象, 体积份额越大, 磁性粒子间距越小, 粒子间范德华吸引力越大, 磁流体中形成的聚团尺寸也越大.

无外加磁场作用条件下, 磁流体中粒子分布特征与聚集结构和其他非磁性纳米颗粒悬浮液相似. 虽然磁流体内部磁性粒子不会形成链状结构, 但由于液体中添加了纳米粒子, 改变了

液体的结构, 磁流体的导热系数和黏度都将增大, 且随着体积份额的增加而增大.

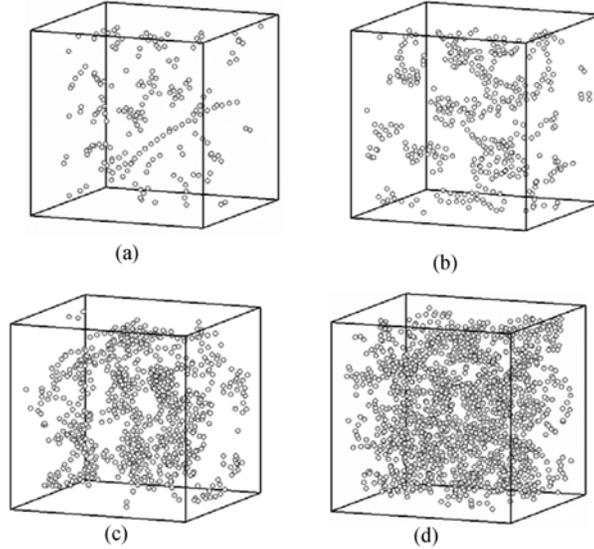


图 2 无外加磁场作用不同体积份额条件下磁流体的微观结构

(a) $\phi=0.005$; (b) $\phi=0.01$; (c) $\phi=0.02$; (d) $\phi=0.04$

2.2 有外加磁场时磁流体的微观结构

图3给出了磁流体在外加磁场作用下微观结构的形成过程($\lambda_h=10$). 图3(a)~(d)分别是经过 10^4 , 2×10^4 , 5×10^4 和 10^5 个时间步后磁流体的微观聚集结构. 模拟结果显示, 在外加磁场的作用下, 磁性粒子原本无序的磁矩经过几千个时间步后方向均保持与外加磁场方向一致. 模拟的前期阶段, 如图3(a)和(b), 沿着外加磁场方向, 出现了较短的链状结构; 随着时间的推移, 如图3(c)和(d), 沿着外加磁场方向, 链状结构越来越长, 与此同时, 长链结构之间又逐渐靠近. 比较图1和3可知, 在无磁场作用时, 磁流体的粒子处于一种无序的状态, 粒子间形成短的聚集体; 而在外加磁场作用下, 磁流体中的粒子沿磁场方向有明显的取向趋势, 形成了链状结构, 磁流体的微观结构呈现出各向异性特征, 磁流体的物性参数将具有方向性. 例如, 由于磁性粒子链状结构的存在, 增大了此方向上的能量传递速率, 沿外加磁场方向的磁流体导热系数将大于其他方向的磁流体的导热系数. 而当磁流体流动方向与外加磁场方向垂直时, 磁性粒子排列成与磁场方向一致却与磁流体流动方向垂直的链状结构, 链状结构横向分布于流道中, 加大了流动阻力, 使得沿着外加磁场方向磁流体的黏度大于其在相同磁场强度的平行方向磁场作用下的黏度.

图4给出了在相同外加磁场作用下, 不同体积份额磁流体经过 10^5 个时间步后的的微观结构. 图4(a)~(d)对应的粒子体积份额分别为0.005, 0.01, 0.02和0.04. 由图可知, 在不同体积份额条件下, 磁流体中的磁性粒子均沿外加磁场方向产生了明显的取向, 形成了链状结构; 体积份额较大时, 长链之间形成了较厚的链状结构层, 沿磁场方向形成了类似柱状物的结构.

2.3 磁偶极子作用势强度 λ_m 对磁流体微观结构的影响

图5是在外加磁场强度为 $\lambda_h=30$, 粒子体积份额为 $\phi=0.01$ 条件下磁流体的微观聚集结

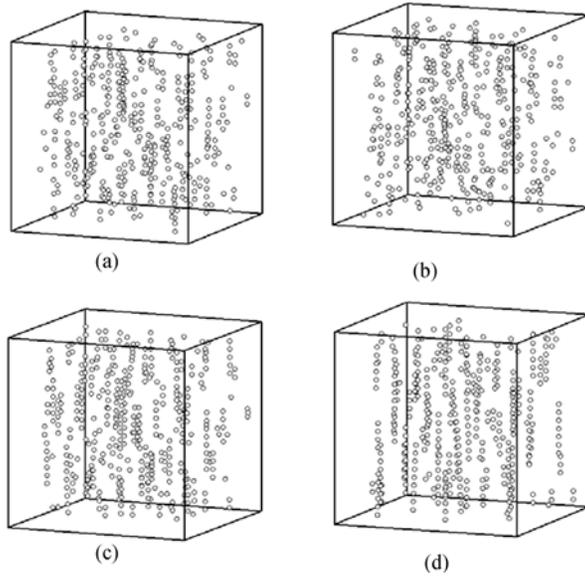


图 3 外加磁场作用时磁流体微观结构的形成过程
(a) $N_{step}=10^4$; (b) $N_{step}=2 \times 10^4$; (c) $N_{step}=5 \times 10^4$; (d) $N_{step}=10^5$

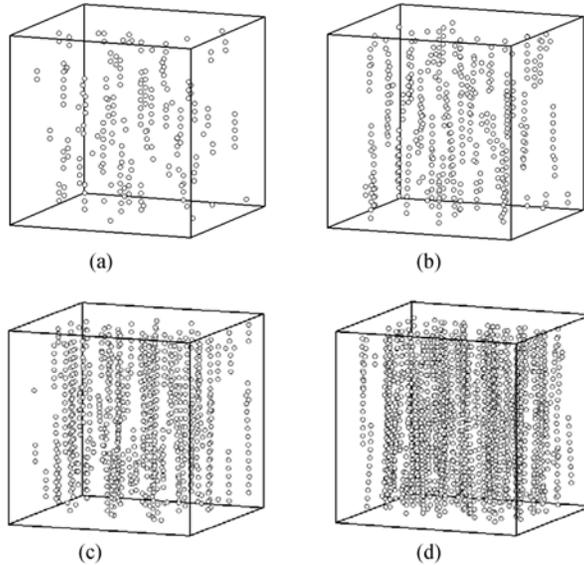


图 4 外加磁场作用不同体积份额条件下磁流体的微观结构
(a) $\phi=0.005$; (b) $\phi=0.01$; (c) $\phi=0.02$; (d) $\phi=0.04$

构。模拟结果显示, 当磁偶极子作用势强度较弱时, 如图5(a), $\lambda_m = 3$, 磁流体中出现了沿磁场方向取向的较短的链状结构, 形成链状结构的粒子占总粒子数的比例不高, 而且链状结构之间非常分散; 随着磁偶极子作用势强度的增强, 沿磁场方向形成的链状结构越来越长, 形成链状结构的粒子占总粒子数的比例越来越高, 这从图5(b)~(d)中很容易看出; 当磁偶极子作用势强度较强时, 如图5(c), $\lambda_m = 9$, 沿磁场方向形成链状结构的趋势不仅越来越明显, 而且长链

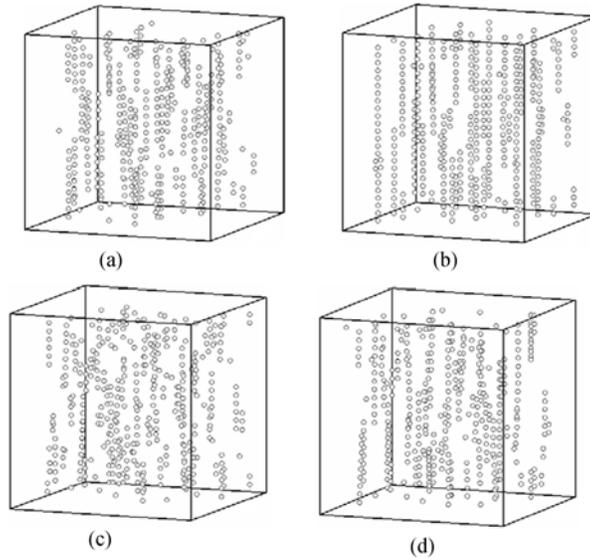


图 5 不同强度磁偶极子作用势条件下磁流体的微观结构
(a) $\lambda_m=3$; (b) $\lambda_m=6$; (c) $\lambda_m=9$; (d) $\lambda_m=30$

与长链之间也相互聚集, 形成了“链状聚团”; 图 5(d) 对应的磁偶极子作用势强度 ($\lambda_m = 30$) 比图 5(c) 对应的磁偶极子作用势强度 ($\lambda_m = 9$) 大很多, $\lambda_m = 30$ 时形成了比 $\lambda_m = 9$ 时更长的链状结构, 但链状结构之间与 $\lambda_m = 9$ 时相比却较为分散, 没有明显的链状聚团. 粒子间作用势强度 λ_m 超过一定值后, 链状聚团形成趋势会减弱, 原因是 λ_m 较大时, 链状结构之间存在较高的“能量壁垒”, 阻止了链状结构聚集成团, 这种现象与 MC 模拟结果相同 [4]. 随着磁偶极子作用势强度的增大, 磁流体链状结构的加长, 沿磁场方向磁流体的导热系数将进一步增大, 而垂直于磁场方向磁流体的黏度也将变大.

2.4 外加磁场强度 λ_h 对磁流体微观结构的影响

图 6 是在磁偶极子作用势强度为 $\lambda_m = 6$, 粒子体积份额为 $\phi = 0.01$ 的条件下模拟所得磁流体的微观结构. 模拟结果显示, 当外加磁场强度较弱时, 如图 6(a), $\lambda_h = 1$, 此时粒子间磁偶极子作用势强度比外加磁场强度大很多, 粒子间磁偶极子作用势占主导地位, 因此磁流体中的很多粒子仍处于无序状态, 沿磁场方向取向的链状结构比较少, 且多为短链, 不少短链是弯曲的; 当 $\lambda_h = 5$ 时, 如图 6(b), 粒子间磁偶极子作用势强度与外加磁场强度相当, 与 $\lambda_h = 1$ 时相比, 形成的链状结构增多, 链状结构也较直; 当外加磁场强度较强时, 如图 6(c) 和 (d), 此时外加磁场强度比粒子间磁偶极子作用势强度大很多, 外加磁场作用势占主导地位, 绝大多数粒子沿外加磁场方向形成链状结构, 与较弱强度磁场作用时相比, 链状结构的长度更长, 形状更直. 因此得出结论, 在相同强度粒子间磁偶极子作用势条件下, 随着外加磁场强度的增强, 沿磁场方向形成链状结构的趋势越来越明显, 链状结构的长度越来越长, 链状结构的形状越来越直. 模拟过程中, 链状结构之间没有明显的聚集现象. 基于以上模拟结果, 可以看出, 增加外加磁场强度 λ_h , 可以增大沿磁场方向磁流体的导热系数以及垂直于磁场方向的磁流体的黏度.

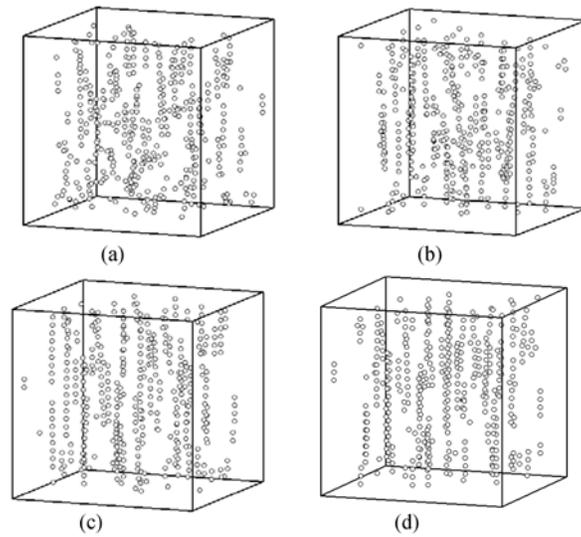


图6 不同强度外加磁场条件下磁流体的微观结构
(a) $\lambda_h=1$; (b) $\lambda_h=5$; (c) $\lambda_h=20$; (d) $\lambda_h=40$

3 结论

运用 MD 方法模拟了磁流体在有、无外加磁场作用下的三维微观结构, 在无外加磁场作用时, 磁流体中的磁性粒子处于无序状态, 粒子由于彼此作用会聚集成团; 在外加磁场作用下, 磁流体中的磁性粒子会沿外加磁场方向取向, 形成链状结构。

在外加磁场强度相同的条件下, 随着粒子间磁偶极子作用势强度的增强, 沿磁场方向形成链状结构增多, 链状结构逐渐增长, 链状结构之间也会相互聚集; 在粒子间磁偶极子作用势强度相同的条件下, 随着外加磁场强度的增强, 沿磁场方向形成链状结构的趋势越来越明显, 链状结构也逐渐增长, 链状结构的形状越来越直。

参 考 文 献

- 李德才. 磁性流体理论及应用. 北京, 科学出版社, 2003
- Rosensweig R E. Ferrohydrodynamics. Cambridge: Cambridge University Press, 1985
- Li Q, Xuan Y, Wang J. Experimental investigations on transport properties of magnetic fluids. *Exp Therm Fluid Sci*, 2005, 30(2): 109—116 [\[DOI\]](#)
- Akira S, Chantrell R W, Shin-Ichi K, et al. Two-dimensional Monte Carlo simulations to capture thick chainlike clusters of ferromagnetic particles in colloidal dispersions. *J Colloid Interface Sci*, 1996, 178(2): 620—627 [\[DOI\]](#)
- Satoh A, Chantrell R W, Shin-Ichi, et al. Three dimension Monte Carlo simulations of thick chainlike clusters composed of ferromagnetic fine particles. *J Colloid Interface Sci*, 1996, 181(2):422—428 [\[DOI\]](#)
- Masayuki A, Akira S. Two-dimension Monte Carlo simulations of a colloidal dispersion composed of polydisperse ferromagnetic particles in an applied magnetic field. *J Colloid Interface Sci*, 2005, 288 (2): 475—488 [\[DOI\]](#)
- Castro L L, da Silva M F, Bakuzis A F, et al. Aggregate formation on polydisperse ferrofluids: A Monte Carlo analysis. *J Magn Magn Mater*. 2005, 293: 553—558 [\[DOI\]](#)
- 张齐, 王建华, 朱鹤孙, 等. 磁性液体三维蒙特卡罗模拟. *自然科学进展*.1995, 5(1): 105—113
- Yoshihisa E, Katsumi O, Masafumi O. Simulation study on microstructure formations in magnetic fluids. *Physica A*, 2003, 330: 496—506 [\[DOI\]](#)
- Akira S, Coverdale G N, Chantrell R W. Stokesian dynamics simulations of ferromagnetic colloidal dispersions subjected to a sinusoidal shear flow. *J Colloid Interface Sci*, 2000, 231(2): 238—246 [\[DOI\]](#)
- Mohebi M, Jamasbi N, Liu J. Simulation of the formation of nonequilibrium structure in magnetorheological fluids subject to an external magnetic field. *Phys Rev E*, 1996, 54: 5407—5413 [\[DOI\]](#)
- Coverdale G N, Chantrell R W, Satoh A, et al. Molecular dynamic model of the magnetic properties and microstructure of advanced metal particle dispersions. *J Appl Phys*, 1997, 81(8): 3818—3820 [\[DOI\]](#)
- Russel W B, Saville D A, Schowalter W R. Colloidal Dispersion. Cambridge: Cambridge University Press, 1989