

2DMD 应用于微通道内气体流动研究

曹炳阳 陈民* 过增元

(清华大学工程力学系, 北京 100084. * 联系人, E-mail: mchen@tsinghua.edu.cn)

摘要 为了将 2DMD(二维分子动力学)方法应用于微通道内气体流动的研究, 以平衡状态气体分子速度的分布函数为基础, 得到了分子平均速率、平均碰撞频率、平均自由程和动力黏度的理论形式, 以及二维体系气体流动的滑移边界条件. 在此基础上, 应用 2DMD 方法模拟了气体在亚微米通道内的滑移流动, 并与 3D 模拟的计算结果和计算量进行了对比分析.

关键词 分子动力学 二维体系 微尺度流动 稀薄气体效应

近年来, 微/纳电子机械系统(MEMS /NEMS)快速发展并在国际上成为一个新兴的技术和科学前沿[1,2]. 微米乃至纳米构件中的流体输运特性既是微纳机械操控中经常遇到的问题, 也是学科发展急需解决的关键科学问题. 相对于常规尺度而言, 微纳尺度下的气体流动有很大的不同, 如边界速度滑移和温度跳跃、粗糙度效应、表面力效应等[3], 这些现象基本上源自微观粒子的相互作用, 迫切需要从分子/原子水平探索微纳尺度流动的规律.

分子动力学(MD)模拟方法近年来在微纳尺度流动研究中获得了重要的应用. 然而, 由于计算机运算速度和存储容量的限制, 能够模拟计算的三维流动体系还限于纳米尺度水平[4-7]. 二维分子动力学于 20 世纪七八十年代在物理吸附和二维固体熔化问题中受到广泛关注, 并且已在相平衡和热力学性质方面取得了一些有意义的结果[8,9]. 二维分子动力学(2DMD)模拟技术可以通过降维来增加模拟系统的规模, 近些年在微通道流动研究中也得到初步应用[10,11]. 然而, 对其理论基础和计算方法, 文献中还缺乏细致的分析.

本文以平衡状态分子速度和速率分布函数为基础, 得到了二维体系的分子平均速率、平均碰撞频率、平均自由程和动力黏度的理论形式, 推导了二维气体流动的滑移边界条件, 然后应用于微通道内气体滑移流动的分子动力学模拟研究.

1 二维体系的气体分子运动理论

为了建立二维体系稀薄气体平衡态性质以及输运的理论基础, 首先引入和常规气体分子运动论相似的几个假设: (1) 分子体系的混沌性假设, 即平衡态分子按位置和速度的分布是均匀的, 粒子在

发生碰撞前不相关并且在统计上是独立的; (2) 基于硬球分子模型的理想气体假设, 即分子直径固定, 弹性碰撞的时间可以忽略并且遵守经典力学规律; (3) 气体密度不能过分低, 从而可以建立宏观量和微观粒子性质的联系.

按照能量均分原理, 二维体系的热力学参数定义为

$$\overline{\varepsilon}_t = \frac{1}{N} \sum \frac{1}{2} m v_i^2 = kT, \quad (1)$$

$$P = nkT \quad (2)$$

式中, T 为温度, P 为压强, n 为数密度, N 为分子数, m 为分子的质量, $\overline{\varepsilon}_t$ 为分子的平均动能, v_i 为第 i 个分子的速度, k 为 Boltzmann 常数. 特别指出, 由于降维, P 的量纲为 $N \cdot m^{-1}$, n 的量纲为 m^{-2} .

首先, 我们推导作为理论基础的分子速度分布函数. 按照 Maxwell-Boltzmann 的“各态历经假说”, 二维体系分子速度的分布函数具有基本形式

$$f(v) = A e^{-\beta(v_x^2 + v_y^2)}, \quad (3)$$

积分常数 A 与 β 由如下条件决定: 即(1) 按分布概率的归一化, 对所有的速度积分速度分布函数应等于 1; (2) 分子动能的平均值应等于 kT . 因此有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} A e^{-\beta(v_x^2 + v_y^2)} dv_x dv_y = 1, \quad (4)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} m (v_x^2 + v_y^2) A e^{-\beta(v_x^2 + v_y^2)} dv_x dv_y = kT, \quad (5)$$

联立方程(4)、(5)可以求解得到: $A = \frac{m}{2\pi kT}$, $\beta = \frac{m}{2kT}$.

从而得到速度分布函数为

$$f(v) = \frac{m}{2\pi kT} e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2)}{2kT}}, \quad (6)$$

由此, 气体分子的速率分布函数为

$$f(v) = \frac{mv}{kT} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \quad (7)$$

可见，二维体系的速度和速率分布函数由于降维已和三维体系不同. 对于硬球分子体系，相对速度的速度分布函数可以写为

$$f(v_r) = \frac{mv_r}{2kT} e^{-\frac{mv_r^2}{4kT}} \quad (8)$$

本文基于以上分布函数得到的二维气体分子体系相关物理量和三维的对比如表 1 所示.

表 1 二维和三维气体分子体系的物理量

物理量	二维	三维
平均速率	$\bar{v} = \sqrt{\frac{\pi kT}{2m}}$	$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$
平均相对速率	$\bar{v}_r = \sqrt{2}\bar{v}$	$\bar{v}_r = \sqrt{2}\bar{v}$
碰撞频率	$\chi = 2\sqrt{2}n\bar{v}\sigma$	$\chi = \sqrt{2}\pi n\bar{v}\sigma^2$
平均自由程	$\lambda = \frac{1}{2\sqrt{2}n\sigma}$	$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi n\sigma^2}$
分子通量	$\psi = \frac{1}{\pi}n\bar{v}$	$\psi = \frac{1}{4}n\bar{v}$
动力黏度	$\mu = \frac{2}{\pi}nm\bar{v}\lambda$	$\mu = \frac{1}{2}nm\bar{v}\lambda$

2 滑移边界条件

气体分子在气固界面处的运动具有不可“穿透性”，气体分子和壁面的动量交换依赖于其间的碰撞频率. 严格地说，分子和壁面间的碰撞频率总是有限的，气体流动和壁面在界面处也总会存在着切向的速度差，即滑移速度(u_s).

如图 1 所示，对于固壁界面附近二维体系气体流动的情况，引入切向动量协调系数 ζ (或称漫反射分数)，它表示入射到壁面的分子损失切向动量的份额. 单位时间单位壁面长度入射分子所携带的切向总动量为

$$I_{in} = \frac{1}{\pi}n\bar{v}\mu u_s + \frac{1}{2}\mu \frac{du}{dz} \quad (9)$$

那么，反射分子所携带的切向总动量可计为

$$I_{out} = (1-\zeta) \left(\frac{1}{\pi}n\bar{v}\mu u_s + \frac{1}{2}\mu \frac{du}{dz} \right) \quad (10)$$

有

$$I_{in} - I_{out} = \mu \frac{du}{dz} \quad (11)$$

利用前面得到的各物理量的表达式，可以得到

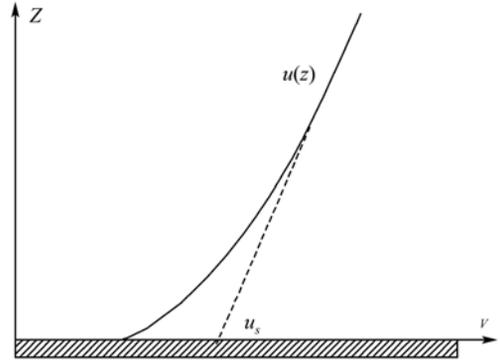


图 1 边界速度滑移示意图

$$u_s = \frac{2-\zeta}{\zeta} \lambda \frac{du}{dz} \quad (12)$$

得到的二维流动体系滑移边界条件和三维 Maxwell 滑移边界条件具有相同的形式. 定义滑移系数 $\alpha = (2-\zeta)/\zeta$ ，其大小取决于分子在固体壁面的漫反射分数，和气体分子与壁面原子的微观作用性质以及壁面粗糙度等因素有关. 当气体分子在固体壁面发生漫反射时，有 $\zeta = 1$ ， $\alpha = 1$.

这样，滑移长度 L_s 可以定义为

$$L_s = \alpha\lambda \quad (13)$$

相对流动体系特征尺度 H 的无量纲滑移长度 $l_s = L_s/H$ 为

$$l_s = \alpha Kn \quad (14)$$

式中， $Kn = \lambda/H$ 为二维体系气体流动的 Knudsen 数，同样反映了气体流动的稀薄程度.

3 2DMD模拟细节

3.1 模拟方法

本文模拟的 Couette 流动系统如图 2 所示. 上下两平行固体壁面由铂(Pt)原子构成，两壁面分别以相同的速率 $U=158 \text{ m/s}$ 沿 x 轴向相反的方向运动，氩气 (Ar) 在两壁面形成的通道内作剪切流动. 流动体系在 x 方向为周期性边界条件. 壁面间距 $H = 0.11 \mu\text{m}$.

分子之间的势能作用均采用 Lennard-Jones(LJ) 势能模型，即

$$V_{LJ} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (15)$$

其中， ϵ 为能量参数， σ 为分子直径， r 为分子之间的距离. 模拟中各参数的选取见表 2.

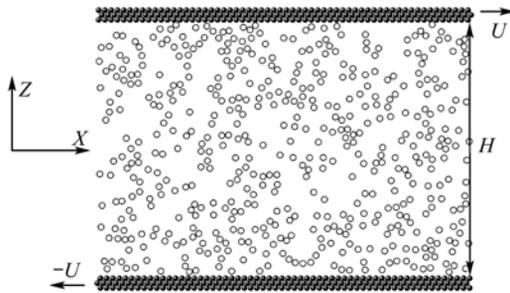


图2 分子动力学模拟 Couette 流系统示意图

表2 LJ 势能模型参数

参数	数值	参数	数值
ϵ_{Ar-Ar}	1.67×10^{-21} J	ϵ_{Pt-Ar}	0.894×10^{-21} J
σ_{Ar-Ar}	3.405×10^{-10} m	σ_{Pt-Ar}	3.085×10^{-10} m

壁面铂原子按面心立方晶格(FCC)[111]面晶格排列并在晶格平衡位置附近作简谐振动, 振动的弹性系数 E 由 Einstein 理论获得, 即

$$E = \frac{16\pi^4 k^2 m^2 \theta^2}{h^2} \quad (16)$$

其中, k 为 Boltzmann 常数, h 为 Prantl 常数, m 为原子质量, $\theta = 180$ K 为 Einstein 温度.

模拟计算中, 分子相空间的演化采用 Leapfrog-Verlet 算法^[12], 分子运动方程的积分时间步长为 $\Delta t = 0.21 \times 10^{-15}$ s, 系统温度控制在 $T = 273$ K. 为减少粒子间相互作用的计算时间, 模拟中主要采取两项措施: (A) 进行势能截断, 取 $r_{cut} = 2.5 \sigma_{Ar-Ar}$, 认为超过该距离的势能作用相对于动能可以忽略不计; (B) 采用 Link-cell 方法, 即利用合适的尺度对系统进行网格划分, 只有在相邻或同一网格内的粒子才计算其相互作用. 模拟计算前 1000000 时间步为系统平衡时间, 统计结果不少于 3000000 时间步.

3.2 计算量分析

我们可以估算对比 2D 和 3D 模拟的计算量. 如果分子动力学模拟采用周期性边界条件的等边长方形系统, 当模拟相同特征尺度和 Kn 的气体 Couette 流动时, 3D 模拟所需计算的粒子数为

$$N_{3D} = \frac{H}{\sigma} \frac{2}{\pi} N_{2D}, \quad (17)$$

$$N_{w3D} = \frac{H}{d} N_{w2D}, \quad (18)$$

其中, N 为气体分子数, N_w 为壁面原子数, σ 为气体分

子直径, d 为相邻壁面原子间距. 可见, 对于尺度较大的流动体系, 3D 模拟相对 2D 要计算非常多的粒子数, 对于本文的模拟体系, 2D 和 3D 模拟粒子数对比如表 3 所示.

表3 相同 Kn 时 2D 和 3D 模拟粒子数对比(壁面原子数 N_w , 2D: 2490, 3D: 1033350)

Kn	0.009	0.017	0.037	0.056	0.072	0.084	0.10	0.116
2D	15000	7000	3000	2000	1500	1200	1000	800
3D	3223840	1504460	644770	429850	322380	257900	214920	171940

采用 Link-cell 方法时, 分子动力学模拟计算粒子受力每步需计算粒子对数量 N_p 为

$$N_{p2D} = \frac{1}{2} \left(9 \frac{N^2}{M^2} + 6 \frac{NN_w}{M^2} \right), \quad (19)$$

$$N_{p3D} = \frac{1}{2} \left(27 \frac{N^2}{M^3} + 18 \frac{NN_w}{M^3} \right), \quad (20)$$

其中, $M \approx H/r_{cut}$ 为模拟体系单方向 cell 数目. 在分子动力学模拟分子受力计算中, 2DMD 模拟因只计算 2 个方向的作用力会比 3DMD 模拟节省 1/3 的计算量. 以本文 3000 个分子的 2DMD 模拟算例为例, 其计算量约为 3DMD 模拟的 1/2000.

4 模拟结果与讨论

4.1 流动速度分布

图 3 为模拟 Couette 流动沿 x 方向的速度分布. $Kn = 0.009 \sim 0.116$, 由稀薄气体动力学理论可知流动处于滑移区. 在我们的 2DMD 模拟中, 气体流动速度在通道中间的大部分区域呈线性分布, 和 Navier-Stokes 连续性方程的预测相同. 但是, 在靠近壁面附件大约为一个分子平均自由程的区域, 速度分布偏离线性分布, 连续性假定不再适用, 这一区域常称为 Knudsen 层. 气体流动和壁面间存在着明显的速度差, 即速度滑移. 速度滑移的大小和 Kn 有关, Kn 越大, 速度滑移也越大.

4.2 滑移边界条件

通过对主流区速度分布的线性区延长, 可以得到不同 Kn 时的滑移长度, 如图 4 所示. 很明显, 无量纲滑移长度和 Kn 成线性关系, 和(14)式揭示的线性滑移规律相符合. 拟合 l_s - Kn 线性关系的斜率, 可以计算气体流动的滑移系数, 本文获得氩气在 273 K 光滑铂表面的滑移系数为 9.14, 和 Yamamoto 在 300 K 时三维分子动力学模拟的计算结果 9.5 比较接近^[13].

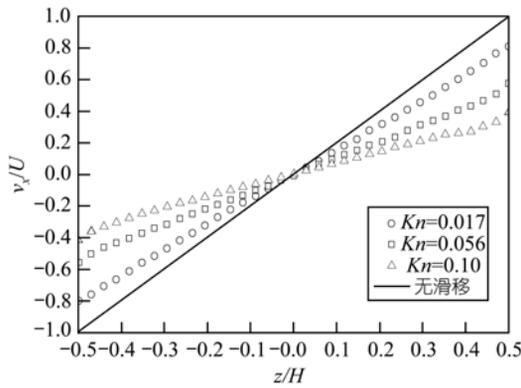


图 3 Couette 流动的速度分布

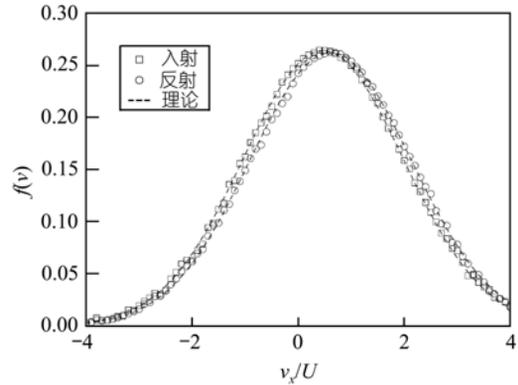


图 5 入射和反射分子的速度分布

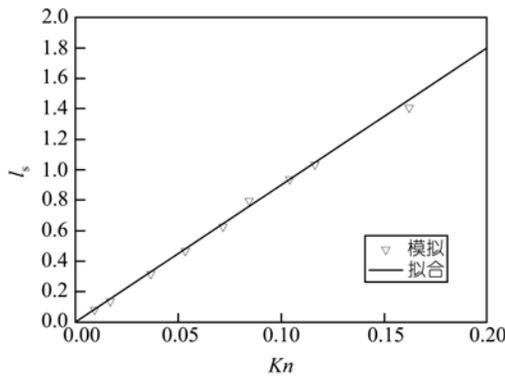


图 4 不同 Kn 时的无量纲滑移长度

4.3 壁面入射和反射分子的速度分布

根据前述气体分子运动理论和动量协调系数的定义,理论上可以得到壁面反射气体分子平行于壁面方向的速度分布函数 $f_{out}(v)$ 为

$$f_{out}(v - u_{out}) = (1 - \zeta)f_{in}(v - u_{in}) + \zeta f_M(v - u_w), \quad (21)$$

式中, f_{in} 为入射分子的速度分布函数, f_M 为漫反射速度分布函数((6)式). u_{out} , u_{in} , u_w 分别为反射分子、入射分子和壁面的宏观速度, 并有 $u_w = (u_{out} + u_{in})/2$. 对于 $Kn = 0.056$ 的二维气体流动, 入射和反射气体分子的速度分布模拟统计和(21)式理论预测的对比如图 5 所示, 二者符合得很好.

5 结论

(1) 以平衡状态气体分子速度分布函数为基础, 得到了二维体系分子平均速率、平均碰撞频率、平均自由程和动力黏度的理论形式.

(2) 推导了二维气体流动体系的滑移边界条件, 它和三维 Maxwell 滑移边界条件具有相同的形式, 但是需要采用二维体系定义的物理参数.

(3) 2DMD 模拟方法应用于微通道滑移流动研究, 在模拟反映的条件下同微尺度气体流动规律一致, 可以减少计算量并增大模拟尺度.

致谢 本工作为国家自然科学基金资助项目(批准号: 10372051).

参 考 文 献

- 1 Ho C M, Tai Y C. Micro-Electro-Mechanical systems (MEMS) and fluid flows. *Annu Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 579~612 [DOI]
- 2 Craighead H G. Nanoelectromechanical systems. *Science*, 2000, 290: 1532~1535 [DOI]
- 3 Gad-el-Hak M. Flow physics in MEMS. *Mec Ind*, 2001, 2: 313~341
- 4 Koplik J, Banavar J R. Continuum deductions from molecular hydrodynamics. *Annu Rev Fluid Mech*, 1995, 27: 257~292 [DOI]
- 5 Thompson P A, Troian S M. A general boundary condition for liquid flow at solid surfaces. *Nature*, 1997, 389: 360~362 [DOI]
- 6 Travis K P, Gubbins K E. Poiseuille flow of Lennard-Jones fluids in narrow slip pores. *J Chem Phys*, 2000, 112(4): 1984~1994 [DOI]
- 7 Cieplak M, Koplik J, Banavar J R. Boundary conditions at a fluid-solid interface. *Phys Rev Lett*, 2001, 86(5): 803~806 [DOI]
- 8 Barker J A, Henderson D, Abraham F F. Phase diagram of the two-dimensional Lennard-Jones system; evidence for first-order transitions. *Physica A*, 1981, 106: 226~238
- 9 冯晓利, 李志信, 过增元. 二维Lennard-Jones系统热力学性质的Monte Carlo模拟. *科学通报*, 2000, 45(7): 775~780 [PDF]
- 10 Bhattacharya D K, Lie G C. Molecular-dynamics simulations of nonequilibrium heat and momentum transport in very dilute gases. *Phys Rev Lett*, 1989, 62(8): 897~900 [DOI]
- 11 Sun M, Ebner C. Molecular dynamics study of flow at a fluid-wall interface. *Phys Rev Lett*, 1992, 69(24): 3491~3494 [DOI]
- 12 Allen M P, Tildesley D J. *Computer simulation of liquids*. New York: Oxford University Press, 1989
- 13 Yamamoto K. Slip flow over a smooth platinum surface. *JSME Int J Ser B*, 2002, 45(4): 788~795

(2003-12-15 收稿, 2004-04-22 收修改稿)