

DOI: 10.3901/JME.2011.15.061

楔形纳米流道内流体压力的分子动力学*

贾 妍 刘 恒 虞 烈

(西安交通大学机械电子及信息系统研究所 西安 710049)

摘要: 应用分子动力学方法研究楔形纳米流道内壁面运行速度及固液间的相互作用势对液体润滑膜压力的影响。研究表明: 轴承系统分离之前, 液体薄膜的压力分布曲线偏离轴承系统正常运转状态下液体润滑油膜的压力分布曲线; 壁面运动速度的增加对模拟区域内最大压力的影响是有一定的局限性, 当运行速度较低时, 随壁面速度的增加润滑薄膜的压力不断增加, 当压力达到最大值后, 不再随着速度的增加而改变; 轴承系统分离之前, 对模拟系统内压力起主导作用的是分子间相互作用势能; 固液间的相互作用势能的强弱, 对模拟区域内压力变化有着重要的影响, 当固液间的作用势相对较弱时, 随着固液间势能作用指数的增强, 模拟区域中最大压力值小范围内下降; 当固液间的作用势相对较强时, 随着固液间势能作用指数的增加, 模拟区域内的压力不断增加。

关键词: 分子动力学 固液作用势 液体薄膜 楔形纳米流道

中图分类号: TH117

Molecular Dynamics of the Pressure of Fluid Film in Wedge Nanochannels

JIA Yan LIU Heng YU Lie

(Institute of Mechatronics and Information System, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049)

Abstract: Molecular dynamics method is applied to studying the influence of velocity and solid-liquid potential on the pressure of fluid film in wedge nanochannels. The results indicate that the pressure profiles show strong deviations from one of classical fluid film before the separation of bearing from bearing pedestal. The impact of velocity of solid wall on the maximum pressure in the simulation region is limited. For slow velocity, the pressure increases with the increase of velocity. After the pressure in the simulation region reaches the maximum, it will no longer increase with the increase of velocity. Before the separation of bearing from bearing pedestal, the pressure of simulation box is determined by the potential energy contribution. The strength of interaction potential between the liquid and the solid has important influence on the pressure variation in the simulation area. For relatively weak interaction potential, with the enhancement of potential interaction index, the maximum pressure value in the simulation area decreases in a small range. For relatively strong interaction potential, with the increase of potential interaction index, the pressure in the simulation area keeps increasing.

Key words: Molecular dynamics Solid-liquid potential Fluid film Wedge nanochannels

0 前言

轴承系统是大多数机械设备中比较典型的装置。宏观领域中轴承系统中油膜润滑的动态特性可以通过纳维—斯托克斯(N-S)方程或者雷诺方程解决, 并且其研究理论已经逐渐趋于成熟。随着 MEMS/NEMS 技术的飞速发展, 特别是微纳尺度机

械加工技术的提高^[1-2], 分子发动机及纳米发动机等^[3-4]微型精密器件的出现, 其系统尺寸不断减小, 精度和运转速度不断提高, 影响润滑薄膜特性的各种作用力的相对重要性发生了改变。因此, 要求人们对润滑薄膜具有潜在的承载能力重新认识, 实现以纳米膜厚为特征的薄膜润滑状态^[5]。

THOMPSON 等^[6-8]模拟研究了两种不混合流体的流动, 研究发现无边界滑移条件在接触线附近不成立; 通过改变固体壁面的势能作用参数研究了液体在纳米流道内的流动特性, 分别获得了滑移, 无滑移和负滑移现象, 并通过液体的密度分布曲线得

* 国家重点基础研究发展计划(973 计划, 2007CB707705, 2007CB707706)和国家自然科学基金(50635060)资助项目。20100819 收到初稿, 20110221 收到修改稿

出固体壁面附近液体的统计密度成层状的空间涨落分布；对纳米流道内的流体进行 Couette 流动研究，发现存在一个临界速度剪切率。在临界速度剪切率以下，滑移长度仅和流体与壁面的作用力有关；高于临界速度剪切率时，滑移长度迅速增大。PRIEZJEV 等^[9]研究了纳米通道宽度为 24.58 nm 的纳米流道内液体的流动，发现对于比较强的流体与固体壁面之间作用力，滑移长度随着速度剪切率线性增加；当液体与固体壁面之间的相互作用力较弱时，速度滑移长度随剪切率开始线性增加然后非线性剧烈增加。HUMMER 等^[10]的研究显示，纳米流道内的液体的流动是间歇的，类似于活塞流。LUIS 等^[11]对楔形流道内液体特性进行了研究，结果表明，楔形纳米流道会引起流道内液体压力的分布偏离两固体壁面平行状态下流道内压力的均匀分布曲线，而呈不均匀分布状态。ITSUO 等^[12-14]利用液体活塞模型，研究了液体在碳纳米管内的流动，结果显示，模拟期间模拟区域内液体的合适密度能被适当的获得；当碳纳米管的尺寸较小时，液体的流动速度与预期的发生了偏离；在碳纳米管内部流体的速度分布出现了差异，靠近壁面的液体的流速小于内部的流速，其主要原因是由于液体与碳纳米壁面之间的相互作用引起了液体流速的改变，离壁面越近壁面对液体流速的影响越大；DHONDI 等^[15]研究了剪切稀释聚合体流体在较长纳米流道内的混合，模拟显示流体的浸润性会引起纳米流道内液体与固体壁面界面处滑移长度的改变，反过来滑移长度的改变引发液体的混合。曾凡林等^[16]通过对纳米尺度下润滑薄膜特性的研究发现，当润滑剂达到纳米尺度时，呈现出强烈的尺寸效应。主要表现为润滑剂的内部出现分层和层间滑移现象。而且这种现象和润滑剂的组成无关，是一种普遍现象。罗彬宾等^[17]运用分子动力学模拟的方法研究了超薄膜的摩擦特性与微观结构的关系，结果表明摩擦力随着固液比的增大而增大；当壁面原子与液体原子的质量比增大时，会造成固液比缓慢上升，但摩擦力却随之下降，固液间滑移长度的增大是造成这一现象的主要原因。

以上关于微纳尺度下液体特性的文献主要研究轴承系统正常工作状态下液体润滑薄膜特性，对于轴承系统分离前，润滑薄膜特性的研究却很少涉及。随着轴承系统运转速度的提高，精度的增加，以前轴承系统运转过程中一些可以忽视的问题，如轴承分离过程中出现的振动、噪声、打滑以及分离的失败对轴承系统的正常运转产生的不良影响，就会越来越明显。但是，目前宏观液体润滑理论中，没有涉及关于轴承系统分离前润滑薄膜特性的研

究，试验研究中关于轴承系统分离前出现的一些现象由于客观实际中轴承系统分离的时间极短被忽视。鉴于理论研究和试验研究中所遇到的难以克服的困难，分子动力学模拟就成为一种被寄予厚望的研究方法，为进一步加深宏观现象的理解提供新的理论依据。

本文采用分子动力学的方法主要研究轴承系统分离前壁面运行速度及固液间的相互作用势对润滑薄膜压力的影响。与以往研究不同，本次模拟中两固体壁面处于非平行状态。

1 模拟系统与基本原理

1.1 模拟系统

模拟系统由固体壁面和壁面间的液体分子构成。轴承系统分离之前，轴承与轴承座相接触，构成的模拟区域可以简化成三角形，如图 1 所示。方形实心为壁面固体分子，圆形空心为液体分子，当下壁面以一定的速度运动时，模拟区域内的液体形成剪切流动。图 1 中 A 为模拟区间，模拟过程中，此区间内的分子发生相互作用； B 为外部分子储存库，模拟过程中不参与 A 中分子的相互作用。随着下壁面的运动，仅当 B 区域内的分子插入到 A 区域后成为模拟区域内的分子，才能参与模拟中分子间的相互作用。模拟过程中，当 A 区域的分子离开 A 区域进入 B 区间时，分子此时不再对 A 区域中的分子产生作用。

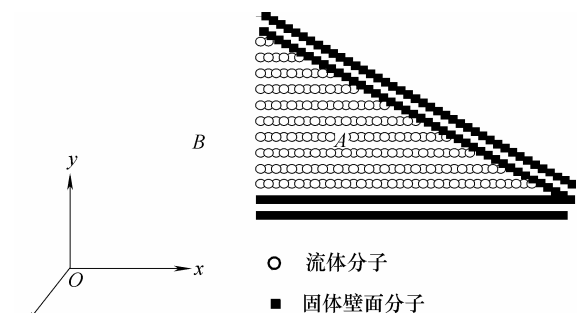


图 1 轴承系统分离前模拟系统示意图

模拟过程中边界条件和分子插入原则按照 ITSUO 等^[12-14]应用分子动力学方法研究液体活塞作用下碳纳米管内液体的流动特性和水的射流现象时选取的边界条件和分子插入原则。仅 z 方向采用周期性边界条件。插入分子的速度按照初始温度根据麦克斯韦—玻尔兹曼分布随机确定；插入分子的位置在采取随机确定的同时还要遵循以下的原则。

(1) 当初始条件下模拟区域内的分子数确定时，模拟区域以外部分液体密度为初始条件对应的

液体密度，靠近入口端处单层分子晶格中所包含的分子的数目即为初始条件下尝试插入的分子数目。并且尝试插入的数目随着模拟区域中分子数目和壁面运动速度的变化而变化。当模拟区域的分子数增加时，可以认为外部的液体分子数下降，尝试插入的分子数减小；当模拟区域内的分子数小于初始条件对应的分子数时，外部液体分子数上升，尝试插入的分子数增加。每时间步尝试插入的分子数遵循以下的方式

$$N_{at} = v_0 \frac{N_{adm} (N_{max} - N_t)}{N_{max} - N_{int}} \quad (1)$$

式中 N_{at} ——每时间步尝试插入的分子数
 v_0 ——下壁面运动速度
 N_{adm} ——初始状态外部区间每时间步长尝试插入分子数
 N_{max} ——模拟区间最大容纳分子数
 N_t ——模拟区间瞬时分子数
 N_{int} ——初始状态模拟区间内能容纳分子数
 模拟区域最大容纳的分子数 N_{max} 根据 YAO^[18]

提出的方法确定。当一定体积内的分子按照密排面心立方晶格排布时，此时固定体积内的分子数最大。

(2) 分子的尝试插入过程中还应满足 MIHALY^[19]提出的分子插入原则。当液体分子从外部区域尝试进入模拟区域时，只有当模拟区域存在一个液体分子所占的空间时，液体分子才能插入模拟区域成为模拟区域内的分子。

为了研究模拟区域内液体沿 x 方向不同层面特性的变化，将模拟区域沿 x 方向划分成若干个子区域。由于模拟中两固体壁面处于非平行状态，为了方便各小区域内压力的比较，小区域的划分遵循等体积原则

$$V_l = \frac{d_x (d_y + h) d_z}{2n} \quad (2)$$

式中 d_x ——模拟区域沿 x 方向尺寸
 d_y ——模拟区域沿 y 方向尺寸
 d_z ——模拟区域沿 z 方向尺寸
 h ——两固体壁面小端的距离
 n ——划分小区域的个数
 各个层面压力 p 计算公式^[11]

$$p = \rho(l)k_B T - \frac{1}{V_l} \sum_{i,j} \frac{x_{ij}^2 du}{r_{ij} dr_{ij}} \quad (3)$$

式中 p ——垂直壁面的压力分量
 $\rho(l)$ ——小区域中液体分子的密度
 k_B ——Boltzmann 常数
 T ——模拟区域的温度

V_l ——小区域的体积

u ——分子间的相互作用势能

x_{ij} ——第 i 个分子与第 j 个分子之间距离沿 x 方向分量

r_{ij} ——第 i 个分子与第 j 个分子之间的距离

由式(3)可以看出，对润滑薄膜压力起作用的分两个部分：一部分为液体分子动能对压力的作用效果，其表达式为

$$p^k = \rho(l)k_B T \quad (4)$$

另一部分为分子间的相互作用势能对压力的作用效果，其表示式为

$$p^p = \frac{1}{V_l} \sum_{i,j} \frac{x_{ij}^2 du}{r_{ij} dr_{ij}} \quad (5)$$

1.2 势能作用模型

模拟系统中的液体采用液态氩，液态氩分子间的相互作用势采用 Lennard-Jones(LJ)

$$u(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (6)$$

式中 σ ——分子特征长度，也是分子的直径

ϵ ——分子间相互作用强度的能量特征值

计算中液态氩的模拟参数：玻尔兹曼常数 $k_B=1.381 \times 10^{-23}$ J/K，系统的温度 $T=132$ K，氩原子的质量 $m=6.96 \times 10^{-26}$ kg，数密度 $\rho=0.8$ ^[8]。为了方便计算，整个模拟过程采用量纲一参数，具体约化单位处理见下表。

表 分子动力学模拟中物理量的约化单位

物理量	表达式	数值	单位
长度	σ	0.34	nm
能量	ϵ	1.65×10^{-12}	nJ
质量	m	6.69×10^{-26}	kg
时间	$\tau=(m\sigma^2/\epsilon)^{1/2}$	2.16	ps
温度	ϵ/k	119	K
速度	σ/τ	157	$m \cdot s^{-1}$
加速度	σ/τ^2	0.727	$pm \cdot s^{-2}$
压力	ϵ/σ^3	42.2	MPa
数密度	$1/\sigma^3$	2.54×10^{28}	m^{-3}

为反映液体与固体之间不同作用势能对液体润滑膜的影响效果，分子动力学模拟选取的液体和固体壁面之间的 LJ 相互作用势为^[20]

$$u_{sl} = 4c\epsilon_{sl} \left[\left(\frac{\sigma_{sl}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{sl}}{r} \right)^6 \right] \quad (7)$$

式中， u_{sl} 为液体分子和固体分子间的 LJ 势能， ϵ_{sl} 为液体分子和固体分子之间的作用势能， σ_{sl} 为液体分子和固体分子之间的距离参数， c 用来调整液体

分子和固体壁面之间的相互作用效果,即浸润性,其意义是指液体分子与固体壁面分子之间的作用力相对于距离相等的液体分子和固体分子作用力的倍数, c 越大则表示液体分子和壁面固体分子之间的作用势能越强, $c=1$ 则表示液体分子和固体分子之间的势能作用。本文中为了方便计算选取固体分子的作用势能和距离参数等于液体分子的作用势能和距离参数

1.3 计算方法

根据已知的温度确定分子的初始速 v_0 , 方向随机给出。当粒子初始位置, 速度和粒子上的作用力确定后, 根据牛顿运动定律, 液体分子的运动方程为 $F_i=ma_i (i=1,2,\dots,N)$ 。通过积分运动方程, 可以得出任意时刻液体分子的速度和位置, 积分过程选用蛙跳法^[21-23]。积分过程中的时间步长 $\Delta t=0.005\tau$, 为节约计算时间, 在计算分子间作用力时, 取截断半径 $r_c=2.5\sigma$, 即当两个粒子间距离大于截断半径时, 其相互作用可以忽略不计。

模拟过程中首先, 必须对系统进行初始平衡处理, 即两个固体壁面静止不动, 使系统趋于稳定, 此过程大约需要运行 100 万时间步; 然后, 通过改变作用条件进行具体的模拟, 模拟结果大约需要 50 万时间步。分子动力学模拟过程中会产生一系列的瞬态构型, 每隔一定的时间步长将模拟系统的瞬态构型存储起来, 从而就能给出模拟过程的详细描述。模拟中关于压力分布采用分层统计方法。

1.4 模拟区域的确定

由于模拟区域内的分子数是根据选取液体的密度确定, 在保持选取液体的密度及其他参数相同的条件下, 通过对不同流道宽度及模拟区域的研究, 其模拟结果, 如图 2 所示。从图 2a 可以发现, 虽然通过改变 x 方向的尺寸可以改变轴承系统的接触状态以及轴承系统的最大压力值, 但轴承系统内部润滑薄膜的压力分布趋势基本相同。图 2b 中, 同时改变 x 方向及 y 方向的尺寸使得轴承系统构成的封闭区域的夹角近似相等, 此时润滑薄膜的压力分布变化趋势一致, 同时最大压力值比较接近。分子动力学模拟本身即使在同一问题的研究上也仅限于定性的相似, 而很难从定量上取得同一的结果。因此, 在模拟过程中为了节约运行时间提高运算效率, 在表明问题的基础上尽量选择模拟系统内分子数较少的系统进行研究。

本文中选取三角形模拟系统入口端流道的宽度 9.35σ , 系统在 x 和 z 方向的计算域尺寸为 $34.85\sigma \times 5.1\sigma$, 该系统包含 570 个液态氩分子和 492 个固体分子。初始时刻流体分子按照面心立方晶格(fcc)结

构排列; 分子间的距离按照给定的密度值确定。

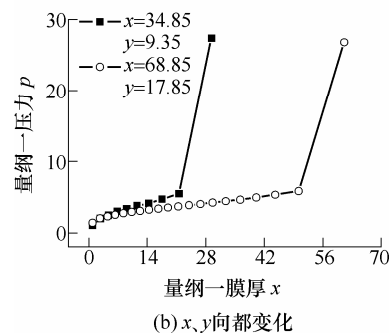
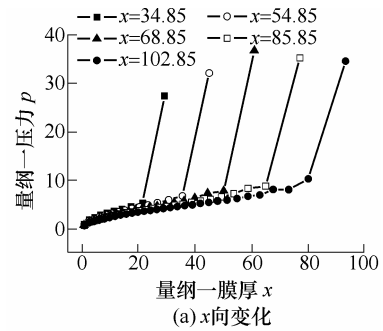


图 2 不同模拟系统压力与膜厚关系图

2 结果与讨论

2.1 壁面运行速度对润滑薄膜压力的影响

为研究轴承系统分离之前, 轴承运转速度不断增加过程中液体流动特性的变化情况, 本文分别选取固体壁面运行的量纲一速度 v 为: 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8 和 2.0 的情况进行模拟, 其中液体与固体间的势能作用指数 $c=1.0$, 并且前一阶段模拟结果中分子的位置和速度, 作为下一阶段模拟的初始位置和速度, 使模拟过程具有一定的连续性。

为研究模拟系统沿 x 方向的压力分布, 在确保小层面数目能定性反映润滑薄膜压力分布特性, 并减小个别分子不规则运动造成的统计误差的基础上, 将模拟区域沿 x 方向划分为 10 个体积大小近似的小层面, 分别计算各个小层面的平均压力。

沿 x 方向各个层面压力随壁面运行速度变化的曲线, 如图 3 所示。可以看出, 轴承系统分离之前压力在模拟区域内的分布曲线与轴承系统正常工作状态下宏观领域内已经得到的液体润滑薄膜内压力的分布曲线^[24], 相比较存在着较大的差异。无论高速还是低速运行状态下, 沿 x 方向压力不断增加, 值得注意的是在靠近封闭端的第 10 层面内压力值发生了突变, 其值远远大于其他层面内的压力值, 这种巨变的压力值有可能是引起轴承系统发生分离

的重要因素之一。

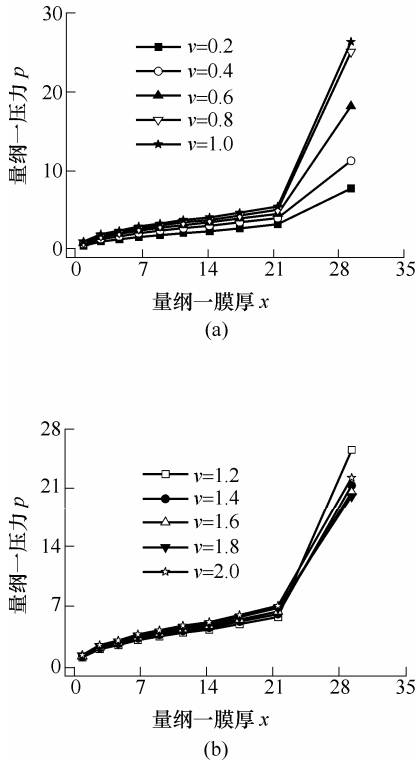


图 3 沿 x 方向压强随速度变化曲线

模拟区域内最大压力随时间的变化曲线，如图 4 所示。当 $v < 1.0$ 时，模拟区域内的最大压力随固体壁面运行速度的增加迅速从 7.8 增加到 26.3 左右，其增加的幅度远远大于其他 9 个层面内压力随壁面运行速度的增加幅度。其主要原因是，由于轴承系统开始运动时，整个模拟区域内的分子密度基本一致，随壁面的运动可能进入模拟区域的分子数较多，靠近出口端附近由于封闭端的存在使得进入此区域的液体分子的运动相对于其他层面内的液体分子的运动受到更多的限制，更容易出现分子的积累，使分子间的距离减小。由于分子间的作用势为 LJ 势，在此势能的作用下，随着分子间距离的减小，其相互作用势能会迅速地增加。因此，在靠近封闭端附近出现了压力迅速增加的现象。

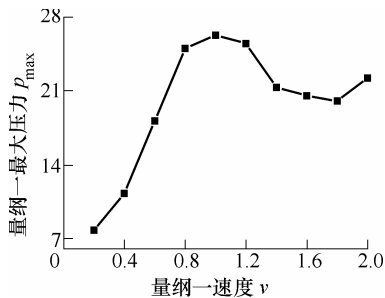


图 4 最大压力随速度的变化曲线

当 $v > 1.0$ 时，模拟区域中前 9 个层面内压力随壁面运行速度的增加依然保持小幅度增加，并且其

值依然远远小于最大压力值，但此时最大压力值不再随着壁面运行速度的增加而增加，而是出现了上下波动的趋势，即系统达到了动态平衡。

目前，虽然在关于轴承系统液体润滑薄膜的研究范围内很难找到可以直接对比的试验数据和数值模拟结果，但已有文献中关于气泡破裂的研究^[25]表明随着时间的变化气泡不断减小并发生形状的改变，气泡溃灭时，对壁面产生巨大的压力作用。这种能量不断积累引发的瞬时释放现象说明物质体系内部产生的强大能量会使物质体系现有的存在状态发生改变，达到由量变到质变的飞跃。虽然，气泡的破裂与轴承系统分离之间表面上没有直接的联系，但在系统能量积累和释放的本质却非常相似，气泡溃灭的过程本身就是一个能量不断积累到瞬时释放的过程，轴承系统分离之前由于轴承与轴承座之间相互接触形成一个封闭端面，随着下壁面的不断运动，外部液体分子有可能不断进入到模拟区域内转化为模拟分子，随着模拟区域内液体分子的不断积累，能量不断积累，当能量积累到一定数值，需要释放的时候，轴承系统接触的存在状态就有可能发生改变，出现分离现象。

从以上分析可以得出这样的结论，首先，轴承系统分离之前模拟区域内液体薄膜的压力分布曲线偏离轴承系统正常运转状态下液体润滑油膜的压力分布曲线；其次，壁面运动速度的增加对模拟区域内最大压力的影响是有一定的局限性，并非随着所有壁面速度的增加不断增加，而是存在一个压力的最大值，达到这个最大值以后，压力不再随着速度的增加而增加，达到动态平衡；最后，模拟区域内压力的最大值可能对轴承系统的分离起着重要的作用，当液体润滑薄膜产生的最大压力小于轴承本身的重力时，轴承系统分离失败，轴承的正常运转受阻，此时如果仅靠增加轴承的运动速度并不能改善润滑薄膜的最大压力，即不能仅靠增加壁面的运行速度改变轴承的工作状态；当液体润滑薄膜产生的最大压力大于轴承本身的重力时，轴承系统的接触状态发生改变，轴承系统进入另一种运行状况。

从各层面压力的计算公式(3)可以知道模拟系统内各个层面内的压力不但受分子动能的影响而且受到分子间相互作用势能的影响。对于动能和势能对压力作用效果的研究，有助于从微观理论上对模拟区域内压力变化的本质进行深入的理解。

模拟区域内分子动能对压力的作用效果曲线，如图 5 所示。当 $v < 1.0$ 时，分子动能对压力的影响效果随壁面运动速度的增加小幅度的均匀增加，并且沿 x 方向不同层面内动能对压力作用效果增加的

趋势基本一致,在相同壁面运行速状态下,沿 x 方向动能对压力作用效果不断增加,仅仅在靠近封闭端的第 10 层面内其值稍有下降;当 $v > 1.0$ 时,前 9 层面内动能对压力的作用效果随壁面运行速度的增加依然保持小幅度均匀增加,但靠近封闭端的第 10 层面内动能对压力的影响效果随壁面运行速度的增加迅速增加,其增加幅度远远大于低速时动能对压力作用效果的增加幅度。因此,模拟区域内动能对压力的作用效果随壁面运行速度的增加不断增加,尤其在高速的运行状况下尤为明显。

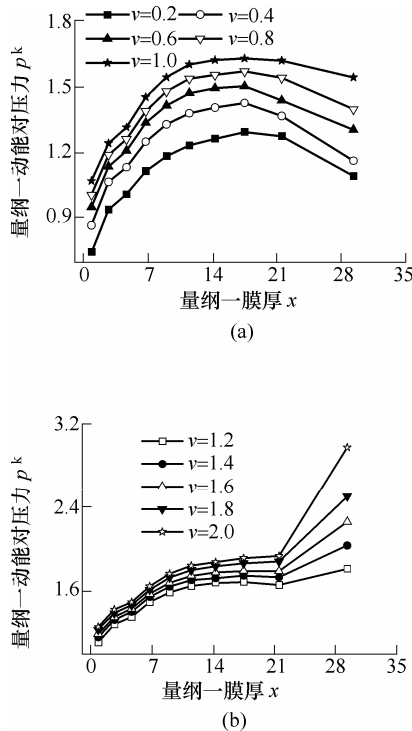


图 5 动能对压力作用效果曲线

模拟区域内分子间相互势能对压力的作用效果曲线,如图 6 所示。比较图 3 与图 6 可以明显看出,分子间相互作用势能对压力的作用效果与压力的分布曲线基本一致。同时,对比分子动能和分子间作用势能对压力的影响效果曲线,仅靠近入口区域的第 1 层面内动能对压力的作用效果大于势能对压力的作用效果,除此之外其他各层面内均表现为势能对压力的作用效果大于动能对压力作用效果,尤其在压力最高的第 10 层面内,势能的作用效果远远大于动能作用效果。

综上所述,轴承系统分离之前,对模拟系统内压力起主导作用的是分子间相互作用势能,这与前人的研究结果相一致^[26-27]。这也是下壁面速度的增加不会导致压力的持续增加,而是存在一个极值的重要原因。由于润滑薄膜压力其主要作用的是液体分子间的相互作用势能部分,对于确定的体积下能容纳液体分子的数目存在最大值,当进出分子的数

目达到动态平衡时,进入的分子数目与逃离的液体分子数目基本一致时,润滑薄膜的压力保持动态平衡达到最大值。同样,也是由于分子间的强大相互作用势引发了轴承系统运行状态的改变。

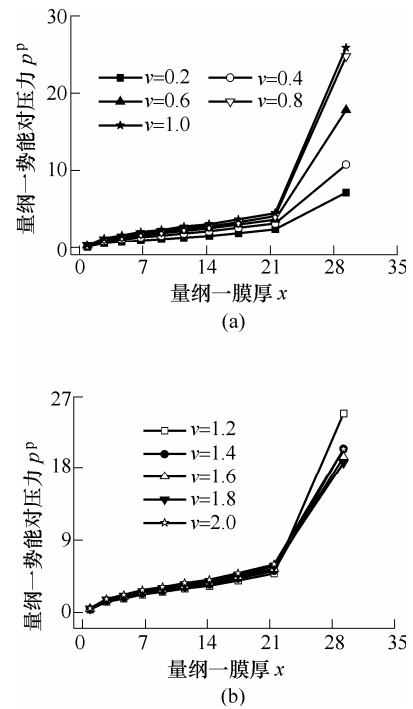


图 6 势能对压力作用效果曲线

2.2 固液作用势对润滑薄膜压力的影响

为研究轴承系统分离之前,固液间相互作用势对润滑薄膜压力的影响,分别选取 $c=0.2, 0.5, 0.7, 0.9, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0$ 八种不同的固液势能作用指数进行模拟,模拟过程中固体壁面的运行速度均为 1.0。

沿 x 方法将模拟区域划分为 10 小的层面采取分层统计。由于轴承系统分离之前,轴承与轴承座壁面接触构成的模拟区域,在两个固体壁面的接触处形成封闭端,在封闭端附件固体分子较多。因此,在靠近此模拟区域内固体与液体间的相互作用势能指数对该模拟区域内液体流动特性的影响尤为显著。

不同固液作用势下沿 x 方向液体润滑薄膜的压力分布,如图 7 所示。在靠近封闭端附近的模拟区域出现了液体压力急剧增长的现象,形成了压力远远大于其他层面的高压区域。高压区域内液体压力的变化与固体与液体间的相互作用势能指数有着密切的关系。

当 $c < 1.0$ 时,固体壁面与液体的作用势相对较弱,此时随着固液间势能作用指数的增强,模拟区域中最大压力值小范围内下降;当 $c=2.0$ 时,模拟区域内靠近封闭端的高压区域内的最大压力发生了重

大的改变,其值迅速大幅度下降,且远远小于 $c < 1.0$ 时的最高压力值,但此时其他层面内压力的值增大;当 $c > 2.0$ 时,固体与液体间的相互作用势相对较强,随着固液间势能作用指数的增加,模拟区域内的压力不断增加,但高压区域内压力的最大值小于固体与液体之间为疏水性时的最大压力值,其他层面内的压力随固液间势能作用指数的增强而增大。

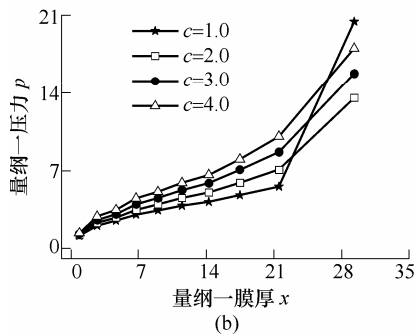
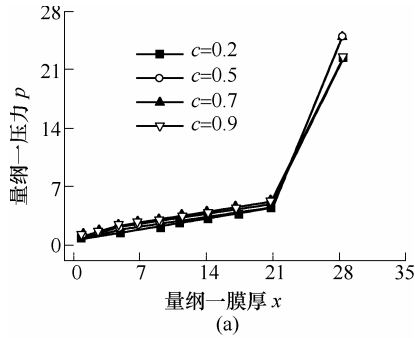


图7 沿 x 方向的压力分布曲线

综上所述,固体与液体间的相互作用势能的强弱对模拟区域内压力变化有着重要的影响。尤其,对模拟区域中高压区域内压力最大值的影响最为显著。封闭端附近压力的最大值,不是简单地随着固液之间相互作用指数的改变而改变,而是受固体分子和其他区域内液体分子综合作用的结果,使得固液相互作用时存在一个综合作用对压力影响最小的势能作用指数。当轴承系统采取的润滑液与固体壁面间的相互作用势处于最高压力最小时对应的势能作用指数附近时,可能由于最高压力不足而使轴承系统的正常分离受到影响,给轴承系统的正常工作带来不便。因此,在实际工作中选取润滑液时应当考虑润滑液与轴承壁面间的相互作用势能指数,尽量避免由于固液间势能作用指数引发的润滑薄膜压力下降造成的麻烦。

2.3 不同固液作用势下最大压力随时间变化

通过以上的研究获得固液之间的相互作用势能指数对模拟区域内的最大压力有着重要的影响,并且液体润滑薄膜的最大压力对轴承系统的分离有

着重要的意义。因此,这里主要考虑不同固液相互作用势能指数下模拟区域内最大压力随时间的变化趋势。

轴承系统分离之前,不同固液相互作用势能指数下模拟区域内最大压力及所对应的温度随时间的变化曲线,如图8、9所示。

当其他条件相同时,仅仅由于固液间的势能作用指数的差异,会引起模拟区域内液体润滑油膜压力经历不同的时间到达最大值,即影响轴承系统分离的时间。

当 $c=0.2$ 和 $c=0.5$ 时,液体与固体间的相互作用较弱,模拟系统内的压力大约在 $t=3\ 000$ 时,达到最大值,其所对应层面的温度随着压力值的增加不断降低,最后达到动态平衡。达到动态平衡之前,模拟区域内压力的增加幅度较大。

当 $c=0.7$ 和 $c=0.9$ 时,液体分子间的相互作用势能与固液间的相互作用势能大致相等,此时模拟系统内液体的压力大约在 $t=2\ 000$ 时达到最大值,模拟区域内压力随时间的变化较为平稳。模拟区域内最大压力所对应的层面内温度随压力的增加,没有出现较大的变化。

当 $c=1.0$ 时,液体分子间的相互作用势能与固液间的相互作用势能相等,此时模拟系统内液体的压力大约在 $t=3\ 500$ 时达到最大值,在到达动态平衡之前,模拟区域内压力随时间增加基本成线性增加。该层面内的温度随压力的增加小幅度的增加。

当 $c=2.0$, $c=3.0$ 和 $c=4.0$ 时,液体与固体间的相互作用比较强,此时模拟区域内的压力在极短的时间内达到动态平衡,但平衡后模拟区域内最大压力的震荡范围较大,对固体壁面会形成较大的冲击,且最大压力值相对较低。同时,在极短的时间内,随着模拟区域内压力的增加靠近封闭端的温度急剧上升,会使该区域内润滑薄膜的特性由于温度的急剧增加而受到严重的影响。

综上所述,一般情况下轴承系统内的润滑液应选择固液间相互作用势能接近并且小于液体分子间的相互作用势能,这样不但轴承系统内润滑薄膜的压力达到最大值的时间相对较短,最大值相对较大,而且压力随时间的增加比较平稳的增加,减小液体对固体壁面的冲击作用,同时,该层面内由于压力增加引起的温度改变范围较小;当轴承系统的自身重量较轻,分离需要的压力较小,又需要迅速分离时,可以选取固液相互作用势能指数较强的液体作为润滑液,但此时应充分考虑由于该层面温度急剧升高对润滑液的影响效果。

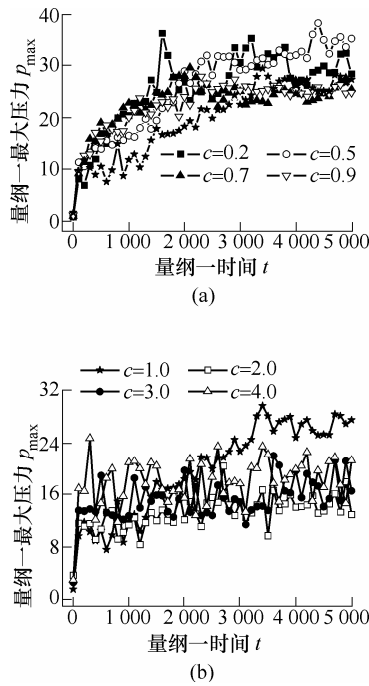


图 8 最大压力随时间的变化曲线

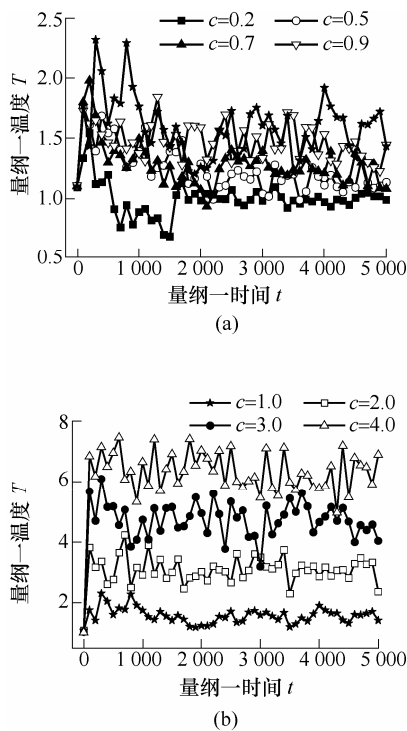


图 9 最大压力对应温度随时间的变化曲线

3 结论

(1) 轴承系统分离前, 由于模拟区域存在封闭端, 液体薄膜的压力分布曲线偏离轴承系统正常运转状态下液体润滑薄膜的压力分布曲线, 对模拟系统内压力起主导作用的是分子间相互作用势能。

(2) 壁面运动速度的增加对模拟区域内最大压力的影响是有一定的局限性, 当运行速度较慢时,

随壁面速度的增加润滑薄膜的压力不断增加, 当压力达到最大值后, 不再随着速度的增加而改变。

(3) 固液间的相互作用势能的强弱, 对模拟区域内压力变化有着重要的影响, 当固液间的作用势相对较弱时, 随着固液间势能作用指数的增强, 模拟区域中最大压力值小范围内下降; 当固液间的作用势相对较强时, 随着固液间势能作用指数的增加, 模拟区域内的压力不断增加, 但高压区域内压力的最大值小于固液间的作用势相对较弱时的最大压力值, 其他层面内的压力随固液间势能作用指数的增强而增大。

(4) 固液间的相互作用势能接近并且小于液体分子间的相互作用势能, 轴承系统内润滑薄膜的压力达到最大值的时间相对较短, 最大值相对较大, 压力随时间的增加比较平稳的增加, 减小液体对固体壁面的冲击作用; 当固液相互作用势能指数较强时, 润滑薄膜达到最大压力值的时间极短但最大压力值较小, 且液体的温度会急剧升高。

参 考 文 献

- [1] HUANG Zhigang, GUO Zhongning, CHENG Xing. Molecular dynamics simulation of polishing process based on coupling vibrations of liquid[J]. Chinese Journal of Mechanical Engineering, 2006, 19(1): 19-24.
- [2] LI Xiaoping, CAI Minbo. Nanoscale cutting of monocrystalline silicon using molecular dynamics simulation [J]. Chinese Journal of Mechanical Engineering, 2007, 20(5): 8-11.
- [3] KOUMURA N, ZIJLSTRA R W J, VAN D R A. Light-driven monodirectional molecular rotor[J]. Nature, 1999, 401(10): 1-4.
- [4] FENNIMORE A M, YUZVINSKY T D, HAN W Q. Rotational actuators based on carbon nanotubes [J]. Nature, 2003, 424: 408-410.
- [5] 温铸. 纳米摩擦学研究进展[J]. 机械工程学报, 2007, 43(10): 1-8.
- [6] WEN Shizhu. Progress of research on nanotribology [J]. Chinese Journal of Mechanical Engineering, 2007, 43(10): 1-8.
- [7] THOMPSON P A, ROBBINS M O. Simulations of contact-line motion: Slip and the dynamics contact angle[J]. Physical Review Letters, 1989, 63(7): 766-769.
- [8] THOMPSON P A, ROBBINS M O. Shear flow near solids: Epitaxial order and flow boundary conditions[J]. Physical Review A, 1990, 41(12): 6830-6837.
- [9] THOMPSON P A, TROIAN S M. A general boundary

- condition for liquid flow at solid surface[J]. *Nature*, 1997, 389: 360-362.
- [9] PRIEZJEV N V. Rate-dependent slip boundary conditions for simple fluids[J]. *Physical Review E*, 2007, 75: 051605.
- [10] HUMMER G, RASAIHA J P. Water conduction through the hydrophobic channel of a carbon nanotube[J]. *Nature*, 2001, 414, 188.
- [11] LUIS G C, FEMANDO B. Liquids confined in wedge shaped pores: Nonuniform pressure induced by pore geometry[J]. *Journal of Chemical Physics*, 2004, 120(24): 11355-11358.
- [12] ITSUO H, AKIHIRO N. Fluidized piston model for molecular dynamics simulations of hydrodynamic flow[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2006, 14(5): s9-s20.
- [13] ITSUO H, AKIHIRO N. Flow structure of water in carbon nanotubes: Poiseuille type or plug-like?[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2006, 124: 144708 (1-9).
- [14] ITSUO H, AKIHIRO N. Hydrogen bond dynamics and microscopic structure of confined water inside carbon nanotubes[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2006, 124: 174714(1-9).
- [15] DHONDI S, PEREIRA G, HENDY C. Molecular dynamics simulations of polymeric fluids in narrow channels: Methods to enhance mixing[J]. *Physical Review E*, 2009, 80(3): 036309 (1-12).
- [16] 曾凡林, 孙毅. 纳米薄膜润滑及其改性的分子动力学模拟[J]. *机械工程学报*, 2006, 42(7): 138-143.
ZENG Fanlin, SUN Yi. Molecular dynamics simulation of nano-scale thin film lubrication and its modification [J]. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*, 2006, 42(7): 138-143.
- [17] 罗彬宾, 李祥, 陈云飞. 超薄水膜剪切流的分子动力学模拟[J]. *机械工程学报*, 2007, 43(9): 119-121.
LUO Binbin, LI Xiang, CHEN Yunfei. Molecular dynamics simulation of couette flow for ultra-thin water films[J]. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*, 2007, 43(9): 119-121.
- [18] YAO J. Monte Carlo simulation of the grand canonical ensemble[J]. *Molecular Physics*, 1982, 46(3): 587-594.
- [19] MIHALY M. A cavity-biased (T,V, μ) Monte Carlo method for the computer simulation of fluids[J]. *Molecular Physics*, 1980, 40(4): 901-906.
- [20] 曹炳阳. 速度滑移及其对微纳尺度流动影响的分子动力学研究[D]. 北京: 清华大学, 2005.
CAO Bingyang. Molecular dynamics simulation of velocity slip and its effect on micro-and nanoscale flow[D]. Beijing: Tsinghua University, 2005.
- [21] FRENKL D, SMIT B. Understanding molecular simulation from algorithms to applications[M]. California: Academic Press, 2002.
- [22] ALLEN M P, TILDESLEY D J. Computer simulation of liquids[M]. New York: Oxford University Press, 1987.
- [23] RAPAPORT D C. The art of molecular dynamics simulation[M]. New York: Cambridge University Press, 2004.
- [24] 周桂如, 马骥, 全永昕. 流体润滑理论[M]. 杭州: 浙江大学出版社, 1990.
ZHOU Guiru, MA Ji, QUAN Yongxin. Fluid film lubrication[M]. Hangzhou: Zhejiang University Press, 1990.
- [25] LUO Jing, LI Jian. Two-dimensional simulation of the collapse of vapor bubbles near a wall[J]. *Journal of Fluids Engineering*, 2008, 130(091301): 1-4.
- [26] HUANG Cunkui, LARRY W. Molecular dynamics simulation of pressure-driven liquid transport process in cylindrical nanopore using two self-adjusting plates[J]. *Journal of Chemical Physics*, 2006, 124: 234071(1-8).
- [27] HUANG Cunkui, PHILLIP Y K. Investigation of entrance and exit effects on liquid transport through a cylindrical nanopore[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2008, 10: 186-192.

作者简介: 贾妍, 女, 1970年出生, 博士研究生。主要研究方向为分子动力学。

E-mail: jiayan05@126.com

虞烈(通信作者), 男, 1948年出生, 博士, 教授, 博士研究生导师。主要研究方向为机械系统动力学。

E-mail: yulie@mail.xjtu.edu.cn