

УДК 532.137.2; 532.5.013.12

МИКРО- И НАНОТЕЧЕНИЯ: СОСТОЯНИЕ, ПРОБЛЕМЫ, ПЕРСПЕКТИВЫ

© 2011 г.

В.Я. Рудяк

Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет,
Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

valery.rudyak@mail.ru

Поступила в редакцию 24.08.2011

Сделан обзор имеющихся подходов и достижений в изучении микро- и нанотечений, а также обсуждаются проблемы как теоретического, так и экспериментального характера, решение которых настоятельно необходимо. В частности, анализируются и обсуждаются: методы описания микро- и нанотечений, границы применимости гидродинамического описания, необычность свойств течений на микро- и наномасштабах, проблемы гидродинамического моделирования микромиксеров, технологии моделирования микротечений методом молекулярной динамики, данные молекулярно-динамического моделирования нанотечений, структура жидкостей в наноканалах и процессы переноса в них.

Ключевые слова: микротечения, нанотечения, скольжение, микромиксеры, молекулярная динамика, структура жидкости.

Микротечения давно привлекают внимание механиков, что связано в первую очередь с исследованием течений в пористых средах, в различных системах живой и неживой природы. Бурный интерес к ним в последние два десятилетия мотивирован появлением большого числа микроэлектромеханических систем (МЭМС), а позднее и нанотехнологий. В конце 1980-х годов, когда интерес к этой тематике стал очевиден, основные приложения сводились к созданию различных МЭМС и биохимических систем, однако уже начиная с 90-х годов XX века происходит ее диверсификация. Эти приложения широко используются в медицине, фармакологии, биологии, теплоэнергетике, в приборостроении, катализе и т.д. В XXI столетии появился активный интерес и к нанотечениям. Связано это не только с созданием нанотехнологий различного назначения, но и с исследованиями в достаточно традиционных областях: биологии, геофизике, теплоэнергетике и т.д.

Сложность экспериментального изучения данных течений вполне очевидна, существующая экспериментальная информация достаточно ограничена, а часто и противоречива. С другой стороны, начиная с некоторых масштабов их нельзя описывать в рамках классической гидродинамики. Необходимо привлекать методы молекулярного моделирования. Фактически здесь имеет место описание на трех различных уровнях: макроскопическом, микроскопическом и мезоскопическом, который до сих пор фактически не исследовался.

Представлен обзор имеющихся подходов и достижений в изучении указанных течений и обсуждаются проблемы теоретического и экспериментального характера, решение которых необходимо.

Рассматриваются основные проблемы экспериментального исследования данных течений и анализируются их характерные особенности. Проанализированы методы описания микротечений и показано, что с помощью уравнений гидродинамики можно описывать течения однородных жидкостей в каналах с характерными размерами больше или порядка 50 мкм. Однако и в этих случаях необходимо, как правило, использовать граничные условия скольжения и скачка температур. При этом длина скольжения может достигать микрометра, а в случае использования ультрагидрофобных покрытий – десятков микрометров. С помощью метода молекулярной динамики показано, что длина скольжения в общем случае может зависеть от скорости сдвига.

Ситуация существенно усложняется, если жидкость в канале является двухфазной. Для описания микротечений наножидкостей при низких объемных концентрациях наночастиц ($\phi \leq 10^{-4}$) можно использовать обычную одножидкостную гидродинамику. Однако в этом случае необходимо вводить эффективные коэффициенты переноса. Показано, что коэффициенты переноса наножидкостей в общем случае зависят не только от объемной концентрации наночастиц, как это имеет место в крупнодисперсных жидкостях, но так-

же от их размера и массы [1–3]. Кроме того, традиционные граничные условия прилипания здесь перестают быть применимыми, и существенное значение приобретает структура поверхности, в частности ее шероховатость. Следует иметь в виду также, что с ростом объемной концентрации наночастиц среда может менять реологические свойства. Если характерный размер дисперсных частиц становится порядка $10^{-4} - 10^{-5}$ см (это броуновские частицы), гидродинамическое описание в достаточно малых микроканалах вообще перестает быть применимым. Здесь следует использовать смешанное описание с помощью связанной системы кинетико-гидродинамических уравнений [4], когда несущая среда описывается системой уравнений гидродинамики с межфазными силами, а дисперсная – кинетическим уравнением с источниковым членом.

Течение в наноканалах вообще не описывается гидродинамически, необходимо привлечение молекулярных методов. Для разреженных газов требуется решение уравнения Больцмана, а для течений жидкостей и плотных газов – применение метода молекулярной динамики. Предлагаются новые варианты этого метода, впервые позволившие описать течения в канале при заданном перепаде давления или при заданном расходе [5, 6]. Представлены данные молекулярно-динамического моделирования течений в наноканалах. Показано, что в канале формируется течение с параболическим профилем скорости, но всегда имеет место течение со скольжением. Длина скольжения в общем случае зависит от плотности флюида, высоты канала и характера взаимодействия его молекул со стенками, в частности от коэффициентов аккомодации. Приводятся данные зависимости коэффициента сопротивления в плоском наноканале от числа Рейнольдса и числа Кнудсена. Во всех случаях сопротивление, даваемое классическими гидродинамическими соотношениями, оказывается выше. Отличие становится особенно заметным при малых числах Рейнольдса.

Следует также иметь в виду, что в микроканалах, и в особенности в наноканалах, обычное подобие перестает работать. Для получения адекватных выводов необходимо анализировать несколько параметров подобия, как локальных, так и глобальных. Типичной является ситуация, когда число Кнудсена по ширине канала, например, $Kn = 10^{-1}$, а по высоте $Kn \leq 1$, в наноканалах – $Kn \geq 10$.

Большое внимание уделяется изучению структуры жидкости в наноканале. Жидкость в наноканале оказывается структурированной. Ус-

тановлено, что поле плотности поперек канала имеет квазипериодическую структуру. Число максимумов плотности и их величина растут с увеличением плотности флюида. Структурирование жидкости практически не зависит от высоты канала, если только его высота становится больше 10 нм. Значительно меняется в целом и ближний порядок в жидкости. Наибольшее структурирование жидкости имеет место вблизи стенок канала. Здесь формируются слои очень хорошо структурированной жидкости. Можно даже сказать, что здесь реализуется квазидальний порядок. Именно существование этих слоев в значительной мере определяет длину скольжения. Эти слои играют роль слоев Кнудсена в динамике разреженного газа. Изменение структуры жидкости в микро- и наноканалах существенно меняет процессы переноса, включая вязкость жидкости и ее теплопроводность. Приводятся последние данные по расчету коэффициента вязкости жидкости в микроканале, полученные методом молекулярной динамики.

Последняя часть сообщения посвящена проблеме организации смешения различных жидкостей в микроканалах. В макроскопических течениях перемешивание, как правило, происходит в турбулентном режиме. Однако микротечения обычно являются ламинарными, и смешение в стандартных условиях связано лишь с процессами молекулярной диффузии. Из-за чрезвычайно низких значений коэффициента молекулярной диффузии такой канал смешения потоков жидкости оказывается чрезвычайно неэффективным. Чтобы увеличить скорость смешения, необходимо использовать специальные устройства: микромиксеры. Эти устройства являются одним из ключевых элементов различных МЭМС. Различают пассивные и активные способы увеличения скорости смешения. В первом способе варьируется геометрическая форма каналов, используются различного рода вставки и т.п., во втором применяются те или иные внешние поля (акустическое, электрическое, магнитное), варьируется расход жидкости. Показано, как можно оптимизировать работу ряда активных и пассивных микромиксеров, выработаны достаточно общие рекомендации [6–8].

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант №10-01-00074) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. (проекты №П230, №14.740.11.0579).

Список литературы

1. Rudyak V.Ya., Belkin A.A., Tomilina E.A., Ego-

- rov V.V. // Defect & Diffusion Forum. 2008. V. 273–276. P. 566–571.
2. Рудяк В.Я., Белкин А.А., Егоров В.В. // ЖТФ. 2009. Т. 79, №8. С. 18–25.
3. Рудяк В.Я., Белкин А.А., Томилина Е.А. // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36, вып. 14. С. 49–54.
4. Рудяк В.Я. // Сиб. журнал индустриальной математики. 1999. Т. 2, №2. С. 51–59.
5. Rudyak V., Belkin A., Egorov V., Ivanov D. // Proc. of the 2nd European Conf. on Microfluidics – Microfluidics 2010. Toulouse: SHF. 2010. μ Flu-24.
6. Rudyak V., Minakov A., Dekterev A., Gavrilov A. // Proc. of the 2nd European Conf. on Microfluidics – Microfluidics 2010. Toulouse: SHF, 2010. μ Flu-25.
7. Minakov A.V., Rudyak V.Ya., Gavrilov A.A., Dekterev A.A. // J. of Siberian Federal Univ. Math. & Phys. 2010. V. 3, No. 2. P. 146–156.
8. Рудяк В.Я., Минаков А.В., Гаврилов А.А., Дектерев А.А. // Теплофизика и аэромеханика. 2010. Т. 17, №4. С. 601–612.

MICRO- AND NANOFLOWS: PRESENT STATE, PROBLEMS, PROSPECTS

V.Ya. Rudyak

The present state and the existing problems in investigating the micro- and nanoflows are reviewed. In particular, the following problems are discussed: methods of description of the micro- and nanoflows; applicability limits of the hydrodynamic description; unusual properties of the micro- and nanoflows; the problems of hydrodynamic simulation of micromixers; algorithms of the molecular dynamics (MD) simulation of nanoflows; data of the MD simulation of nanoflows; fluid structure and transport processes in nanochannels.

Keywords: microflows, nanoflows, slip, micromixers, molecular dynamics, fluid structure.