

## 水流在旋转黑磷纳米管内轴向驱动特性\*

张忠强<sup>1)2)†</sup> 范晋伟<sup>1)</sup> 张福建<sup>1)</sup> 程广贵<sup>1)2)</sup> 丁建宁<sup>1)2)‡</sup>

1) (江苏大学, 智能柔性机械电子研究院, 镇江 212013)

2) (常州大学, 江苏省光伏科学与工程协同创新中心, 常州 213164)

(2020年1月16日收到; 2020年3月25日收到修改稿)

运用分子动力学方法模拟研究了旋转的黑磷纳米管对管内水流的轴向驱动特性, 研究表明: 手性黑磷纳米管在旋转时会驱动管内水分子沿轴向运动, 运动方向由纳米管转向决定; 管内水流的流速和驱动力会随着黑磷管转速的提高而增大. 采用黑磷双壁 Couette 模型计算分析了水-黑磷界面的摩擦系数及滑移特性, 阐明了黑磷表面天然的各向异性微结构是旋转黑磷管轴向驱动水流的本质原因. 构建了在双层黑磷纳米管间填充水分子的模型, 发现内外黑磷管同时旋转时, 管间水分子的轴向运动会增强. 纳米管半径也会对水分子的定向运动产生影响, 具体表现为在相同转速下, 随着纳米管半径的增大, 管内水分子在轴向上的运动速度会减小, 而受力则会增大; 双壁黑磷纳米管在旋转时管内水分子的轴向运动情况和单壁黑磷纳米管模型差异很小, 证明黑磷管层数对水流驱动效果的影响不明显; 温度对水流驱动效果的影响规律取决于管内压强和温度对流固界面摩擦系数的耦合作用, 当温度低于常温时水分子在轴向上的速度和受力会随着温度的升高而增大, 当温度达到常温时则趋于平稳. 研究结果可为基于黑磷纳米管的流体传动器件的设计和应用提供理论基础.

关键词: 黑磷纳米管, 旋转, 轴向驱动, 分子动力学

PACS: 02.70.Ns, 61.46.Np, 68.08.-p, 47.61.-k

DOI: 10.7498/aps.69.20200116

## 1 引言

近年来, 随着微/纳尺度技术的逐步成熟, 低维材料由于其在物理、化学方面的优异性能<sup>[1,2]</sup>, 被广泛应用于微/纳机电系统、柔性电子技术和传感器等领域<sup>[3-5]</sup>. 其中, 微/纳流体传动器件作为新兴的研究方向, 具有广阔的应用前景. 由于纳米尺度下低维材料与流体在流-固界面上的独特特性<sup>[6,7]</sup>, 纳米流体器件具有高通量、高流速和高精度等特点. 目前学者们通过施加温度梯度、压力梯度、电场以及在通道内构建螺旋型结构等方式对纳米通道内的流体进行驱动<sup>[8-11]</sup>, 研究了流体在通道内的

运动特性, 并以此设计出各类纳米流体传动器件.

黑磷 (BP) 是近几年发现的二维材料之一, 是磷的同素异形体中热力学性能较为稳定的结构, 相比于石墨烯和二硫化钼等材料, 黑磷具有天然带隙及高载流子迁移率, 是天然的半导体材料, 并且黑磷表面由于褶皱结构的存在而呈现出各向异性<sup>[12-15]</sup>, 针对上述这些特点, 学者们进行了诸多研究. Yang 等<sup>[16]</sup> 利用分子动力学方法对单层黑磷在双轴和单轴拉伸以及剪切变形下的温度-应力-应变关系进行了模拟, 并将结果与现有的实验测量值和第一性原理计算值进行对比. Zhao 等<sup>[17]</sup> 利用光学显微镜观察了水蒸气在黑磷表面的液化过程, 发现在黑磷表面结构各向异性的影响下水滴呈现椭圆形结构.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11872192, 51675236) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhangzq@ujs.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: dingjn@ujs.edu.cn

Hyun 等<sup>[18]</sup>在可控的温度和湿度下用原子力显微镜对黑磷表面原子的降解过程进行了表征. 我们之前利用不同手性的层状黑磷构建 Couette 流和 Poiseuille 流模型, 研究了各向异性对黑磷纳米通道内水分子运动特性的影响, 得出界面摩擦系数随黑磷褶皱方向与流体运动方向间夹角的增加而增加, 而水分子的黏度系数基本保持不变的结论<sup>[19,20]</sup>. 除此以外, 受到石墨烯与碳纳米管结构的启发, 研究人员认为可以通过卷绕单层黑磷的方式得到黑磷纳米管 (BPNT) 的结构. Cai 等<sup>[21]</sup>利用分子模拟方法研究了轴向压缩条件下单壁黑磷纳米管的强度和稳定性, 明确了影响黑磷纳米管临界应力和应变的因素. Hao 等<sup>[22]</sup>在分子动力学定性分析的基础上, 研究了尺寸、应变和空位对扶手椅型黑磷纳米管传热性能的影响. 目前关于黑磷纳米管内流体运动特性的研究鲜有报道, 因此本文构建手性黑磷纳米管模型, 利用黑磷表面的倾斜褶皱在管壁形成螺旋结构, 从而实现黑磷纳米管自转时对水分子在轴向上的驱动作用, 并研究了各条件参数对水分子运动特性的影响, 为黑磷纳米管在纳米尺度流体传动领域的应用提供理论基础.

## 2 模型和模拟方法

本文选用的材料为黑磷纳米管, 黑磷是由磷原子通过  $sp^3$  杂化形成褶皱状的蜂窝结构, 其特殊的褶皱结构使黑磷表面呈现出各向异性. 通过对单层黑磷进行几何坐标变换构建黑磷纳米管的模型, 并且参考碳纳米管手性<sup>[23]</sup>的概念, 将纳米管展开成的单层黑磷的褶皱方向与纳米管轴向之间的夹角

定义为手性角  $\theta$ , 构建具有不同手性的黑磷纳米管, 图 1(a) 和图 1(b) 分别是手性角度为  $23.4^\circ$  的单层黑磷和黑磷纳米管的模型图. 为了研究旋转的黑磷纳米管中水分子的运动特性, 在黑磷纳米管中填充水分子, 模型如图 1(c) 所示, 令黑磷纳米管以一定的转速绕轴线旋转, 并将图中纳米管的旋转方向定义为顺时针方向. 由于单层黑磷的原子不在同一平面内, 黑磷纳米管内外表面的原子会具有不同的半径, 因此使用蓝色和绿色两种颜色分别代表黑磷纳米管内外表面的原子. 所构建的黑磷纳米管长度为  $4.3 \text{ nm}$ , 半径取黑磷纳米管内外管径的平均值, 用  $R$  表示, 并将黑磷纳米管的轴向设置为周期性, 而水分子则选用 TIP4P-Ew 模型<sup>[24]</sup>.

本文采用分子动力学 (MD) 方法研究了黑磷纳米管旋转作用下管内水分子轴向运动的特性, 利用 LAMMPS 开源代码完成模拟. 首先在正则 (NVT) 系综下对系统进行弛豫使系统达到稳定状态, 弛豫温度为  $300 \text{ K}$ . 模拟过程中采用 Langevin 恒温器使水的温度保持在  $300 \text{ K}$  的恒温. 整个模拟过程的时间为  $4 \text{ ns}$ , 其中前  $1 \text{ ns}$  用来进行弛豫, 当系统达到稳定状态后令黑磷纳米管以一定的转速绕轴线转动, 持续时间为  $3 \text{ ns}$ , 统计后  $2 \text{ ns}$  的数据用于分析研究. 在势函数选择上, 采用 Stillinger-Weber (SW) 势函数<sup>[21]</sup>描述黑磷原子之间的相互作用, 水分子模型选取改进版的四位 TIP4P-Ew 模型, 水分子之间的长程库仑势作用通过 particle-particle particle-mesh (PPPM) 方法计算. 黑磷与水分子相互作用采用 Lennard-Jones (LJ) 势函数进行描述, 作用参数通过 Lorentz-Berthelot

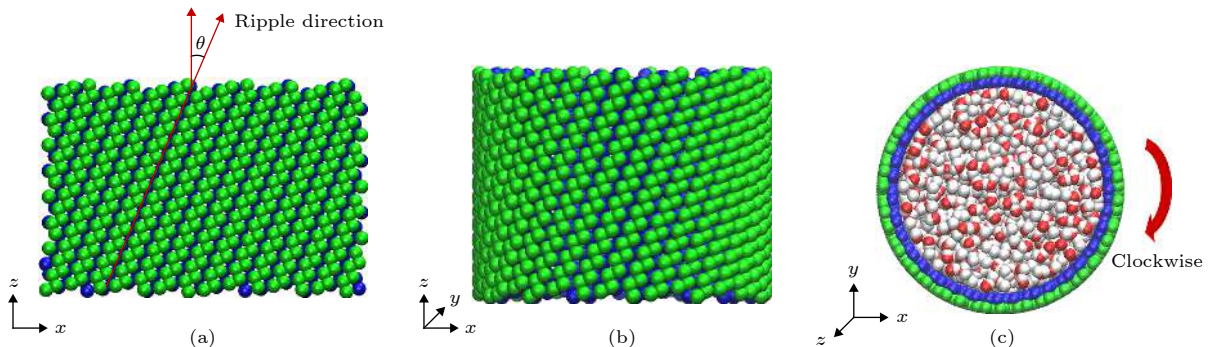


图 1 (a) 单层黑磷模型, 其中手性角度  $\theta$  指黑磷褶皱方向与  $z$  轴方向 (纳米管轴向) 的夹角; (b) 手性角度为  $23.4^\circ$  的黑磷纳米管; (c) 填充水分子的黑磷纳米管旋转模型图

Fig. 1. (a) Monolayer black phosphorus model, chiral angle  $\theta$  is the intersection angle between the ripple direction of BP monolayer and  $z$  direction (the axial direction of the BPNT); (b) BPNT with a chiral angle of  $23.4^\circ$ ; (c) model of the rotating BPNT filled with water molecules.

混合算法计算得出, 具体参数见表 1<sup>[25,26]</sup>. 其中, LJ 作用和库仑相互作用的截止距离为 12 Å 和 10 Å, 并且为了保持水分子的 O—H 键长和 H—O—H 键角的稳定性, 本文使用 SHAKE 算法<sup>[27]</sup>.

表 1 LJ 势能函数的参数值  
Table 1. Parameter values of LJ potential function.

Atoms	$\epsilon/\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$	$\sigma/\text{Å}$
P—P	0.36760	3.4380
O—O	0.16275	3.16435
P—O	0.24460	3.30120

### 3 模拟结果讨论与分析

#### 3.1 手性黑磷纳米管旋转时管内水分子的轴向运动特性

为了研究手性黑磷纳米管旋转作用对管内水分子的轴向驱动特性, 构建了具有不同手性角度的黑磷纳米管, 黑磷纳米管的半径均设置为  $R = 2.6 \text{ nm}$ , 并且将黑磷管的转动速度设置为绕顺时针方向  $50 \text{ rad/ns}$ , 研究黑磷纳米管自转作用下管内水分子的运动情况. 由于构建纳米管模型需要单层黑磷边界处的原子相互匹配, 同时为了保证黑磷纳米管管径的一致性, 本文目前只构造了  $0^\circ$ ,  $23.4^\circ$ ,  $90^\circ$  三种手性黑磷纳米管模型. 图 2 所示为不同手性角度的黑磷纳米管旋转时管内水分子的轴向速度以及水分子轴向上受到的驱动力随时间的变化关系. 由图易知, 手性角度为  $0^\circ$  和  $90^\circ$  时, 黑磷纳米管内水分子的轴向速度和受力均在 0 上下波动, 而手性角度为  $23.4^\circ$  的黑磷纳米管在旋转时, 水分子的轴向速度和受力则始终为正, 且速度大小稳定在  $1.5 \text{ m/s}$  附近, 受力大小约为  $15 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{Å}^{-1}$ . 由此可知, 相比于手性角度为  $0^\circ$  和  $90^\circ$  的黑磷纳米管, 手性角度为  $23.4^\circ$  的黑磷纳米管在旋转时管内水分子出现了定向运动的特性, 因此本文对此进行重点讨论.

令手性角度为  $23.4^\circ$  的黑磷纳米管绕轴线分别沿顺时针 (clockwise) 和逆时针 (anticlockwise) 方向转动, 转动速度大小均为  $50 \text{ rad/ns}$ , 统计水分子的轴向速度与受力随时间的变化趋势如图 3 所示. 为了减小计算误差的影响, 每种情形通过改变随机数的方式分别计算 3 次, 取 3 次数据的平均值并画出了误差带.

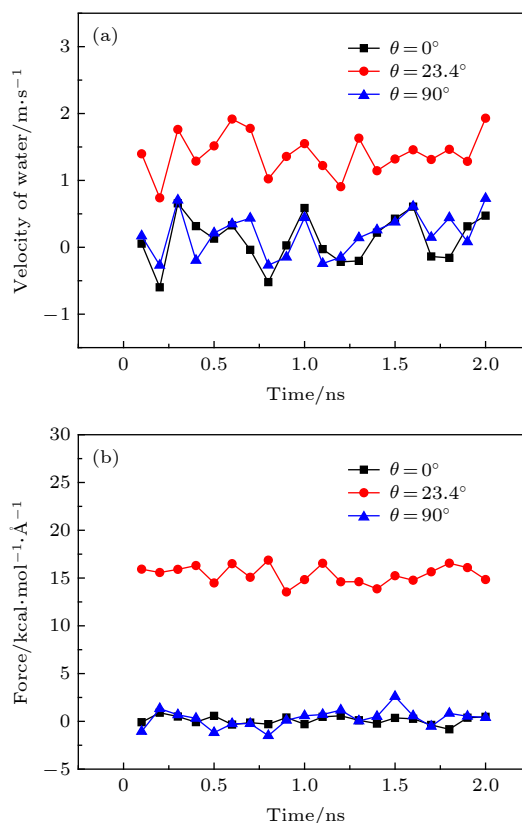


图 2 不同手性角度的黑磷纳米管以  $50 \text{ rad/ns}$  的转速顺时针旋转时管内水分子沿轴线方向的 (a) 速度和 (b) 受力随时间的变化关系

Fig. 2. For the angular velocity of the BPNT being  $50 \text{ rad/ns}$ , (a) the velocity in the axial direction of water molecules in BPNTs and (b) the resultant force in the axial direction of water molecules received from BPNTs with different chiral angles as a function of time.

由图 3 易知, 当黑磷纳米管以相同转动速度沿不同方向转动时, 水分子轴向速度和驱动力均会保持稳定, 且呈现出大小相等, 方向相反的现象. 由此可推断出管内水分子的运动方向由黑磷纳米管的转动方向决定, 并且可进一步证明手性角度为  $23.4^\circ$  的黑磷纳米管在绕自身轴线旋转时会驱动管内水分子沿轴线方向定向运动.

为了研究黑磷纳米管转速对水分子运动的影响, 令手性角度为  $23.4^\circ$  的黑磷纳米管绕轴线沿顺时针方向转动, 转动速度大小分别为 10, 20, 30, 40,  $50 \text{ rad/ns}$ , 统计水分子运动稳定时的轴向速度与受力, 统计结果如图 4 所示.

由图 4 可以看出, 当黑磷纳米管以不同转速进行旋转时, 水分子的轴向运动速度和受力会随着转速的上升而增大, 并且增大的趋势会逐渐变缓. 由此可知黑磷管对水分子的轴向驱动效果会随着黑

磷纳米管转速的上升而增强,但增强的趋势随着黑磷纳米管转速的上升而逐渐减弱.

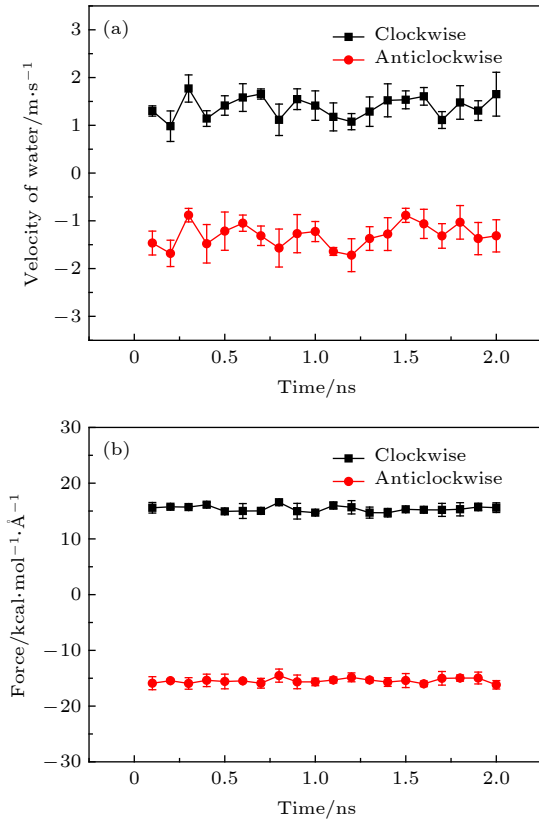


图3 手性角度为  $23.4^\circ$  的黑磷纳米管以  $50 \text{ rad/ns}$  的转速沿不同方向旋转时管内水分子沿轴向的 (a) 速度和 (b) 受力随时间的变化关系

Fig. 3. For the angular velocity of the BPNT being  $50 \text{ rad/ns}$  in different directions of rotation, (a) the velocity in the axial direction of water molecules in the BPNT and (b) the resultant force in the axial direction of water molecules received from the BPNT as a function of time when the chiral angle is  $23.4^\circ$ .

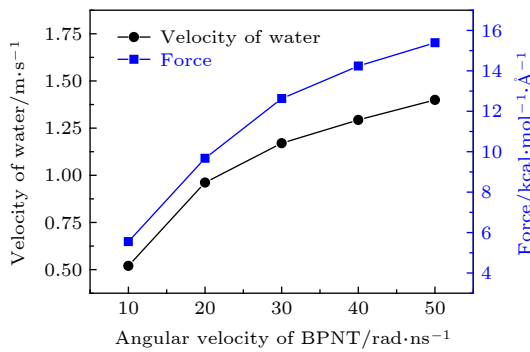


图4 手性角度为  $23.4^\circ$  时,黑磷纳米管内水分子的轴向速度与受力随纳米管转动速度的变化关系

Fig. 4. The velocity in the axial direction of water molecules in the BPNT and the resultant force in the axial direction of water molecules received from the BPNT as a function of the angular velocity of the BPNT when the chiral angle is  $23.4^\circ$ .

### 3.2 手性黑磷纳米管旋转时对管内水流轴向驱动作用的机理分析

黑磷纳米管旋转时水分子的轴向运动是由黑磷与水分子在界面处的相互作用引起的,为了进一步研究手性角度为  $23.4^\circ$  的黑磷纳米管旋转作用下水分子定向运动的原因,利用相同手性角度的单层黑磷构建纳米通道并在其中填充水分子,构建出 Couette 流系统模型如图 5 所示,其中单层黑磷的尺寸为  $3.3 \text{ nm} \times 4.3 \text{ nm}$ ,通道宽度为  $5.2 \text{ nm}$  (上文中黑磷纳米管的直径).令上下两层黑磷分别以大小相等方向相反的速度对水分子进行剪切,剪切速度的大小分别为  $25, 50, 75, 100 \text{ m/s}$ .沿通道宽度的方向以  $0.3 \text{ nm}$  的高度对水分子进行分层,统计水分子的速度分布如图 6 所示.

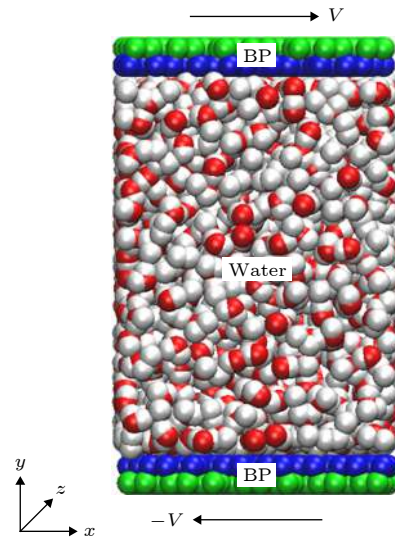


图5 黑磷纳米通道内水分子的 Couette 流模型图

Fig. 5. Couette flow model diagram of water molecules flowing in BP nanochannel.

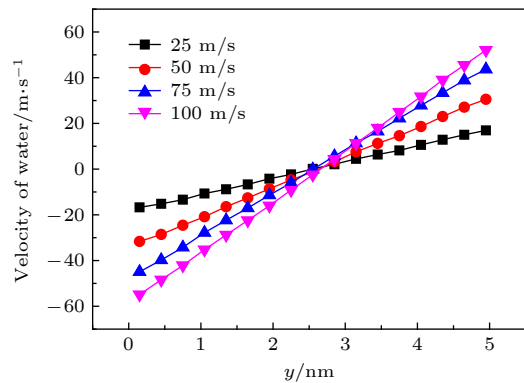


图6 黑磷纳米通道宽度方向上水分子的速度分布

Fig. 6. Velocity distribution of water molecules along the width of the BP nanochannel.

由图 6 可知,在黑磷的剪切作用下,通道内水分子的运动速度在宽度方向上近似为线性分布,并且随着剪切速度的增加,边界处水分子的速度增大.通过对曲线进行拟合得到其斜率和截距,斜率即为剪切应变率,并进一步计算出不同剪切应变率下水分子的边界速度,令剪切速度和边界速度相减得到滑移速度 ( $V_s$ ),同时通过模拟结果得到的单层黑磷对水分子的切向力,计算出不同剪切应变率下的剪切应力 ( $\tau_s$ ),统计滑移速度和剪切应力随剪切应变率变化的趋势如图 7 所示.

由图 7 可知,水分子的边界滑移速度和所受到的剪切应力均会随着剪切应变率的增大而增大.而界面摩擦系数  $f$  满足公式  $\tau_s = f \cdot V_s$ ,根据图 7 的结果计算出不同剪切应变率下的摩擦系数并取平均,得到剪切方向上的界面摩擦系数  $f_x = 0.691 \text{ MPa}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-1}$ .图 8(a) 所示为水分子边界处的微观结构图,可知黑磷的褶皱结构会引起水分子近

似沿褶皱方向分布,进而导致水分子的动量损失.已有研究证明纳米管的传动特性与其手性的关系取决于纳米管势能面的分布特征 [28],因此通过计算黑磷与水分子之间的 LJ 势能,绘制出图 8(b) 所示的黑磷-水交界面的势能分布情况,图 8(b) 显示黑磷表面由于褶皱结构形成粗糙势能表面,且表面势能分布情况与褶皱的方向(即黑磷的手性)相符,由此可知黑磷的手性会对黑磷与水分子在界面处的相互作用产生影响.图 8(c) 所示为黑磷对水分子作用力的示意图,当黑磷的手性角度为  $23.4^\circ$  时,黑磷对水分子的作用力的方向为垂直于褶皱方向,该作用力在与剪切速度平行和垂直的方向上会产生分力,根据力的分解原理可得与剪切方向垂直方向上的摩擦系数  $f_z = f_x \cdot \tan 23.4^\circ = 0.299 \text{ MPa}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-1}$ .由此可对黑磷纳米管旋转时水分子的轴向运动进行解释:当黑磷纳米管旋转时,管壁可看作对管内水分子进行剪切,由于黑磷和水

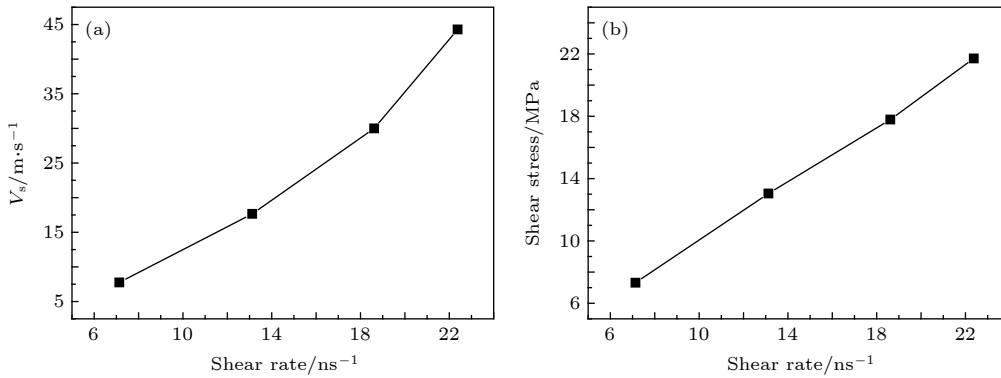


图 7 (a) 水分子的边界滑移速度和 (b) 剪切应力随剪切应变率的变化关系

Fig. 7. (a) The boundary slip velocity of water molecules and (b) the shear stress as a function of the shear strain rate.

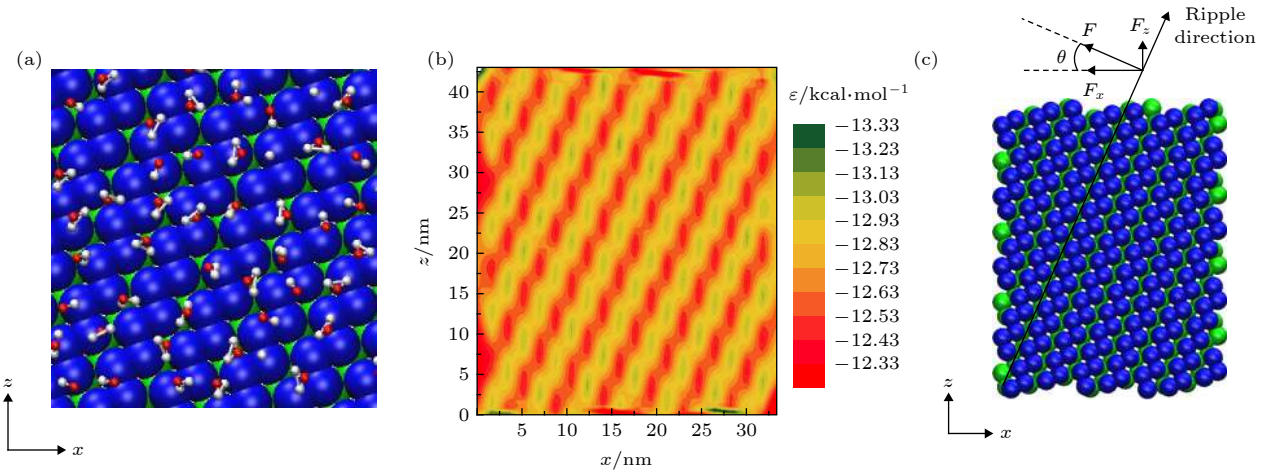


图 8 (a) 水分子边界处的微观构型图; (b) 黑磷-水交互界面势能分布图; (c) 黑磷对水分子的作用力示意图

Fig. 8. (a) Microstructure of the boundary of water molecules; (b) potential energy distribution cloud diagram of BP-water; (c) schematic diagram of the force of BP on water molecules.

分子的界面摩擦系数的存在, 水分子会因黑磷纳米管的作用力而运动, 当手性角度为  $23.4^\circ$  时, 黑磷纳米管管壁会因其表面势能的分布特性在轴向上具有一定的摩擦力分量, 从而对水分子产生轴向驱动力, 并且倾斜的褶皱使得黑磷纳米管表面形成螺旋型结构, 因此实现了管内水分子的轴向运动.

### 3.3 双层手性黑磷纳米管旋转时管间水分子的轴向运动特性

由上文可知, 水分子能够沿轴向运动是由于手性黑磷纳米管内表面对水分子的作用引起的, 而黑磷纳米管外表面具有和内表面一样的褶皱结构, 推测手性黑磷纳米管在旋转时外表面也会促进水分子的轴向运动. 为了验证这一想法, 构建了手性角度为  $23.4^\circ$  的双层黑磷纳米管, 管半径分别为  $1.59\text{ nm}$  和  $3.19\text{ nm}$ , 并在两管之间填充水分子, 模型结构如图 9 所示. 分别令外管转动、内管转动和内外管同时同向转动, 研究 3 种情形下水分子的轴向运动特性. 3 种情形下水分子的轴向运动速度和受力如图 10 所示.

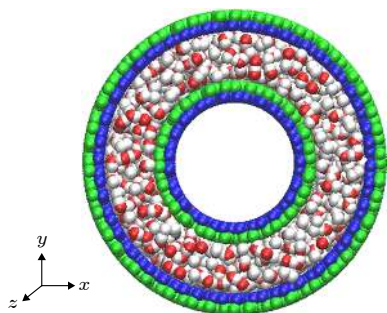


图 9 双层黑磷纳米管间填充水分子模型

Fig. 9. Model of water molecules filling between two BPNTs.

由图 10 可知, 3 种情形下管间的水分子均产生定向运动的现象, 并且当内管和外表同时旋转时, 水分子的轴向速度和受力相比于另外两种情形会有所增大, 由此可以看出手性黑磷纳米管在旋转时其外表面的褶皱结构也会使水分子产生轴向运动, 且内外管同时转动会使水分子的轴向运动效果增强.

### 3.4 条件参数对手性黑磷纳米管旋转时通道内水分子轴向运动特性的影响

管径对于研究黑磷纳米管内水分子的运动特性而言也是一个重要参数. 为了研究手性角度为

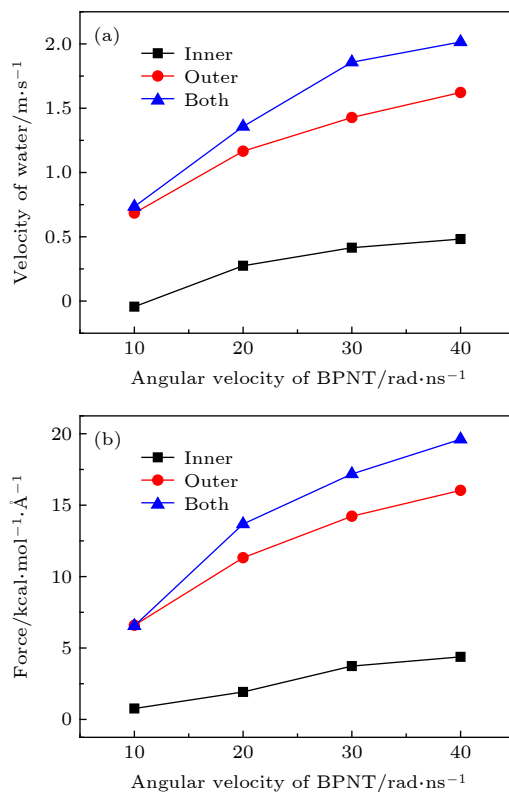


图 10 3 种情形下黑磷纳米管间水分子沿轴线方向的 (a) 速度和 (b) 受力随转速的变化关系

Fig. 10. (a) The velocity in the axial direction of water molecules between BPNTs and (b) the resultant force in the axial direction of water molecules received from BPNTs as a function of the angular velocity of BPNTs in three cases.

$23.4^\circ$  的黑磷纳米管在旋转时半径对管内水分子运动规律的影响, 构建了半径分别为  $1.59$ ,  $2.66$ ,  $3.72\text{ nm}$  的手性黑磷纳米管模型, 在管内填充水分子并使黑磷管以不同转速转动, 统计出水分子在轴向上的运动速度和受力情况如图 11 所示.

由图 11 可以看出, 不同半径的黑磷纳米管在旋转时, 管内水分子在轴向上的速度和受力随转速的变化趋势基本一致, 并且当转速相同时, 水分子轴向上的速度随着黑磷纳米管半径的增大而减小, 受力却随之增大. 这是由于半径的增大一方面增加了水分子与黑磷纳米管管壁的接触面积, 造成水分子的受力随之上升; 而另一方面也使得管内的水分子数急剧上升, 从而增加了驱动负担, 因此水分子的轴向速度会有所下降.

参照多壁碳纳米管的概念构建手性角度为  $23.4^\circ$  的多壁黑磷纳米管, 讨论黑磷纳米管层数对水分子运动的影响. 由于自然状态下黑磷的层间距为  $0.53\text{ nm}$ , 而本文中选择的 LJ 势函数的截断半

径为 1.2 nm, 当黑磷纳米管的层数大于 2 时, 外层黑磷纳米管的作用很小, 因此本节仅讨论双壁黑磷纳米管 (DWBPNT) 的情形. 参考自然环境下黑磷层与层之间的间隔, 将两层黑磷纳米管之间的距离设置为 0.53 nm 构建双壁黑磷纳米管模型. 在双壁黑磷纳米管内填充水分子, 并使黑磷管沿顺时针方向以不同转速旋转, 统计管内水分子的轴向速度和受力并将其与单壁黑磷纳米管 (SWBPNT) 对比, 结果如图 12 所示.

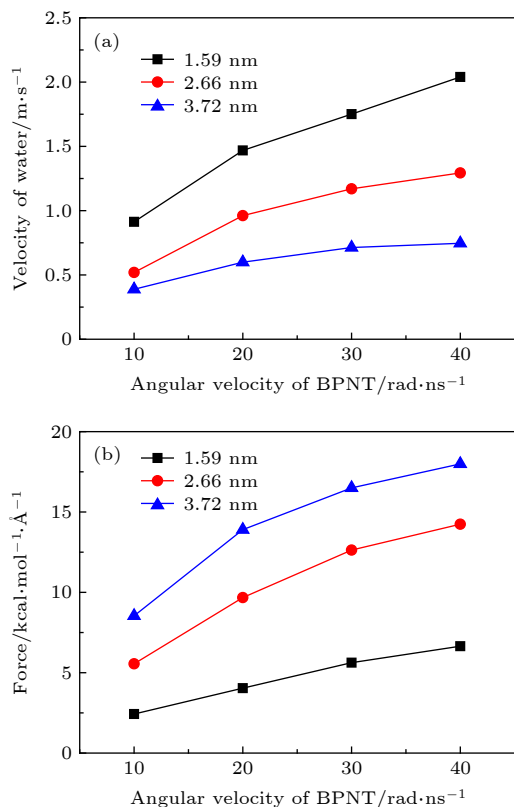


图 11 手性角度为 23.4° 时, 不同半径的黑磷纳米管内水分子沿轴线方向的 (a) 速度和 (b) 受力随黑磷纳米管转速的变化关系

Fig. 11. For different radius, (a) the velocity in the axial direction of water molecules in BPNTs and (b) the resultant force in the axial direction of water molecules received from BPNTs as a function of the angular velocity of BPNTs when the chiral angle is 23.4°.

由图 12 可以看出, 单壁和双壁黑磷纳米管内水分子在轴向上的速度和受力随转速的变化趋势基本一致, 并且当转速相同时两种情形下黑磷纳米管内水分子的轴向速度差异很小, 而受力则会因为层数的增加而有轻微的上升, 由此可以看出黑磷纳米管在旋转时, 其层数对管内水分子的轴向运动特性影响不明显.

环境的温度也可能会对黑磷纳米管内水分子的运动特性产生影响, 因此将模拟温度分别设置为 200, 225, 250, 275, 300, 325, 350 K, 转速设置

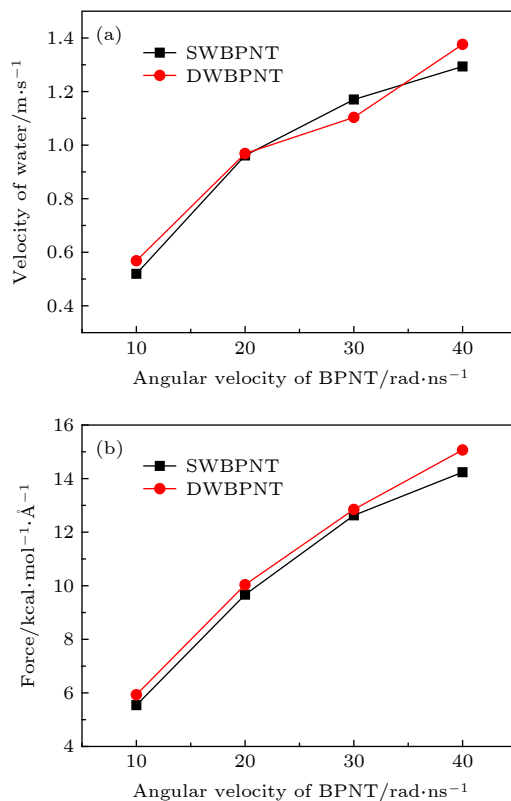


图 12 手性角度为 23.4° 时, 不同层数黑磷纳米管内水分子沿轴线方向的 (a) 速度和 (b) 受力随黑磷纳米管转速的变化关系

Fig. 12. For different layers, (a) the velocity in the axial direction of water molecules in BPNTs and (b) the resultant force in the axial direction of water molecules received from BPNTs as a function of the angular velocity of BPNTs when the chiral angle is 23.4°.

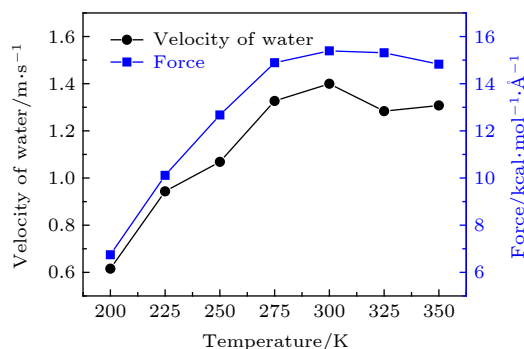


图 13 转速为 50 rad/ns 时, 手性角度为 23.4° 的黑磷纳米管内水分子的轴向速度与受力随温度的变化关系

Fig. 13. For the angular velocity of the BPNT being 50 rad/ns, the velocity in the axial direction of water molecules in the BPNT and the resultant force in the axial direction of water molecules received from the BPNT as a function of the temperature when the chiral angle is 23.4°.

为 50 rad/ns, 探究温度对水分子轴向运动的影响. 水分子运动稳定时的轴向速度与受力随温度的变化关系如图 13 所示.

由图 13 可以看出, 温度较低时, 水分子沿轴向的速度和受力会随着温度的升高而明显增大, 而随着温度逐渐上升到常温, 温度对水分子的轴向速度和受力的影响逐渐减弱, 水分子的运动趋于稳定.

## 4 结 论

以黑磷纳米管构建纳米通道, 研究了黑磷纳米管自转作用下通道内水分子的定向运动特性, 并从流-固界面角度对其原因进行分析. 由研究结果可知, 手性黑磷纳米管在旋转时会驱动管内水分子沿轴向运动, 运动方向由纳米管转向决定, 并且管内水流的流速和驱动力会随着纳米管转速的提高而增大. 基于单层黑磷构建 Couette 流模型对水-黑磷界面的摩擦系数及滑移特性进行分析, 证明黑磷表面各向异性的微结构是旋转黑磷管对水流进行轴向驱动的本质原因. 构建了在双层黑磷纳米管间填充水分子的模型, 发现黑磷管外表面的微结构也会驱动水流轴向运动, 且内外黑磷管同时旋转时, 管间水流的轴向运动效果会增强. 最后研究了黑磷管半径、层数和环境温度的影响, 结果表明: 相同转速下, 随着纳米管半径的增大, 管内水流在轴向上的运动速度会减小, 而受力则会增大; 双壁黑磷纳米管在旋转时管内水流的轴向运动情况和单壁黑磷纳米管模型差异很小, 证明纳米管层数的影响不明显; 温度低于常温时水流的速度和受力会随着温度的升高而增大, 当温度达到常温后则趋于平稳.

## 参考文献

- [1] Novoselov K S, Fal'ko V I, Colombo L, Gellert P R, Schwab M G, Kim K 2012 *Nature* **490** 192
- [2] Naumis G G, Barraza-Lopez S, Oliva-Leyva M, Terrones H 2017 *Rep. Prog. Phys.* **80** 096501
- [3] Stampfer C, Jungen A, Linderman R, Obergfell D, Roth S, Hierold C 2006 *Nano Lett.* **6** 1449
- [4] So H M, Sim J W, Kwon J, Yun J, Baik S, Chang W S 2013 *Mater. Res. Bull.* **48** 5036
- [5] Cagatay E, Kohler P, Lugli P, Abdellah A 2015 *IEEE Sens. J.* **15** 3225
- [6] Turlo V, Politano O, Baras F 2015 *Acta Materialia*. **99** 363
- [7] Thomas J A, McGaughey A J H 2008 *Nano Lett.* **8** 2788
- [8] Longhurst M J, Quirke N 2007 *Nano Lett.* **7** 3324
- [9] Yang X P, Yang X N, Liu S Y 2015 *Chinese. J. Chem. Eng.* **23** 1587
- [10] Zhang Z Q, Ye H F, Liu Z, Ding J N, Cheng G G, Ling Z Y, Zheng Y G, Wang L, Wang J B 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 114304
- [11] Wang L Y, Wu H A, Wang F C 2017 *Sci. Rep.* **7** 41717
- [12] Lu W L, Nan H Y, Hong J H, Chen Y M, Zhu C, Liang Z, Ma X Y, Ni Z H, Jin C H, Zhang, Z 2014 *Nano Res.* **7** 853
- [13] Pang J B, Bachmatiuk A, Yin Y, Trzebicka B, Zhao L, Fu L, Mendes R G, Gemming T, Liu Z F, Rummeli M H 2018 *Adv. Energy Mater.* **8** 1702093
- [14] Qiao J S, Kong X H, Hu Z X, Yang F, Ji W 2014 *Nat. Commun.* **5** 4475
- [15] Hu T, Han Y, Dong J M 2014 *Nanotechnology* **25** 455703
- [16] Yang Z Y, Zhao J H, Wei N 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 023107
- [17] Zhao J L, Zhu J J, Cao R, Wang H D, Guo Z N, Sang D K, Tang J N, Fan D Y, Li J Q, Zhang H 2019 *Nat. Commun.* **10** 4062
- [18] Hyun C, Kim J H, Lee J Y, Lee G H, Kim K S 2020 *RSC Adv.* **10** 350
- [19] Zhang Z Q, Liu H L, Liu Z, Zhang Z, Cheng G G, Wang X D, Ding J N 2019 *Appl. Surf. Sci.* **475** 857
- [20] Zhang Z Q, Liu H L, Fan J W, Ding J N, Cheng G G 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 170202 (in Chinese) [张志强, 刘汉伦, 范晋伟, 丁建宁, 程广贵 2019 物理学报 **68** 170202]
- [21] Cai K, Wan J, Wei N, Qin Q H 2016 *Nanotechnology* **27** 275701
- [22] Hao F, Liao X B, Xiao H, Chen X 2016 *Nanotechnology* **27** 155703
- [23] Fernández-Escamilla H N, Quijano-Briones J J, Tlahuice-Flores A 2016 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** 12414
- [24] Horn H W, Swope W C, Pitera J W, Madura J D, Dick T J, Hura G L, Head-Gordon T 2004 *J. Chem. Phys.* **120** 9665
- [25] Zhang H W, Ye H F, Zheng Y G, Zhang Z Q 2011 *Microfluid. Nanofluid.* **10** 403
- [26] Cai K, Liu L, Shi J, Qin Q H 2017 *Mater. Des.* **121** 406
- [27] Ryckaert J P, Ciccotti G, Berendsen H J C 1977 *J. Comput. Phys.* **23** 327
- [28] Hou Q W, Cao B Y, Guo Z Y 2009 *Nanotechnology* **20** 495503



# Axial driving characteristics of water in rotating black phosphorus nanotubes\*

Zhang Zhong-Qiang<sup>1)2)†</sup> Fan Jin-Wei<sup>1)</sup> Zhang Fu-Jian<sup>1)</sup>Cheng Guang-Gui<sup>1)2)</sup> Ding Jian-Ning<sup>1)2)‡</sup>1) (*Institute of Intelligent Flexible Mechatronics, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China*)2) (*Jiangsu Collaborative Innovation Center of Photovoltaic Science and Engineering, Changzhou University, Changzhou 213164, China*)

( Received 16 January 2020; revised manuscript received 25 March 2020 )

## Abstract

Since the advent of two-dimensional materials, the micro/nano technology has been greatly developed, and the design of micro/nano fluid devices has become an important research area. As a new two-dimensional material, the black phosphorus (BP) has attracted wide attention because of its excellent properties such as anisotropy, and it has been applied to many areas. In this paper, the axial motion properties of water molecules in the rotating black phosphorus nanotube (BPNT) are studied by the molecular dynamics method. The results show that water molecules in the rotating chiral BPNT can move along the axis, and the moving direction of water molecules is determined by the rotating direction of the nanotube. The velocity of water molecules and the resultant force of water molecules received from the nanotube in the axial direction increase with the angular velocity increasing. The friction coefficient and slip characteristics of the water-BP interface are calculated by using the Couette flow model, and it is clarified that the natural anisotropic microstructure on the surface of BP is the essential reason for the axial motion of water molecules in the rotating BPNT. Besides, we construct a model of filling water molecules between two BPNTs. It is found that the axial movement of water molecules between two nanotubes will be enhanced when the internal and external tube rotate simultaneously. The radius of the nanotubes will also affect the directional motion of the water molecules. Specifically, at the same angular velocity of BPNTs, with the increase of the radius, the axial motion velocity of water molecules in the BPNT will decrease, while the force received from the BPNT will increase. The axial motion of water molecules in the double-walled BPNT is little different from that in the single-walled BPNT, which proves that the number of layers has no significant influence on the driving effect of water molecules. The influence of temperature on the motion properties of water molecules depends on the coupling effect of pressure and temperature in the tube on the convection-solid interface friction coefficient. When the temperature is lower than the normal temperature, the axial velocity of water molecules and the force exerted by the BPNT will increase with the increase of temperature, and when the temperature reaches the normal temperature, it will become stable. The results will provide a theoretical basis for the study of the flow characteristics of the fluid in BPNTs and the application of the fluid drive devices based on BPNTs.

**Keywords:** black phosphorus nanotubes, rotation, directional motion, molecular dynamics

**PACS:** 02.70.Ns, 61.46.Np, 68.08.-p, 47.61.-k

**DOI:** 10.7498/aps.69.20200116

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11872192, 51675236).

† Corresponding author. E-mail: [zhangzq@ujs.edu.cn](mailto:zhangzq@ujs.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [dingjn@ujs.edu.cn](mailto:dingjn@ujs.edu.cn)