
中国科大提出普适Knudsen理论模型

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25091.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

中国科大提出普适Knudsen理论模型。中国科学技术大学工程科学学院近代力学系、中国科学院材料力学行为和设计重点实验室教授王奉超研究团队在纳米通道气体输运的理论研究方面取得新进展，提出普适的Knudsen理论模型，适用于定量描述任意壁面粗糙度的纳米通道内的气体流量。11月15日，该研究成果发表在《自然-通讯》上。

纳米通道中气体输运，不仅在自然界中广泛存在，而且在膜分离、纳米催化、页岩气开采等工业过程中发挥着关键作用。纳米通道气体输运属于自由分子流状态，气体分子与通道壁面的碰撞起主导作用，而气体分子间的相互作用可忽略不计。1909年，丹麦物理学家Martin Knudsen首次提出描述自由分子流气体流量的理论模型，即Knudsen理论。随后，经过波兰物理学家Marian Smoluchowski和荷兰物理学家Pieter Clausing等人的发展和完善，Knudsen理论成为定量描述自由分子流的核心理论。Knudsen理论的推导基于一个关键假设：气体分子在通道壁面上发生漫反射。

然而，随着新材料的出现和观测技术的进步，实验研究发现在某些特定壁面上，尤其是原子级的光滑材料表面，气体分子更倾向于发生镜面反射。这种镜面反射现象导致通过纳米通道的气体流量显著高于Knudsen理论预测值。Smoluchowski给出的修正模型虽然试图调和不同粗糙度的固体壁面，但在对于石墨烯等原子级光滑壁面，其预测结果会发散至无穷大，与实际严重不符。因此，重新修正Knudsen理论以适用于更广泛的通道壁面，尤其是准确定量描述原子级光滑壁面通道内的气体流量，至关重要。

王奉超团队首先分析了Smoluchowski修正模型的局限性，并指出该模型在处理光滑壁面通道时理论值发散的原因。不同于前人关注镜面反射对气体流量的增强效应，王奉超等人创新性地提出镜面反射减少气体耗散流量的研究思路。在此基础上，推导出了普适的Knudsen理论模型。

研究人员介绍，该模型经过分子动力学模拟验证，证明其广泛适用于各种不同壁面粗糙度、不同横截面形状和尺寸的通道，为描述自由分子流提供了新的理论支持。（来源：中国科学报 王敏）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-023-43104-6>

作者：王奉超等 来源：《自然—通讯》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发