

## Diffusive behavior and structural characterization of a hard-sphere fluid through a narrow channel with roughened walls

H. Vahedi Tafreshi, G. Benedek, P. Zamankhan, and P.J. Sarkomaa

**Abstract:** A molecular dynamics technique is devised to simulate the flow of a hard-sphere fluid between two parallel roughened walls separated by a 10 particle diameter distance. The structural state of the system in different solid-volume fractions is characterized by analyzing the static-structure factor contour plot. At solids concentrations below  $\bar{\phi}_s \cong 0.3$ , the calculations have shown no remarkable signature of the presence of the roughened confining walls similar to the previous unbounded simulation results (wide channel). At high concentrations, walls manifest their presence by reducing the particle diffusion in the direction of velocity gradient. Due to the metastability of the assembly, further increase in the solid fraction,  $\bar{\phi}_s \cong 0.6$ , may yield a crystalline phase wherein diffusion coefficients vanish locally.

PACS Nos.: 51.20+d, 61.20-p, 66.10Cb

**Résumé :** Nous développons des techniques en dynamique moléculaire pour simuler l'écoulement d'un fluide de sphères dures dans un canal formé de deux murs rugueux séparés par une distance égale à dix diamètres. L'état structural du système pour différentes fractions solides du volume est caractérisée en analysant la structure statique en courbes de niveau. À des concentration de solide sous  $\bar{\phi}_s \cong 0,3$ , les calculs ne montrent aucun effet dû à la rugosité des murs, agréant avec de précédentes simulations pour des systèmes dans des canaux larges. À concentration élevée, la présence des murs cause une réduction de la diffusion des particules en direction du gradient de vitesse. Parce que le système est métastable, un accroissement additionnel de la fraction solide,  $\bar{\phi}_s \cong 0,6$ , peut mener à une phase cristalline où les coefficients de diffusion disparaissent localement.

[Traduit par la Rédaction]

Received 26 July 2001. Accepted 13 January 2002. Published on the NRC Research Press Web site at <http://cjp.nrc.ca/> on 25 June 2002.

H. Vahedi Tafreshi<sup>1,2</sup> and G. Benedek. INFN, Dipartimento di Scienza dei Materiali, Università di Milano-Bicocca, Via Cozzi 53, I-20125 Milano, Italy.

P. Zamankhan and P.J. Sarkomaa. Department of Energy Technology, Lappeenranta University of Technology, Lappeenranta, Finland.

<sup>1</sup>Corresponding author (e-mail: [HVTafres@unity.ncsu.edu](mailto:HVTafres@unity.ncsu.edu)).

<sup>2</sup>Present Address: Nonwovens Cooperative Research Center, North Carolina State University, Raleigh, NC 27695-8301, U.S.A.