

微通道中极性流体流动特性的研究

李卓, 唐桂华, 陶文铨

(西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 710049, 西安)

摘要: 采用数值模拟方法确定极性流体电黏性对于微通道内流动摩擦系数的影响, 并与文献中的实验结果进行了比较. 所采用的极性流体是具有不同离子浓度和导电率的去离子水和自来水. 采用有限容积法详细研究了通道壁面电势、流体离子浓度、导电率和通道几何特征对双电层、电黏性和摩擦系数的影响. 数值模拟结果表明: 极性流体电黏效应的影响是否可以忽略, 要根据通道当量直径与双电层厚度的比值 r 来决定, 比值越小电黏影响越大. 根据实验条件得到当 $r_{\min} \approx 15$ 时, 电黏效应是完全可以忽略的, 但如果 r 继续减小到 10 时, 电黏效应不能忽略.

关键词: 微通道; 极性流体; 摩擦系数; 双电层; 电黏效应

中图分类号: TK124 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-987X(2007)03-0274-05

Investigation on Flow Characteristics of Polar Fluids in Microchannels

Li Zhuo, Tang Guihua, Tao Wenquan

(State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: In order to examine the electroviscous effect of polar fluids on the friction factor for the laminar flow in microchannels, the numerical investigations were conducted, and the results were compared with the experimental data available in literature. Deionized water and tap water with different ion concentration and electrical conductivity were used as the working fluid. The finite volume method was adopted to discretize the governing equations. The effects of electrical potential, fluid ion concentration, electrical conductivity and the channel dimensions on the electrical double-layer profile, electroviscous effect and the friction coefficient were explored in detail. The numerical simulation results indicate that whether the electroviscous effect should be considered is determined by the ratio of channel hydraulic diameter to the Debye thickness. Smaller ratio leads to greater electroviscous effect. According to the experimental conditions, the electroviscous effect can be neglected completely at the ratio of 15. If the ratio decreases to 10, the electroviscous effect should be considered.

Keywords: microchannel; polar fluid; friction factor; electrical double-layer; electroviscous effect

微纳米通道内流动特性的研究对于合理地设计、开发高效微尺度系统装置十分重要. 近年来, 各国学者都对此进行了大量的实验研究, 然而许多方面至今仍未取得一致的结论. 大部分流动阻力的实验结果要比宏观尺度下预测的值大, 其中微通道内壁面粗糙度^[1-2]以及极性流体形成双电层(EDL)而产生的电黏效应^[3]成为 2 个主要研究热点. 微尺度

下相对粗糙度的增大导致较大的流动阻力, 目前已经得到研究人员的认可. 然而, 对于极性流体产生双电层所导致的电黏效应对流动阻力的影响, 实验研究结果之间还存在很大差异. 文献[4]的研究表明, 极性流体的电黏效应作用并不明显, 且在一般实验条件下是完全可以忽略不计的, 即采用宏观尺度下无滑移边界条件的 N-S 方程可以进行微通道极性

流体流动摩擦系数的预测。

为从理论上深入研究极性流体的流动特性,本文根据文献[4]的实验条件,采用数值模拟求解流动摩擦系数,并与实验结果、宏观理论预测结果进行比较分析,以确定影响 EDL 分布和摩擦系数的几何、物理因素和相应的影响程度。

1 物理模型的确定

文献[4]中的实验采用具有不同离子浓度和溶液导电率的去离子水和自来水作为工质,通道的横截面为矩形,在硅基上刻蚀,顶部由耐热玻璃覆盖密封。实验中雷诺数变化范围是 0.1~300,通道的几何尺寸及流体的物性参数见表 1。实验所用通道的壁面相对粗糙度不超过 0.5%,即可以忽略壁面粗糙度对流动阻力的影响。

2 控制方程

2.1 壁面电势分布方程

固体壁面大多具有表面静电荷,如果固体壁面与带有离子的流体接触,那么固体壁面的电荷就会吸引与之相反的电荷,从而形成双电层,产生表面电势^[5],溶液中的电荷得到重新分配并遵循 Boltzmann 分布。通道的结构如图 1 所示,由于通道的对称性,采用 1/4 区域作为数值模拟区域。壁面静电势 Ψ 与溶液中单位体积内的电荷密度 ρ_e 的分布采用以下二维的 Poisson-Boltzmann 方程描述^[6]

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = -\frac{\rho_e}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (1)$$

式中: ϵ_r 是溶液的相对介电常数(对于水,室温下是 78); ϵ_0 是真空介电常数($8.85 \times 10^{-12} \text{ C} \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$)。离子分布采用 Boltzmann 方程,则净电荷的密度

$$\rho_e = (n^+ - n^-) z_0 e = -2n_0 z_0 e \sinh(z_0 e \Psi / k_B T) \quad (2)$$

表 1 实验中所用工质的物性参数和通道的几何参数

工质			通道几何参数			
物性参数	去离子水	自来水		1	2	3
密度 $\rho/\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	998	998	高 $H/\mu\text{m}$	(20.5±0.1)	(14.3±0.1)	(4.58±0.05)
黏度 $\mu/\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	1 004	1 004	测压点距离 L_p/mm	1.5	1.5	0.5
电导率 $\sigma/\mu\text{S} \cdot \text{cm}^{-1}$	$<1.0\times 10^{-6}$	1.0×10^{-3}	宽 W/mm	1.00	1.00	0.215
离子浓度 $C/\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$	<0.1	70	$W \cdot H^{-1}$	49	70	47
迪拜长度 $\delta/\mu\text{m}$	0.3	9.5×10^{-3}	当量直径 $D_h/\mu\text{m}$	20	14.1	4.48

式中: n_0 为阿伏加德罗常数, $n_0 = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$; Z_0 为化合价; n^+ 、 n^- 分别为正、负离子数; e 为基本电荷数, $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$; k_B 为 Boltzmann 常数, $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ 。

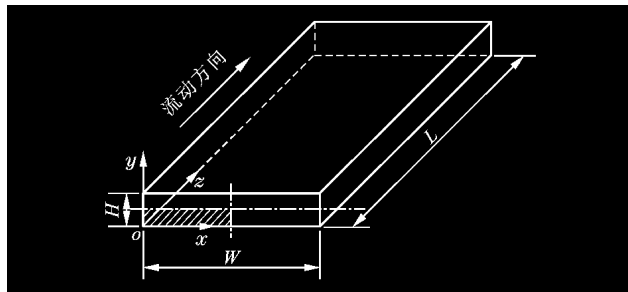


图 1 数值模拟区域及相应的坐标系统

2.2 动量方程

根据上述分析可知,对于不可压缩 N-S 方程,除了外加压力提供动力之外,还多了在靠近壁面的双电层区域内由净电荷所引起的静电力项 F ,对于稳态、充分发展区,速度 w 的控制方程为

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} = \frac{1}{\mu} \frac{dp}{dz} - \frac{1}{\mu} F \quad (3)$$

2.3 静电力分布方程

在没有外加电场的情况下,静电力 F 由靠近壁面的电势分布 Ψ 和净电荷密度 ρ_e 得到

$$F = E_z \rho_e(x, y) \quad (4)$$

式中: E_z 为此时的净电场。

由顺流电流引起的顺流电势将在相反的方向产生一个传导电流,其定义为^[3]

$$I_s = \int_{A_c} w(x, y) \rho_e(x, y) dA_c \quad (5)$$

式中: A_c 为通道横截面积。

由此产生的静电场 E_z 根据溶液的电荷平衡、导电系数 σ 和溶液流过的横截面积可定义如下

$$E_z = -\frac{1}{\sigma A_c} \int_0^{W/2} \int_0^{H/2} w(x, y) \rho_e(x, y) dx dy \quad (6)$$

将式(6)代入式(3)可得

$$\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} = \frac{1}{\mu} \frac{dp}{dz} - \frac{1}{\mu} E_z \rho_e(x, y) \quad (7)$$

2.4 控制方程的边界条件

对于电势分布方程式(1),其边界条件如下

$$x = 0, \Psi(0, y) = \Psi_s; \quad x = W/2, d\Psi/dx = 0 \quad (8a)$$

$$y = 0, \Psi(x, 0) = \Psi_s; \quad y = H/2, d\Psi/dy = 0 \quad (8b)$$

式中: Ψ_s 为通道壁面电势。

对于动量方程式(7),其边界条件如下

$$x = 0, \omega = 0; \quad x = W/2, \partial\omega/\partial x = 0 \quad (9a)$$

$$y = 0, \omega = 0; \quad y = H/2, \partial\omega/\partial y = 0 \quad (9b)$$

2.5 摩擦系数的定义

为和实验进行比较,摩擦系数采用文献[4]中的定义方式,即

$$f = \Delta p D_h / 2 \rho \omega^2 L_p \quad (10)$$

$$Po = f Re = 24 \quad (11)$$

式中: Po 为 Poiseuille 数。

3 数值模拟方法

本文采用有限容积法进行数值求解,值得强调的是,对于 Poisson-Boltzmann 方程式(1),Rice 和 Whitehead^[7]采用线性化方法求得了分析解: $\sinh(e\Psi/k_B T) \approx e\Psi/k_B T$. 该线性化处理的前提条件是壁面电势 $\Psi < 25$ mV. 对于高电势,将方程的源项进行如下线性化处理^[8]

$$S_\Psi = -\frac{2n_0 \epsilon_0}{\epsilon_r \epsilon_0} \sinh\left(\frac{\epsilon_0 \Psi^0}{k_B T}\right) + \left(-\frac{2n_0 \epsilon_0}{\epsilon_r \epsilon_0} \cosh\left(\frac{\epsilon_0 \Psi^0}{k_B T}\right)\right)(\Psi - \Psi^0) \quad (12)$$

式中: z_0 为离子化合价, $z_0 = 1$; Ψ^0 为数值计算过程中前一个迭代的数值。

通常 EDL 厚度 δ 的数量级在 10^{-9} m,见表 1, $\delta = (\epsilon_r \epsilon_0 k_B T / 2 n_0 e^2 z_0^2)^{1/2}$,与通道的当量直径相比很小,所以越靠近壁面网格应该越细密,以捕获在此区域的速度. 本文中的网格采用幂律分布,幂律指数为 2.

4 结果与分析

4.1 电势分布

对非线性 Poisson-Boltzmann 方程在 2 种不同

离子浓度、电导率和壁面电势的条件下求解. 壁面电势根据文献[9]分别取 $\Psi_s = 50, 100$ mV. 计算所得 3 种通道的电势分布如图 2 所示,其中 Ψ 的下标 deio 表示去离子水, tap 表示自来水. 从图中可以看出:电势集中分布在靠近壁面处,离子浓度的减小使得电势分布逐步向通道中心延伸;当加大壁面电势时 EDL 亦随之加强;在同种离子浓度的条件下,EDL 随着通道水力直径的减小而逐步向通道中心延伸;影响 EDL 分布的主要因素是溶液的离子浓度和通道的几何尺寸。

4.2 电黏效应

从动量方程(7)可以看出,外加压力和静电力同时控制着速度场. 与纯压力流动相比,静电力的存在相当于加大了溶液的黏度. 为了从量上衡量静电力所带来的阻力,将源项中的静电力与外加压力的比值作为表示电黏效应的影响程度的指标,即

$$\frac{F}{p_z} = \frac{\rho_e E_z}{-p_z} \quad (13)$$

图 3 给出了该比值在 $x=W/4$ 处沿 y 方向的计算结果. 当电势沿着 y 向逐渐衰减时,比值 F/p_z 迅速减小直至静电力趋于 0. 其中,图 3c 与图 3a、图 3b 相比, F/p_z 值最大,也就是说此时静电力引起的溶液黏度增加的程度最大. 比较这 3 个图,可知衡量电黏效应的程度要根据比值 $r = D_h / \delta$ 来确定:对于去离子水,如果迪拜长度 $\delta = 0.3 \mu\text{m}$,则对应于通道 1、通道 2 和通道 3, r 分别为 67、47 和 15,3 种通道此时的 F/p_z 值随着 r 的减小而逐渐增大;对于自来水,如果 $\delta = 9.5 \times 10^{-3} \mu\text{m}$,对应于通道 1、通道 2 和通道 3, r 分别为 2 105、1 484 和 451,3 种通道的 F/p_z 值都很小,所产生的流动阻力可以忽略不计。

从图 3 还可以看出, r 值越低,静电力所产生的阻力越大,即电黏效果越强,此时就必须考虑其所产生的阻力对摩擦系数的影响. 例如,当 $\Psi_{s, \text{deio}} = 100$ mV, 和 $\Psi_{s, \text{tap}} = 100$ mV, $C = 1.0 \times 10^{-6}$ mol/L 时(见图 3c),曲线的变化趋势逐渐向通道中心延伸. 从以上分析可知,对于极性流体流动特性而言,首先要计算 r 值,再确定是否需要考虑双电层所带来的电黏效应。

4.3 实验与数值模拟的 Po 比较

将 3 种通道的数值计算得到的 Po 与实验结果进行了比较,如图 4~图 6 所示,各图中也给出了纯压力驱动的 Po 值. 值得强调的是,当在纯压力驱动的情况下,根据通道不同的高宽比,其 Po 亦不同,所以参照比的基准也不同. 通道 1 和通道 3 的 Po 值

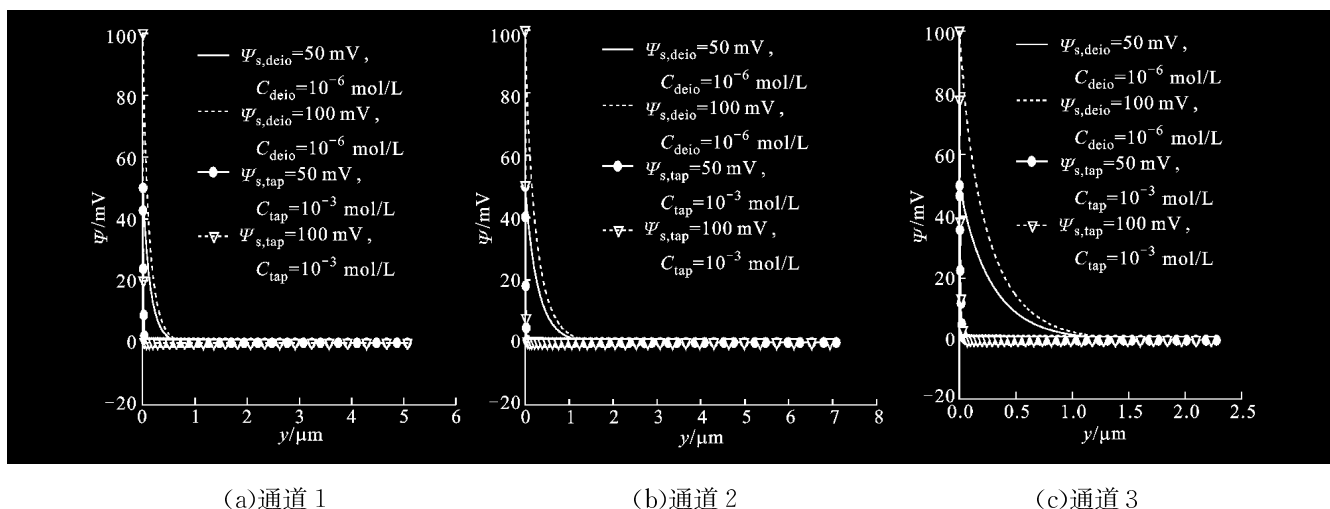
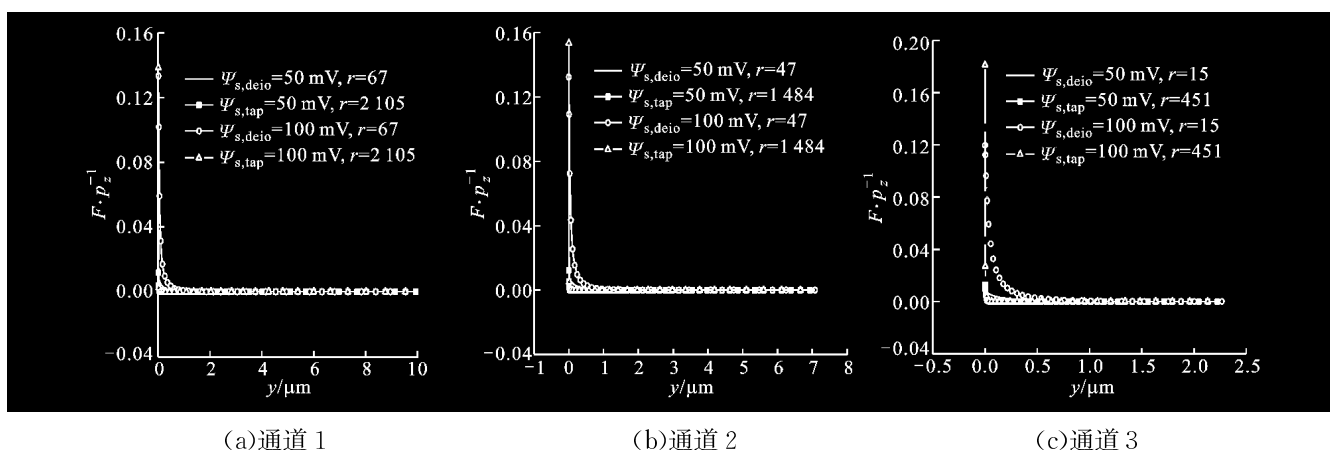
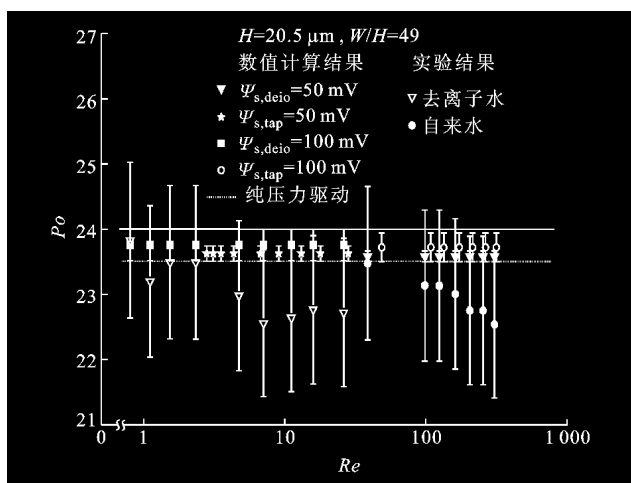
图2 电势分布($x=W/4$)图3 静电力与压力之比 F/p_z 沿 y 方向的分布($x=W/4$)

图4 通道1的数值模拟结果与实验结果比较

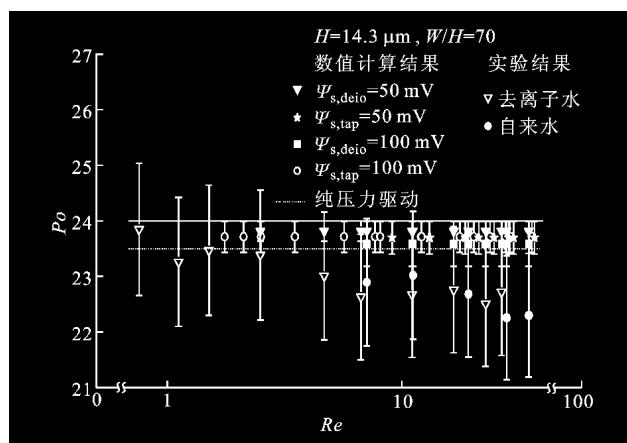


图5 通道2的数值模拟结果与实验结果比较

是23.5,通道2的 Po 值趋近24.

计算结果显示,壁面电势和溶液离子浓度都在一定程度上影响着流动摩擦阻力.在图4中,随壁面电势的增大或者是离子浓度的减小, Po 会增大.而且,数值模拟得到的阻力系数是一个常数,不随 Re

变化而改变.换言之,就是流体的体积流量与压降成线性关系.图5和6的曲线变化趋势与之相同.

对于通道1和通道2,数值计算结果与对常规通道在纯压力驱动情况下的预测值偏差小于2%,此时可以忽略电黏效应.对于通道3,当离子浓度 $C=1.0\times 10^{-6}$ mol/L,壁面电势 $\Psi_s=100$ mV时,电

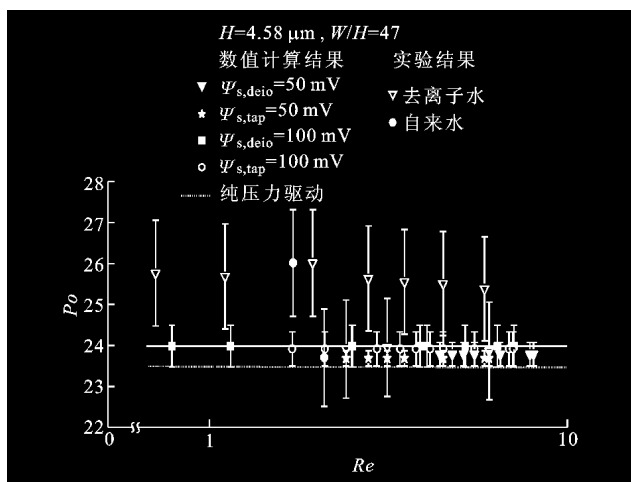


图6 通道3的数值模拟结果与实验结果比较

黏效应使得计算结果与常规理论预测结果偏差达到4%，而此时的 r 最低， $r=15$ 。将数值计算结果与实验值进行比较，可以看出偏差在±10%内，所以可以认为二者是一致的。

为了进一步探讨 r 值达到多大时必须考虑电黏的影响，采用前面的计算方法，得出当 $r<10$ 时，电黏效应导致摩擦系数的增加超过10%，即此时不能忽略其影响。

5 结论

(1)极性流体在微通道内存在电黏效应，但当通道当量直径与迪拜厚度相比很大时，电黏效应可以忽略，流体的流动特性仍然和宏观流动是一致的，并且和实验结果一致。但是，根据进一步的理论计算，如果当量直径与迪拜厚度的比值减小到10以下时，电黏效应必须考虑。

(2)很多采用实验方法研究极性流体微通道中流动特性的公开发表的文献结果显示，极性流体的流动摩擦系数偏离常规理论预测值很多，电黏效应表现很强烈。但是，通过前面数值模拟的研究结果来看，很多实验研究在一定程度上夸大了电黏效应。对于微通道而言，摩擦系数的增大更多应该是由微

通道内壁面的相对粗糙度引起的。同时，实验测量方法的精确度对结果的影响程度有待研究。

参考文献:

- [1] Guo Zengyuan, Li Zhixin. Size effect on microscale single-phase flow and heat transfer [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2003, 46 (1): 149-159.
- [2] 李卓, 吕嘉喜, 何雅玲, 等. 微圆管内液体流动与换热特性的实验研究[J]. 工程热物理学报, 2006, 27 (5): 829-831.
Li Zhuo, Lv Jiayi, He Yaling, et al. Experimental study of liquid flow and heat transfer in microtubes [J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2006, 27 (5): 829-831.
- [3] Phares D J, Smedley G T. A study of laminar flow of polar liquids through circular microtubes [J]. Physics of Fluids, 2004, 16(5): 1267-1272.
- [4] Baviere R, Ayela F. Experimental characterization of water flow through smooth rectangular microchannels [J]. Physics of Fluids, 2005, 17(9): 1-3.
- [5] Probst R F. Physical chemical hydraulics [M]. New York: Wiley and Sons Inc., 1994.
- [6] Yang Chun, Li Dongqing, Masliyah J H. Modeling forced liquid convection in rectangular microchannels with electrokinetic effects [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1998, 41(24): 4229-4249.
- [7] Rice C L, Whitehead R. Electrokinetic flow in a narrow cylindrical capillary [J]. Journal of Physics Chemistry, 1965, 69(11): 4017-4024.
- [8] 陶文铨. 数值传热学[M]. 2版. 西安: 西安交通大学出版社, 2001: 290.
- [9] Gu Yongan, Li Dongqing. The ζ -potential of silicone oil droplets dispersed in aqueous solutions [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1998, 206 (1): 346-349.

(编辑 王焕雪)

本刊实行开放阅读,全文电子版见

<http://journal.xjtu.edu.cn/xb/zrb/>