

微通道液体流动双电层阻力效应^{*}

龚磊, 吴健康

(武汉光电国家实验室, 华中科技大学 力学系, 武汉 430074)

(黄永念推荐)

摘要: 采用数值方法求解双电层的 Poisson-Boltzmann 方程和液体运动的 Navier-Stokes 方程, 研究微通道双电层对压强梯度液体流动的阻力效应。量纲分析表明, 双电层阻力大小可以用一个无量纲的电阻力数表示。它与液体的介电系数、固体表面的 ζ 电位平方成正比, 与液体的动力粘性系数、电导率以及微通道的宽度平方成反比。在计算流动诱导的流动电位势和电阻力时, 提出电流密度平衡条件, 可以消除传统电流平衡条件导致的固壁附近产生局部回流的不合理物理现象。还给出不同电阻力数的微通道流量、流量损失率、速度剖面的数值结果, 合理解释了双电层对微通道液体流动的阻力效应。

关键词: 微通道; 双电层; 电阻力数

中图分类号: O363.2 **文献标识码:** A

引 言

微通道液体流动呈现与传统管道流动不同的物理现象, 已经被大多数人认识。其中最重要的区别是在相同压强梯度时, 微通道的流量小于传统流体动力学理论计算的流量。由于微通道横向尺度缩小效应, 存在附加的阻力导致通道流量减少。大多数人认为通道固壁和液体界面的物理化学作用是产生附加流动阻力的主要原因。固液界面作用层厚度与微通道横向尺度的比值越大, 固液界面的阻力效应越明显。文献[1]通过水在微通道中的流动实验, 观察到液体的流动特征与微通道材料、通道尺寸以及液体的属性有关。文献[2]的研究发现, 对于微通道的相同流量, 金属微通道的压差比硅微通道的压差要小。文献[3~5]研究双电层对微通道压强梯度液体流动产生的附加阻力。固液界面物理化学作用最重要的现象之一是双电层, 它是胶体化学和界面科学中成熟的理论。双电层是固壁附近带电的液体薄层, 通常为几十到几百 nm 厚度量级。微通道在压强梯度作用下的液体流动携带双电层的电荷一起运动, 形成流动电流, 从而产生流动电位势。流动电位势作用于双电层带电的液体产生反向的流体驱动力, 这就是双电层对液体流动的附加阻力。根据双电层理论, 在稳定状态时, 流动电位势产生

* 收稿日期: 2005-12-10; 修订日期: 2006-07-10

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10472036)

作者简介: 龚磊(1981—), 男, 湖北人, 博士研究生;

吴健康(1946—), 教授, 博士(联系人, Tel: +86 27 87543338; E-mail: wujkang@mail.hust.edu.cn)。

的传导电流与压强差流动的流动电流相平衡(大小相等,而且反向),即电流平衡条件, $I_c + I_s = 0$ 。文献[3]基于电流平衡条件,采用通道截面平均值,计算流动电位势。文献[4]采用双电层部分截面平均值的流动电位势。电流平衡条件可能导致在通道固壁附近出现不合理的局部回流现象。电流平衡条件表示在稳定状态时,微通道总的电流为零,但不能保证微通道截面上电流密度(通道截面单位面积的电流强度)处处为零。这就好比通道流动速度和流量的关系一样,通道流量为零,并不保证通道流动速度为零。一般微通道固壁(如硅、玻璃、高分子聚合物材料)电导率比电解质溶液的电导率小很多,固壁表面传导电流可以忽略。在研究双电层对微通道液体流动影响时,我们认为,更确切的提法应该是,压强梯度流动的流动电流密度(在横截面上非均匀分布)与流动电位势差产生的传导电流密度,在微通道横截面上处处反向,且大小相等,即,电流密度平衡条件 $J_c + J_s = 0$ 。这个条件与传统的电流平衡条件一致,而且可以更精确反映双电层内部电阻力的不均匀性对液体流动的影响。

1 二维微通道双电层和电流密度平衡条件

二维均匀微通道如图1所示, H 为通道半宽。

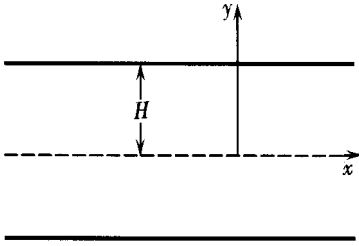


图1 二维微通道示意图

根据文献[6],双电层电位势 ϕ 和电荷密度 ρ_e 满足以下 Poisson-Boltzmann 方程

$$\nabla^2 \phi = \frac{2n_0ze}{\epsilon} \sinh\left(\frac{ze\phi}{k_bT}\right), \quad (1)$$

$$\rho_e = -\epsilon \nabla^2 \phi = -2n_0ze \sinh\left(\frac{ze\phi}{k_bT}\right), \quad (2)$$

这里, ϵ 是液体介电常数, n_0 为溶液离子浓度, e 为电子基本电荷, z 为溶液离子价, k_b 为 Boltzmann 常数, T 为绝对温度。电位势在双电层的滑移面(与固壁有几个分子

的距离,可以用 $y = H$ 近似表示)等于 zeta 电位 ζ 。当压强梯度流动携带双电层电荷一起运动时,通道流动电流为

$$I_s = \int_A J_s(y) dy. \quad (3)$$

这里,流动电流密度(单位截面积的电流强度)为

$$J_s(y) = u(y) \rho_e(y), \quad (4)$$

其中, $u(y)$ 、 $\rho_e(y)$ 为微通道液体流动速度和双电层电荷密度,在通道方向均匀,只沿通道宽度 y 方向变化。在稳定状态时,传统双电层电流平衡条件描述为流动电位势差产生的传导电流与压强差流动的流动电流反向,且大小相等,即 $I_c + I_s = 0$ 。在不考虑通道壁面传导电流时,电流平衡条件可以表示为

$$\int_A J_c(y) dy + \int_A J_s(y) dy = 0, \quad (5)$$

这里, $J_c(y)$ 是流动电位势的传导电流密度,它和流动电流密度 $J_s(y)$ 一样,在微通道截面上也是非均匀分布的。这两种电流密度主要集中在双电层内部。本文提出的双电层电流密度平衡条件认为,在微通道截面上传导电流密度和流动电流密度大小相等,而且反向,表示为

$$J_c(y) + J_s(y) = 0. \quad (6)$$

可以看出电流密度平衡条件(6)与电流平衡条件(5)一致。由电场公式 $J_c(y) = \mathcal{N}(y)$, 从方程(6)得出流动电位势为

$$E(y) = - J_s(y) / \lambda, \tag{7}$$

这里, λ 是微通道液体的电导率常数。流动电位势作用在双电层带电的液体上, 产生反向的流动阻力。流动阻力在通道截面上也是非均匀分布。如果需要考虑通道表面传导电流, 可以按照 Helmholtz-Smoluchowski 方程, 把方程(7)中的液体电导率常数修正为

$$\lambda = \lambda_b + \lambda_s / H, \tag{8}$$

其中, λ_b 、 λ_s 分别为液体和固壁的电导率。这就是说, 通道表面传导电流等价包含在通道液体传导电流里。流动电位势作用于带电液体, 在微通道流动反方向产生阻力。电流密度平衡条件和电流平衡条件的解释表示在图 2 中。

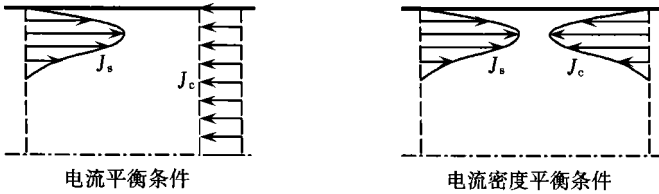


图 2 电流平衡条件和电流密度平衡条件的解释示意图

2 微通道压差流动的双电层阻力效应

均匀微通道流动只有一个轴速度分量, 不可压缩流体的连续方程为

$$\partial u / \partial x = 0 \tag{9}$$

微通道粘性不可压缩流体运动的 Navier-Stokes 方程表示如下:

$$\rho \left[\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} \right] = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right] + \rho E \tag{10}$$

考虑定常运动, 忽略除电场力以外的体积力。右边最后一项表示双电层的电阻力。把方程(4)、(7)、(9)代入方程(10)得到

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \frac{\rho_e u}{\mu \lambda} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \tag{11}$$

边界条件

$$y = 0, \partial u / \partial y = 0, y = H, u = 0 \tag{12}$$

在均匀微通道中, 液体流动方向与双电层平行, 不改变双电层结构和电荷密度分布。对相关的物理量无量纲化如下:

$$\begin{aligned} \bar{y} &= \frac{y}{H}, \quad \bar{\phi} = \frac{\phi}{\zeta} \quad (\zeta \text{ 为双电层 zeta 电位, 一般为负值}), \\ \bar{u} &= \frac{u}{u^*} \quad \left[u^* = - \frac{H^2}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \text{ 为不考虑双电层时通道中心流动速度} \right], \\ \bar{\rho}_e &= \frac{\rho_e}{-\varepsilon \zeta / H^2} \quad (-\varepsilon \zeta / H^2 \text{ 为双电层特征电荷体密度}), \end{aligned}$$

双电层的特征厚度为 $\lambda_D = 1/k = \sqrt{k_b T / (2n_0 e^2 z^2)}$ 。双电层方程(1)、(2)无量纲化为

$$\frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial \bar{y}^2} = \beta \sinh(\alpha \bar{\phi}), \tag{13}$$

$$\bar{\rho}_e = \frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial \bar{y}^2} \tag{14}$$

这里的无量纲系数 $\alpha = ze\zeta / (k_b T)$ 表示双电层特性, $\beta = (kH)^2 / \alpha$, kH 是微通道半宽对双电层

厚度的比值。方程(13)的边界条件为:

$$\bar{y} = 0, \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \bar{y}} = 0, \bar{y} = 1, \bar{\Phi} = 1 \quad (15)$$

微通道流动方程(11)无量纲化为

$$\frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{y}^2} - \gamma \bar{\rho} \bar{u} + 2 = 0, \quad (16)$$

这里,无量纲系数 γ 为

$$\gamma = \frac{\epsilon^2 \zeta^2}{\mu H^2 \lambda} \quad (17)$$

可以看出,微通道双电层阻力效应是多种因素的综合结果(双电层性质,液体特性,微通道尺度)。它可以用一个无量纲数 γ 表达,在本文中定义为电阻力数。 γ 值越大,双电层对微通道压差液体流动的阻力效应越大。可以发现,液体的介电常数、双电层 ζ 电位越大,液体的粘性系数、电导率、通道宽越小,双电层阻力效应越大。特别是电阻力数与通道宽的平方成反比,这就解释了微通道横向尺度缩小产生的附加阻力的主要原因。这与大量的实验观测结果一致。方程(16)的边界条件为:

$$\bar{y} = 0, \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{y}} = 0, \bar{y} = 1, \bar{u} = 0 \quad (18)$$

为了分析方便,省略无量纲方程中的记号“-”。除非特别说明,以下所有方程均表示无量纲方程。方程(13)、(16)写成

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \beta \sinh(\alpha \phi), \quad (19)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \gamma \rho u + 2 = 0 \quad (20)$$

给出参数 α, β , 先解方程(19)得到双电层电位势 ϕ 和电荷密度 ρ_e , 然后给出电阻力数,解 N-S 方程(20)得到微通道的流动速度。

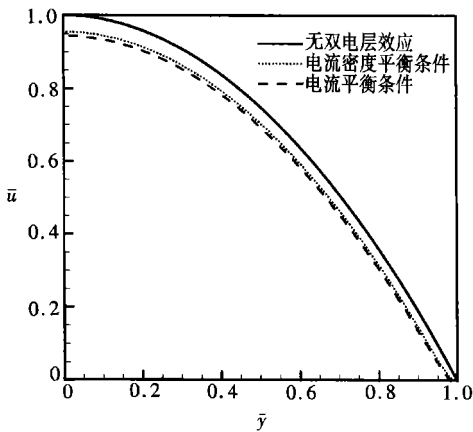


图3 微通道流动速度剖面 ($\alpha = 5.84$,
 $\beta = 185, \gamma = 8.05 \times 10^{-3}$)

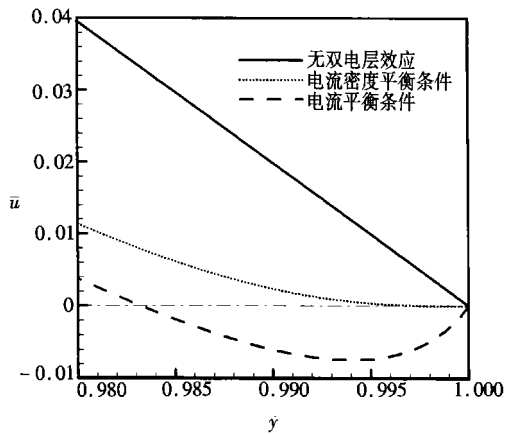


图4 近壁面速度局部剖面图 ($\alpha = 5.84$,
 $\beta = 185, \gamma = 8.05 \times 10^{-3}$)

3 数值算例和结果分析

文献[4]基于电流平衡条件采用通道双电层部分的截面积平均法计算流动电位势,并把这

个流动电位势均匀地分布在整個通道截面上计算双电层的流动阻力。本文从电流密度平衡条件出发,采用数值法求解双电层方程(19)和流动方程(20)。本文采用CFD软件FLUENT进行数值计算。固壁附近的电荷密度梯度很大,而且双电层阻力主要集中在固壁附近。固壁附近的网格需要充分加密,以保证计算精度。为了比较,本文采用文献[5]中的氯化钾溶液为通道流动液体。图3表示微通道截面无量纲速度分布剖面。其中双电层参数为 $\alpha = 5.84$, $\beta = 185$,

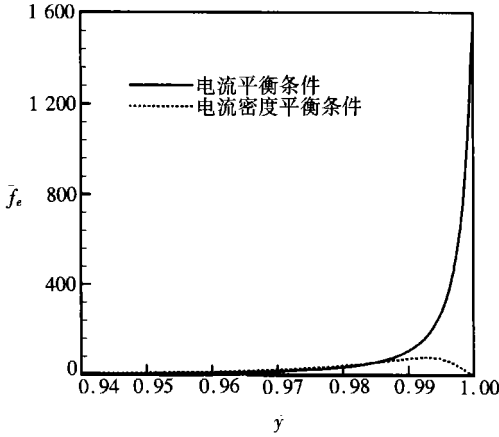


图5 电阻力沿通道宽分布的比较 ($\alpha = 5.84$, $\beta = 185$, $\gamma = 8.05 \times 10^{-3}$)

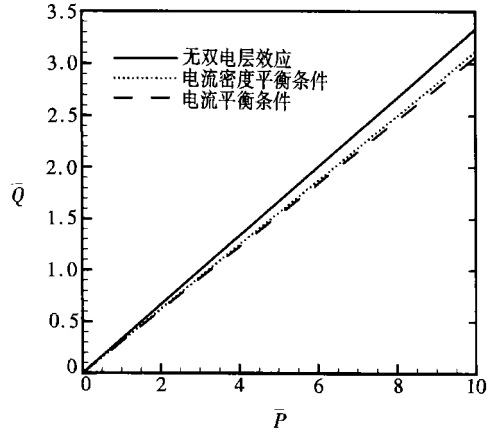


图6 微通道流量的比较 ($\alpha = 5.84$, $\beta = 185$, $\gamma = 8.05 \times 10^{-3}$)

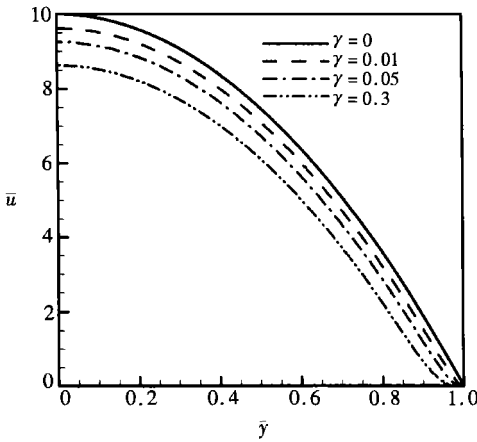


图7 二维通道流动速度剖面 ($\alpha = 10$, $\beta = 40$)

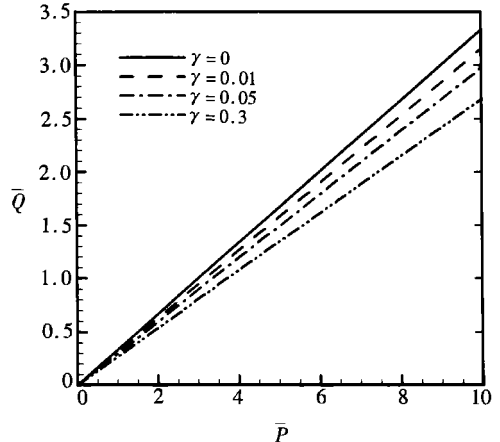


图8 微通道流量和压强梯度的关系 ($\alpha = 10$, $\beta = 40$)

电阻力数为 $\gamma = 8.05 \times 10^{-3}$ 。可以看出,电流平衡条件与电流密度平衡条件得到的速度剖面形态相同,但电流平衡条件得出的流动速度比电流密度平衡条件的速度略小。固壁附近局部速度的比较表示在图4中。结果显示,电流平衡条件得出的速度在固壁附近出现非物理的局部回流现象。可能的原因是采用了截面均匀的流动电位势所致^[5]。实际上,在固壁处的流体速度和流动电流密度 J_s 为零,见方程(4)。因此这里反向的传导电流密度 J_c 和流动电位 E 也应该为零,见方程(6)、(7)。这就导致固壁处的电阻力也为零。双电层电阻力 $\bar{f}_e = \sqrt{\rho_{dl}^2}$, 见方程(16), 表示在图5中,其中 $\alpha = 5.84$, $\beta = 185$, $\gamma = 8.05 \times 10^{-3}$ 。可以看出,电流平衡条件过高估计了双电层在固壁附近的电阻力作用,因此出现局部回流现象,而电流密度平衡条件得

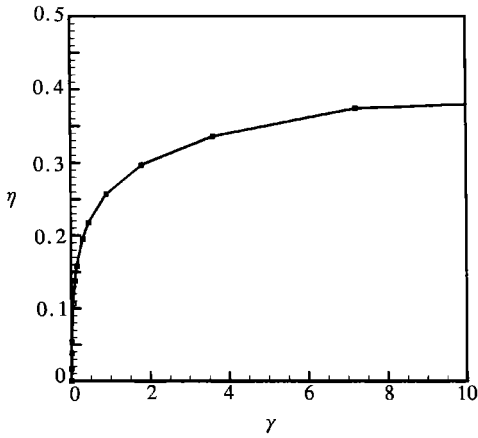


图9 流量损失系数与电阻力数的关系
($\alpha = 10, \beta = 40$)

数的增加而下降。双电层的阻力效应导致微通道流量减少。通道流量与电阻力数的关系表示在图8中。在相同压差时,通道流量随电阻力数的增加而下降。本文提出一个流量损失率来表达双电层阻力效应对通道流量的影响程度,定义如下:

$$\eta = 1 - \frac{Q}{Q_0} \quad (23)$$

这里, Q 、 Q_0 分别为考虑和不考虑双电层效应时的微通道流量。给定 $\alpha = 10, \beta = 40$, 图9显示微通道流量损失率 η 随电阻力数 γ 增加, 但不是线性增长。在 γ 数很小时, 流量损失率 η 快速增加。在大 γ 数时, η 增长缓慢。在本算例中, $\gamma > 10$ 时, 流量损失率几乎停止增长。可以预料, 在电阻力数超过某一个临界值时, 双电层的阻力效应不再继续增加。

4 结 论

本文研究结果表明, 微通道双电层对液体流动的阻力效应可以用无量纲电阻力数 $\gamma = \frac{e^2 \zeta^2}{(H^2 \mu \lambda)}$ 进行定量估算。阻力大小随液体介电常数和双电层 zeta 电位的平方增加, 与液体粘性系数、电导率以及通道横向尺度的平方成反比。这合理解释了微通道横向尺度缩小引起的附加阻力效应。本文在计算流动电位势时采用的电流密度平衡条件充分考虑双电层内部电阻力的不均匀性。它与传统的电流平衡条件一致, 而且消除了通道固壁附近不合理的局部回流现象。本文的数值结果显示, 双电层对微通道液体流动的阻力效应不会无限增加。

[参 考 文 献]

- [1] Mala G M, Li D, Werner C, et al. Flow characteristics of water through a microchannel between two parallel plates with electrokinetic effects[J]. Internat J Heat Fluid Flow, 1997, **18**(5): 489—495.
- [2] Mala G M, Li D. Flow characteristics of water in microtubes[J]. Internat J Heat Fluid Flow, 1999, **20**(2): 142—148.
- [3] YANG Chun, LI Dong-qing, Masliyah Jacob H. Modeling forced liquid convection in rectangular microchannels with electrokinetic effects[J]. Internat J Heat Mass Transfer, 1998, **41**(24): 4229—4249.
- [4] REN Li-qing, QU Wei-lin, LI Dong-qing. Interfacial electrokinetic effects on liquid flow in microchan-

出的速度是合理的。体积流量的比较表示在图6中。其中, 无量纲流量定义为

$$\bar{Q} = \frac{Q}{Q^*} = \frac{\int_0^H u dy}{U_0 H} = \frac{\bar{P}}{2} \int_0^1 \bar{u} d\bar{y}, \quad (21)$$

这里, $Q^* = U_0 H$, ($U_0 = 1$) 是一个参考流量。无量纲压强梯度定义如下:

$$\bar{P} = - \frac{H^2}{\mu U_0} \frac{dp}{dx} \quad (22)$$

可以看出, 电流平衡条件计算的微通道流量比电流密度平衡条件的流量略小。这再次说明, 电流平衡条件过量估计了双电层阻力的影响。不同电阻力数的微通道流动速度剖面表示在图7中, 其中 $\alpha = 10, \beta = 40$ 。可以看出, 流动速度随电阻力

- nels[J]. *Internat J Heat Mass Transfer*, 2001, **44**(16): 3125—3134.
- [5] Chun Myung_Suk, Lee Sang_Yang, Yang Seung_Man. Estimation of zeta_potential by electrokinetic analysis of ionic fluid flows through a divergent microchannel[J]. *J Colloid Interface Sci*, 2003, **266**(1): 120—126.
- [6] Dutta Prashanta, Beskok Ali, Warburton Timothy C. Numerical simulation of mixed electroosmotic/pressure driven microflows[J]. *Numer Heat Transfer, Part A*, 2002, **41**(2): 131—148.

Resistance Effect of Electric Double Layer on Liquid Flow in Microchannel

GONG Lei, WU Jian_kang

(Wuhan National Laboratory for Optoelectronics, Mechanics Department,
Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, P. R. China)

Abstract: Poisson-Boltzmann equation for electric double layer and Navier-Stokes equation for liquid flows to investigate resistance effect of electric double layer on liquid flow in microchannel were numerically solved. The dimension analysis indicates that the resistance effect of electric double layer can be estimated by an electric resistance number, which is proportional to the square of the liquid dielectric constant and the solid surface zeta potential, and inverse proportional to the liquid dynamic viscosity, electric conductivity and the square of the channel width. An electric current density balancing (ECDB) condition was proposed to evaluate the flow-induced streaming potential and electric resistance, instead of conventional electric current balancing (ECB) condition which may induce spurious local backflow in neighborhood of solid wall of the microchannel. The numerical results of the flow rate loss ratio and velocity profile are also given to demonstrate the resistance effect of electric double layer in microchannel.

Key words: microchannel; electric double layer; electric resistance number