

微尺度流道内液体表观黏性系数的分子理论^{*}

尤学一[†] 郑湘君 郑敬茹

(天津大学环境科学与工程学院, 天津 300072)

(2006 年 8 月 7 日收到, 2006 年 11 月 10 日收到修改稿)

在考虑分子间作用力的基础上, 讨论了各向同性壁面对微流道内非极性分子液体表观黏性系数的影响, 建立了考虑壁面影响的表观黏性系数分子理论公式. 研究结果显示, 在靠近壁面处, 壁面对表观黏性系数的影响是很大的, 这取决于壁面材料和流体介质的分子间作用力. 随着离开壁面距离的增加, 壁面对表观黏性系数的影响衰减很快. 在液态氩为流体介质的条件下, 壁面影响大约可涉及到第 10 层氩分子, 即影响深度为 4 nm 左右.

关键词: 微尺度流道, 表观黏性系数, 固壁影响, 分子理论

PACC: 4760, 0340

1. 引言

黏性系数是描述流动中输运现象的重要物理性质之一. 在宏观流动中, 对黏性系数已经有很深的了解, 并且有很可靠的实验方法来测定流体的黏性系数. 但是随着微电子机械系统 (MEMS) 的出现, 微尺度流动研究已成为一个热点问题^[1-3]. 在微尺度流动中, 观察到摩擦因子增加、边界滑移、动电效应等很多反常现象^[4-6], 使人们对传统的黏性系数是否适用于微流动产生了质疑. Pfahler 等^[4]用表观黏性代替传统的黏性值, 代入 Navier-Stokes 方程, 预测微流道中的流动行为, 他们的理论结果与实验数据相符合. Israelachvili^[7]测量了纳米流道中的正十四(碳)烷 ($\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{12}\text{CH}_3$) 和水的表观黏性, 测量表明, 当流道的尺度降到微纳米量级时, 液体的表观黏性与流道的宽度无关, 并与流体黏性有 20% 的差别. 目前对微流道中液体流动的研究才刚刚开始, 没有足够的实验数据可以利用, 而在微尺度下进行黏度测量又非常困难, 因此, 理论上计算流体的表观黏性系数就成为微流动研究的重要问题.

Kirkwood 等^[8,9]和 Eisenschitz^[10]最早研究了液体的微观结构, 即分子排布和动量输运的关系, 此后 Kirkwood-Eisenschitz 理论得到了不断完善. Billington 和 Tate^[11]较系统地论述了这种分子理论, 并通过分

子间作用力积分得到了液体的黏性系数. Xu 等^[12]将这种方法运用到微尺度下表观黏性系数的计算, 但他们在积分过程中未考虑壁面的影响, 即相当于研究了真空中一个小液滴的表观黏性. 固壁存在时, 由于积分球内含壁面分子, 文献 [12] 的方法就不适用了. 另外, 文献 [12] 研究的是极性物质水, 由于偶极矩的存在, 文献 [8,9] 的液体微观结构是否适用于此还有待商榷.

本文讨论了各向同性壁面对微流道内液体表观黏性系数的影响. 在考虑壁面存在的前提下, 利用文献 [11] 的理论, 得到了适用于微流道内表观黏性系数理论计算的公式. 为了验证结果的合理性, 选用了对称性好的液态氩作为计算实例.

2. 液体黏性系数的分子理论

宏观和微观系统的液体流动行为有很大区别^[11]. 对所有的宏观系统, 在其偏离平衡状态时, 即使没有外力的推动, 也会自发地返回到平衡态. 理论上, 所有的宏观系统都在向一个方向运动. 在热动力学中, 这种系统只向一个方向运动的性质用熵增原理来表示, 即任何孤立系统的熵, 在平衡时达到最大值, 而且孤立系统的熵不会减少. 对于宏观系统, 这种返回平衡态的不可逆过程需耗费有限的时间, 这种与时间有关的效应可用松弛时间来表征. 系统从

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 20376053, 20676093)和教育部留学回国人员科研启动基金资助的课题.

[†] E-mail: xyyou@tju.edu.cn

非平衡态返回到平衡态可用耗散过程来描述. 在连续性理论中, 用经验传输系数来描述耗散过程, 包括黏性系数、传热系数和扩散系数. 理论上需用相互作用的分子的集体行为来定义这些系数. 与宏观系统的不可逆过程相反, 在微观的分子水平上, 所有的物理机制都是可逆的, 表现为从描述该物理机制的方程中看不出该过程将沿着哪个时间方向发生. 比如对于两个气体分子间的碰撞过程, 可以用动量守恒和能量守恒来描述, 若两个分子沿着相反的轨道运动, 动量守恒和能量守恒仍旧适用. 一般而言, 至少在理论上这种微观可逆性同样适用于气态或液态复杂的多粒子相互碰撞过程. 这种微观可逆和宏观不可逆的矛盾称为 Loschmidt's 可逆性佯谬.

系统的宏观不可逆要求存在某个物理过程, 在系统向平衡态转移的过程中, 该物理过程可以消除系统初始时刻的非均匀性. 所以任何运动学理论在物理上都要求能明确地表示出相互作用的过程, 而该过程能保证宏观系统的不可逆. 不可逆也可以解释为在任意时刻系统对其历史没有记忆, 因此在向平衡态运动的过程中不可能返回. 对于液体, 假定向平衡态转移的不可逆过程和平衡态本身都是由相同的微观物理机制决定, 且都与分子间的作用力有关, 液体的黏性就可以由分子间的作用力来确定.

液体分子与周围分子间总是存在比较强的作用力. 设 t 时刻某个液体分子 α 所受的总的作用力为 $F(t)$. 经过一个很小的时间间隔 t' 后, 该分子所受的力为 $F(t+t')$. 显然由于分子的运动, $F(t+t')$ 与 $F(t)$ 大小和方向都不同. 理论上, 既然所有分子的运动方程都可解, 对于任何的时间间隔 t' , 都可以从 $F(t)$ 解得 $F(t+t')$. 但在实际计算中, 这是不可能实现的. 因此, 文献 [8] 假定经过某一时间间隔 τ 后, $F(t+\tau)$ 就与 $F(t)$ 统计无关了. τ 可取非常小, 以至在该时间间隔内液体的性质不会发生任何可觉察的变化.

当某个分子静止时, 其所受的力 $F(t)$ 在方向上是完全随机的. 但是液体中所有分子都是处于持续的运动中, 若该分子在某个时刻获得了速度 v , $F(t)$ 在方向上就不再是完全随机的. 平均来看, 该力会阻止分子的运动, 这种效果可以被解释成摩擦力. 假定摩擦力只是线性地依赖于分子的速度 v , 分子所受的合力可以写成^[8]

$$F(t) = -\beta m v + \alpha(t), \quad (1)$$

式中 $\alpha(t)$ 表示方向上完全随机的波动力, 始终作用

在该运动分子上, β 为摩擦系数, m 为分子质量. 像在布朗运动中那样, 力的非对称部分表达成一个稳态的阻力, 说明存在一个平均的过程来消除非对称效果.

Rice 和 Kirkwood^[13] 给出的 β 表达式为

$$\beta = \left[\frac{4\pi n}{3m} \int_0^\infty r^2 \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) g^{(2)}(r) dr \right]^{1/2} \quad (2)$$

式中 n 为分子平均密度, $g^{(2)}(r)$ 为密度径向分布函数, ψ 为分子对的对势. 这些函数的定义将在下面给出.

液体中的短程有序可用密度径向分布函数来表征. 假定 $n = N/V$ 表示系统内分子的平均密度, 离参考分子距离 r 的分子密度为

$$\rho(r) = \frac{dN}{4\pi r^2 dr},$$

其中 dN 表示厚度为 dr 的薄球壳内的粒子总数. 这种密度分布与角度无关, 即认为密度只是与参考粒子距离的函数. 可用下式定义密度径向分布函数 $g^{(2)}(r)$:

$$\rho(r) = n g^{(2)}(r). \quad (3)$$

由分子理论可知, 密度径向分布函数可通过相互作用的势函数来定义, 即

$$g^{(2)}(r) = \exp \left[-\frac{\psi(r)}{k\theta} \right], \quad (4)$$

式中 k 为玻尔兹曼常量, θ 为绝对温度. 若参考粒子处于球坐标系 (r, ϕ, θ) 的原点, 则平衡时 $g^{(2)}(r)$ 是球对称的, 并且只是 r 的函数. 对于非平衡系统如层流剪切流, 这种对称性很难维持, 径向分布函数要发生变形. 考虑牛顿型流体, 按照文献 [11] 方法假定这种变形与某个未知函数 ξ_D 成比例,

$$\frac{n^{(2)}(r, \phi, \theta, t) - g^{(2)}(r)}{g^{(2)}(r)} = \xi_D(r, \phi, \theta) = \hat{\xi}_D(r) \hat{R}(\phi, \theta), \quad (5)$$

式中 $n^{(2)}(r, \phi, \theta, t)$ 为概率分布函数, 表示由于动量流引起的非平衡,

$$\hat{R}(\phi, \theta) = \sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi \quad (6)$$

为方向因子, 未知函数 $\hat{\xi}_D(r)$ 代表纯粹的径向变形部分.

位于 (r, ϕ, θ) 处的微元体 δV 内的分子数为

$$\delta N = \rho(r, \phi, \theta) \delta V = \frac{N}{V} n^{(2)} \delta V. \quad (7)$$

这 δN 个分子对剪切应力张量的贡献为

$$\frac{N}{V} n^{(2)}(r \otimes F) \delta V$$

$$= \frac{N}{V} (\mathbf{r} \otimes \mathbf{F}) r^2 n^{(2)} \sin\theta \hat{R}(\phi, \theta) d\mathbf{r} d\theta d\phi. \quad (8)$$

分子间的作用力可由势函数的导数得出，

$$\mathbf{F} = - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{r}}. \quad (9)$$

对分子数积分后将 $n^{(2)}$ 及 \mathbf{F} 的表达式代入(8)式可得

$$\begin{aligned} T &= n^2 \int \left(\mathbf{r} \otimes \frac{d\psi}{d\mathbf{r}} \right) [\hat{\xi}_D \hat{R}(\phi, \theta) + 1] \\ &\quad \times g^{(2)}(r) r^2 \sin\theta \hat{R}(\phi, \theta) d\mathbf{r} d\theta d\phi \\ &= n^2 \int \left(\mathbf{r} \otimes \frac{d\psi}{d\mathbf{r}} \right) \hat{\xi}_D \hat{R}^2 g^{(2)}(r) r^2 \sin\theta d\mathbf{r} d\theta d\phi. \end{aligned} \quad (10)$$

考虑 $\hat{\xi}_D(r)$ 与变形率成正比这种最简单情况，得到

$$\hat{\xi}_D(r) = \frac{\beta m}{k\vartheta} u(r) \frac{\mathbf{r} \cdot (d\mathbf{r})}{r^2}, \quad (11)$$

式中 $\frac{\beta m}{k\vartheta}$ 为比例系数，未知函数 $u(r)$ 表示纯的径向变形部分，下面将给出其计算方法。对二维平行剪切流(11)式简化为

$$\hat{\xi}_D(r) = \frac{\beta m}{k\vartheta} u(r) \dot{\gamma}. \quad (12)$$

将 $\phi_D(r)$ 代入应力 T 的表达式，并考虑到

$$T = \eta \dot{\gamma}, \quad (13)$$

表观黏性系数 η 写为

$$\eta = \frac{\beta m n^2}{k\vartheta} \int \frac{d\psi(r)}{dr} g^{(2)}(r) u(r) r^3 \sin\theta d\mathbf{r} d\theta d\phi. \quad (14)$$

在(14)式中，只要确定函数 $u(r)$ 的分布，液体表观黏性系数即可求出。

Billington 和 Tate^[11]运用统计力学理论，从刘维方程推导出 $u(r)$ 满足的方程为

$$\begin{aligned} &\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left(\frac{2}{r} + \frac{1}{k\vartheta} \frac{d\psi(r)}{dr} \right) \frac{du(r)}{dr} - 6 \frac{u(r)}{r^2} \\ &= - \frac{r}{k\vartheta} \frac{d\psi(r)}{dr}. \end{aligned} \quad (15)$$

从方程(15)可以得到 $u(r)$ 一个与时间无关的解。文献[8,10]使用的边界条件为

$$u(r) = 0 \quad (r \rightarrow 0, \infty). \quad (16)$$

此边界条件保证了变形函数不会随分子间距无限增长，并且各处的分布函数保持有限值。需要指出的是，在此只考虑液体的表观黏性系数，因为液体分子很稠密，可以忽略分子动量对表观黏性系数的贡献^[11]。

3. 分子间的作用势

微观上，粒子间或分子间的作用势决定着液体的性质。在分子水平上，存在一个最基本的分子间作用势，表示分子或粒子间相互作用的强弱，通常为对势。在液体中要精确描述分子间的作用势是非常困难的，目前常用并且可合理地描述分子间作用的对势为

$$\psi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (17)$$

式中 ϵ 为势阱的深度，即分子间的最大引力势能， σ 为分子的碰撞直径。在 $r = \sigma$ 处，分子间的势能为零，即 $\psi(\sigma) = 0$ ，显然，该值大于分子的实际直径。上述模型就是著名的 Lennard-Jones 模型，该模型适用于非极性分子。

4. 各向同性物质壁面影响下表观黏性系数的分子理论

固壁的存在，使得表观黏性系数的精确计算变得异常困难，目前的理论尚难处理。为了考虑固壁存在对表观黏性系数的影响，在作了以下两个假定后，表观黏性系数模型就被简化并可以求解了。

假设 1 固壁的存在不影响液体分子的分布及液体分子间的作用力。

假设 2 对各向同性物质壁面，固壁分子均匀分布，并且固壁的径向分布函数为

$$g^{(2)}(r) = 1.$$

4.1. 摩擦系数计算

摩擦系数 β 的计算公式(2)是以参考分子为坐标原点的球坐标系中的表达式，并且已经完成了对角度的积分。若不对角度积分且积分球的半径取有限值， β 的表达式应为

$$\begin{aligned} \beta &= \left[\frac{n}{3m} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_d^{R_c} r^2 \left(\frac{d^2 \psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr} \right) \right. \\ &\quad \left. \times g^{(2)}(r) \sin\theta d\theta d\phi dr \right]^{1/2}, \end{aligned} \quad (18)$$

式中 r 的积分上限 R_c 为截断半径，下限 d 为分子间距； n 为分子数密度，液体为 n_l ，固壁部分为 n_s ； m 为参考分子的质量。参考分子离壁面的距离不同，积分球内液体分子和固壁分子的数量不同，相应的 β 也不同，因此， β 应为参考分子位置的函数。

积分球如图 1 所示,图中参考分子与壁面距离为 h ,角度 $\Theta = \arccos(h/R_c)$.在角度为 2Θ 的球冠内为固壁分子,其余为液体分子,对液体分子和固壁分子应分开计算.先假定积分球内的分子都是液体分子,由(18)式得

$$\beta_1^2 = \frac{4\pi n_1}{3m} \int_{r_a}^{R_c} r^2 \left(\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi_1}{\partial r} \right) g^{(2)}(r) dr. \quad (19)$$

在假设 1 下,液体的径向分布函数仍可取为

$$g^{(2)}(r) = \exp \left[-\frac{\psi_1(r)}{k\theta} \right]. \quad (20)$$

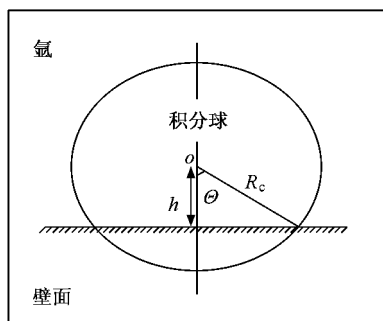


图 1 考虑壁面修正的积分球示意图

将图 1 所示的球冠内分别充满液体分子或换成固壁分子, B_l 和 B_{sl} 分别表示球冠内是液体分子或固壁分子时的摩擦系数,它们的平方差 $\Delta\beta^2$ 表示为

$$\Delta\beta^2 = \frac{1}{3m} (B_{sl} - B_l), \quad (21)$$

式中

$$\begin{aligned} B_l &= n_l \int_0^{2\pi} \int_0^\Theta \int_{h/\cos\theta}^{R_c} r^2 \left(\frac{\partial^2 \psi_l}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi_l}{\partial r} \right) \\ &\quad \times g^{(2)}(r) \sin\theta dr d\theta d\phi, \\ B_{sl} &= n_s \int_0^{2\pi} \int_0^\Theta \int_{h/\cos\theta}^{R_c} r^2 \left(\frac{\partial^2 \psi_{sl}}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi_{sl}}{\partial r} \right) \\ &\quad \times \sin\theta dr d\theta d\phi. \end{aligned}$$

那么,近壁参考分子 o 点处的摩擦系数为

$$\beta = \sqrt{\beta_1^2 + \Delta\beta^2}. \quad (22)$$

4.2. 表观黏性系数计算

黏性系数 η 表示为应力与应变之比.壁面的存在改变了近壁液体分子之间的作用场,使得近壁表观黏性系数发生改变,并成为位置的函数.为确定表观黏性系数 η ,需确定不同位置处微元体的应力和应变.根据上述理论,可用分子间的作用力来积分应力.微元体所受的应力为该微元体和周围分子作用

力之和.仍采用截断半径概念,只需考虑积分球内的分子.将微元体置于球坐标系的原点 o ,设积分球内的某个分子位于 $a(r, \phi, \theta)$ 点.若以 a 点为坐标原点建立球坐标系,并保持坐标轴方向不变,则 o 点在该坐标系中的坐标为 $(r, \pi + \phi, \pi - \theta)$, o 点的微元体体积 δV 为

$$\delta V = r^2 \sin(\pi - \theta) dr d(\pi - \theta) d(\pi + \phi). \quad (23)$$

若 o 点的分子数密度为(见(5)式)

$$\begin{aligned} n &= \frac{N}{V} n^{(2)} = \frac{N}{V} [\hat{\xi}_D(r) \hat{R}(\pi - \theta, \pi + \phi) \\ &\quad \times g^{(2)}(r) + g^{(2)}(r)]. \end{aligned} \quad (24)$$

该微元体对位置 a 的分子作用力

$$\begin{aligned} \frac{N}{V} n^{(2)}(r \otimes F) \delta V &= -\frac{N}{V} [\hat{\xi}_D(r) \hat{R}(\pi - \theta, \pi + \phi) + 1] \\ &\quad \times g^{(2)}(r) (r \otimes F) r^2 \sin(\pi - \theta) \\ &\quad \times \hat{R}(\pi - \theta, \pi + \phi) dr d\theta d\phi \end{aligned} \quad (25)$$

也可以视为分子 a 对该微元体的作用力.

由于 a 表示积分球内任意一点,可以对积分球内的所有分子积分,以获得作用在 o 点的微元体上的应力.而这些积分中含有 o 点微元体的应变,这就建立了 o 点微元体的应力与应变的关系.但该积分球中包括液体分子和固壁分子,需分开计算.仍采用上述积分 β^2 的方法,先假定积分球内都是液体分子,计算 o 点的剪切应力 T_l ,然后将球冠内的液体分子换成固壁分子,计算引起的 o 点剪切应力的变化.

$$\begin{aligned} T_l &= n_l^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\Theta \int_{r_a}^{R_c} \left(r \otimes \frac{d\psi_l(r)}{dr} \right) \hat{\xi}_D(r) \\ &\quad \times g^{(2)}(r) r^2 \sin^5(\pi - \theta) \cos^2(\pi + \phi) \\ &\quad \times \sin^2(\pi + \phi) dr d\theta d\phi \\ &\quad + n_l^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\Theta \int_{r_a}^{R_c} \left(r \otimes \frac{d\psi_l(r)}{dr} \right) g_l^{(2)}(r) r^2 \\ &\quad \times \sin^3(\pi - \theta) \cos(\pi + \phi) \sin(\pi + \phi) dr d\theta d\phi. \end{aligned} \quad (26)$$

(26)式右边第二部分对 ϕ 的积分为零,所以,

$$\begin{aligned} T_l &= n_l^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\Theta \int_{r_a}^{R_c} \left(r \otimes \frac{d\psi_l(r)}{dr} \right) \hat{\xi}_D(r) \\ &\quad \times g^{(2)}(r) r^2 \sin^5(\pi - \theta) \cos^2(\pi + \phi) \\ &\quad \times \sin^2(\pi + \phi) dr d\theta d\phi. \end{aligned} \quad (27)$$

若球冠内分别为固壁分子或液体分子,对剪应力的贡献为

$$\begin{aligned} C_{sl} &= n_l n_s \int_0^{2\pi} \int_0^\Theta \int_{h/\cos\theta}^{R_c} \left(r \otimes \frac{d\psi_{sl}(r)}{dr} \right) \hat{\xi}_D(r) \\ &\quad \times g^{(2)}(r) r^2 \sin^5(\pi - \theta) \cos^2(\pi + \phi) \\ &\quad \times \sin^2(\pi + \phi) dr d\theta d\phi, \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} C_1 = & n_1^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\Theta \int_0^{R_c} \left(\mathbf{r} \otimes \frac{d\psi(r)}{dr} \right) \hat{\xi}_D(r) \\ & \times g^{(2)}(r) r^2 \sin^5(\pi - \theta) \cos^2(\pi + \phi) \\ & \times \sin^2(\pi + \phi) dr d\theta d\phi, \end{aligned} \quad (29)$$

则 o 点的微元体所受的总剪切应力为

$$T = T_1 + C_{sl} - C_1. \quad (30)$$

(12) 式联系了 o 点处的 ϕ_D 与剪切率 $\dot{\gamma}$, 因此, 该点处的表观黏性系数可写为

$$\begin{aligned} \eta = & \frac{\beta m}{k\theta} \left[n_1^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\Theta \int_{r_a}^{R_c} \frac{d\psi(r)}{dr} g^{(2)}(r) u(r) r^2 \right. \\ & \times \sin^5 \theta \cos^2 \phi \sin^2 \phi dr d\theta d\phi \\ & + n_1 n_s \int_0^{2\pi} \int_0^\Theta \int_{h/\cos\theta}^{R_c} \frac{d\psi_{sl}(r)}{dr} g^{(2)}(r) u(r) r^2 \\ & \times \sin^5 \theta \cos^2 \phi \sin^2 \phi dr d\theta d\phi \\ & \left. - n_1^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\Theta \int_{h/\cos\theta}^{R_c} \frac{d\psi(r)}{dr} g^{(2)}(r) u(r) r^2 \right. \\ & \left. \times \sin^5 \theta \cos^2 \phi \sin^2 \phi dr d\theta d\phi. \right] \end{aligned} \quad (31)$$

5. 基本参数的确定

目前分子理论大多是在一定简化的基础上得到的. 对偶极矩分子, Kirkwood 理论是否成立还有待商榷. 为了确保结果的可靠性, 本文选用对称性好的液态氩作为流体介质, 计算了微流道内液态氩的摩擦系数和表观黏性系数.

假定固壁分子与氩分子间的作用势 ψ_{sl} 和氩分子间的作用势 ψ_l 都取不同参数的 Lennard-Jones 势能形式 (见 (17) 式). 对于氩分子的作用势, 取分子动力学模拟中氩分子的典型值, 即 $\frac{\varepsilon_1}{k} = 120 \text{ K}$ ($k = 1.38066 \times 10^{-23} \text{ J/K}$), $\sigma_1 = 0.0347 \text{ nm}$, 分子数密度 $n_1 = 0.81 \sigma_1^{-3}$, 分子间距 $d_1 = 1.07 \sigma_1$, 分子质量 $m = 0.004 N_A^{-1} \text{ kg}$, $N_A = 6.022 \times 10^{23}$. 若令固壁分子的数密度为 $n_s = C_n n_1$ (C_n 为常数), 则固壁分子间距

$$d_s = \frac{d_1}{\sqrt[3]{C_n}}.$$

固壁分子与氩分子间的作用势参数

$$\varepsilon_{sl} = C_\varepsilon \varepsilon_1,$$

σ_{sl} 满足关系式

$$\frac{\sigma_{sl}}{\sigma_1} = \frac{\frac{1}{2}(d_s + d_1)}{d_1} = \frac{\sqrt[3]{C_n} + 1}{2 \sqrt[3]{C_n}}.$$

假定流道半高为 $H = C_H \sigma_1$. 由于分子不能被穿

透, 所以在积分分子间力时, d_1 作为分子间力的积分下限. 又由于流道的对称性, 积分上限可取 H . 计算中取 $C_H = 100$, $C_n = 10$, $C_\varepsilon = 10$.

6. 计算结果

6.1. 摩擦系数

若积分球内全为液体分子, 积分下限取 $1.07 \sigma_1$ 时 (19) 式可得 $\beta_1 = 4.5397 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$. 本文的结果与文献 [8] 的结果 $\beta_1 = 7.3 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ 量级一致, 其差别来自于积分下限的选取. 文献 [8] 没有说明积分的下限. 若将积分下限改为 $1.008 \sigma_1$, 本文的结果与文献 [8] 结果一致. 但若取氩分子的典型值, 积分下限为 $1.07 \sigma_1$ 则更为合理.

图 2 给出了不考虑壁面修正的摩擦系数 β_1 和考虑壁面修正的摩擦系数 β 对应于离开壁面距离 h 的分布. 在靠近壁面处, 壁面对 β 的影响很大. 但随着 h 的增加, 壁面影响衰减很快. 在本文计算条件下, 壁面大约影响到第 8 层氩分子, 即影响深度为 3 nm 左右.

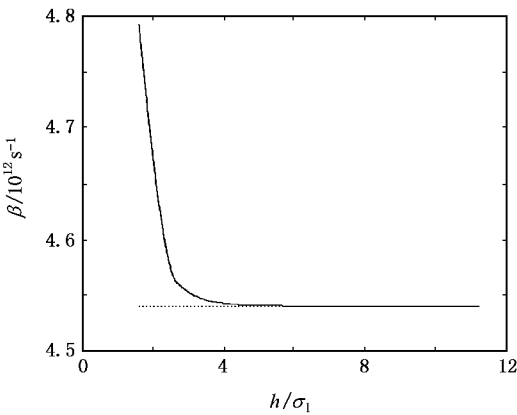


图 2 摩擦系数与离开壁面距离 h 的关系. 实线为考虑壁面修正, 虚线为不考虑壁面修正.

6.2. 黏性系数

仍考虑液态氩, 若积分球内都为液体分子, 计算液态氩的黏性系数 η_l . 在温度为 90 K 时, 黏性系数为 2.2723 mPas, 而此时的实验值为 2.390 mPas. 可以看出, 计算值略小于实验值, 这也是由积分下限造成的. 若调节积分下限, 同样可得到与实验值相同的结果.

图 3 表示了微流道内表观黏性系数随离开壁面距离 h 的变化. 可以看出, 壁面的作用对整个流道的表观黏性系数都有影响, 壁面的影响随 h 的增大而衰减很快. 显著的影响在近壁 10 层液体分子范围内, 即影响深度为 4 nm 左右.

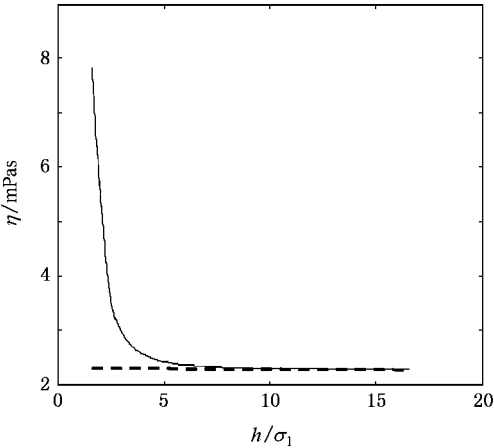


图 3 表观黏性系数与离开壁面距离 h 的关系 实线为考虑壁面修正, 虚线为不考虑壁面修正

7. 假设的合理性讨论

上述结果是在第 4 节的两个假设基础上得到的. 为了考察结果的正确性, 需要讨论这两个假设的合理性.

对于假设 1, 就理论而言, 由于固壁分子的作用力, 液体分子的分布必然改变, 这会改变液体分子

间的作用力, 使该作用力也成为壁面距离 h 的函数. 一般而言, 液体分子的排布是致密的, 改变液体分子分布需要做很大的功, 这说明液体分子间的相对位置是不易被改变的. 另一方面, 本文考虑的分子氩为非极性分子, 再加上分子体积小, 不易变形. 因此, 至少在讨论这类分子时, 假设 1 是合理的.

对假设 2, 无论固壁分子的排列是否符合点阵结构, 对各向同性固体, 固壁分子分布均匀假设是成立的. 同时, 固壁分子由于液体分子的作用力发生的位置改变也是可以忽略的. 因此, 假设 2 也是合理的.

实际壁面的影响可能不同于上述计算结果, 但对液态氩这类分子, 偏差应是很小的, 上述结果是可以接受的.

8. 结 论

在考虑分子间作用力的前提下, 讨论了各向同性壁面对微流道内液体表观黏性系数的影响, 提出了考虑壁面影响的流体表观黏性系数分子理论公式. 结果显示, 在靠近壁面处, 壁面对液体表观黏性系数的影响是很大的, 这取决于壁面材料与流体介质之间的分子作用力. 随着离开壁面距离的增加, 壁面的影响衰减很快. 在液态氩条件下, 壁面影响大约可涉及到第 10 层氩分子, 即影响深度为 4 nm. 本文没能考虑壁面对极性分子液体的影响情况, 更深入的研究是十分需要的.

[1] Ho C M , Tai Y C 1998 *Annu . Rev . Fluid Mech .* **30** 579

[2] Gad-el-Hak M 1999 *J . Fluid Eng .* **121** 5

[3] Ding Y T , He F , Yao Z H *et al* 2004 *Acta Phys . Sin .* **53** 2429 (in Chinese) [丁英涛、何 枫、姚朝晖等 2004 物理学报 **53** 2429]

[4] Pfahler J , Harley J , Bau H *et al* 1991 *Winter Meeting of ASME : Micromechanical Sensors , Actuators and Systems* **32** 49

[5] Pfahler J , Harley J , Bau H *et al* 1990 *Sensors Actuators A* **21—23** 431

[6] Peng X F , Peterson G P , Wang B X 1994 *Exp . Heat Transfer* **7** 249

[7] Israelachvili J N 1985 *Intermolecular and Surface Forces with Applications to Colloidal and Biological Systems* (New York , London : Academic Press)

[8] Kirkwood J G 1946 *J . Chem . Phys .* **14** 180

[9] Kirkwood J G , Buff F P , Green M S 1949 *J . Chem . Phys .* **17** 988

[10] Eizenschitz R 1949 *Proc . Phys . Soc . A* **62** 41

[11] Billington E W , Tate A 1981 *The Physics of Deformation and Flow* (New York : McGraw-Hill)

[12] Xu B , Ooi K T , Wong T N *et al* 1999 *J . Micromech . Microeng .* **9** 377

[13] Rice S A , Kirkwood J G 1959 *J . Chem . Phys .* **31** 901

Molecular theory of apparent viscosity of liquid in microchannels^{*}

You Xue-Yi[†] Zheng Xiang-Jun Zheng Jing-Ru

(*School of Environmental Science and Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China*)

(Received 7 August 2006 ; revised manuscript received 10 November 2006)

Abstract

By considering the effect of intermolecular force, the apparent viscosity of non-polar-molecular liquid flowing in microchannels with isotropic solid wall is studied. The molecular theory of apparent viscosity in microchannel taking into account the effects of channel walls is proposed. Numerical results show that the effect of the wall on liquid apparent viscosity can be very strong. The intensity of effect is determined by the intermolecular force between the liquid and the wall. Meanwhile, the effect of the wall decreases rapidly with the increase of distance from the wall. For liquid argon, the extent of influence is within 10 layers of molecules, which is about 4 nm from the wall.

Keywords : microchannel, apparent viscosity, wall effects, molecular theory

PACC : 4760 0340

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 20376053, 20676093) and the Scientific Research Foundation for the Returned Overseas Chinese Scholars from Ministry of Education, China.

[†] E-mail :xyyou@tju.edu.cn