

文章编号: 1000-8055(2000) 01-0085-04

微尺度沸腾的团聚过程分析与压力扰动模型

刘 冬 彭晓峰 王补宣
(清华大学 热能工程系, 北京 100084)

摘要: 本文从团聚(clustering)的分子动力学过程出发, 研究微尺度沸腾相变的物理机制。通过分析沸腾系统势能变化趋势, 指出核化阶段必然伴随团聚体积的增加, 从而导致压力扰动的产生。在微尺度条件下, 这种压力扰动将可能主导沸腾系统的相变行为。由此模型导出相变发生的临界尺度判据, 在量级上与实验取得很好的一致。

关键词: 沸腾; 团聚; 压力; 扰动

自由词: 微尺度

中图分类号: T Q 038. 1

文献标识码: A

1 引言

微尺度加工起源于现代高新科学技术的发展。尺度的微小化, 使流体的相态变化、能量和物质的传递规律与过程特性发生质的变化。这需要有不同于常规的传热模型, 对微尺度条件下液体沸腾机理进行再认识。

自 Tuckermann 和 Pease^[1,2]的开创性工作以来, 许多学者(如 Bowers 和 Mudawar^[3], Lin^[4]等)对微尺度下流体的传热及流动特性进行了长期的实验和理论研究。清华大学对微尺度空间的沸腾的研究^[5~8]发现在壁面过热度仅 2~8℃时, 微型槽道内的流动沸腾曲线进入旺盛沸腾工况, 却观察不到微槽内有蒸汽泡的生成和存在。为了解释这一奇异现象, 彭和王提出了“汽化空间”与“拟沸腾”的概念^[9,10]。

与此同时, 来自不同背景的相变研究者为了弥补传统核化理论缺乏坚实微观基础的不足, 对核化初期起决定性作用的团聚(clusters)进行了多方面的理论和实验研究。Susumn Kotade^[11]对这一领域的成果作了精辟的总结。Kwak^[12]对均匀核化进行了系列的研究, 得出很多有启发性的结果。

本文应用相变研究中有关 clustering(团聚)

的分子动力学成果, 结合液体结构理论, 试图建立一种压力扰动模型, 以深入理解微尺度条件下沸腾相变的物理机制。事实上, 这种模型给出了“汽化空间”与“拟沸腾”概念的清晰的物理图象, 同时由此推导出的临界尺度判据在量级上与实验取得很好的一致。

2 团聚与团聚过程

考虑温度为 T 和环境压力为 p_{∞} 的液体系统, 如果系统温度 T 高于饱和温度, 则系统处于一种亚稳态。下面考虑由活化的液体分子组成的团聚(clusters)的形成过程。

团聚是由具有较高能量的液体分子聚集而成的。分子间通过相互作用维系团聚的能量, 可用势能 U_n 描述

$$U_n = \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \int \epsilon_p(r) g(r) 4\pi r^2 dr$$

其中: $\epsilon_p(r)$ 为每一个分子对的势能, $g(r)$ 为径向分布函数。

由于热平衡时团聚构成的配分函数 Φ (partition function)与 $\exp(-U_n/kT)$ 相联系, 所以具有较低势能的团聚在统计上更能实现。对于例如相变的动态过程, 实际的团聚虽然不一定具有最小势能, 但趋向于更小的势能。

从分子碰撞动力学的角度来看, 团聚发展的

收稿日期: 1998-12-17; 修订日期: 1999-03-10

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(59625612)

作者简介: 刘冬(1974-), 男, 清华大学热能工程系, 硕士

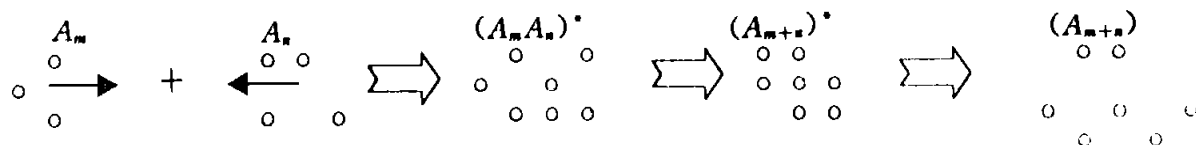


图 1 团聚的聚集过程

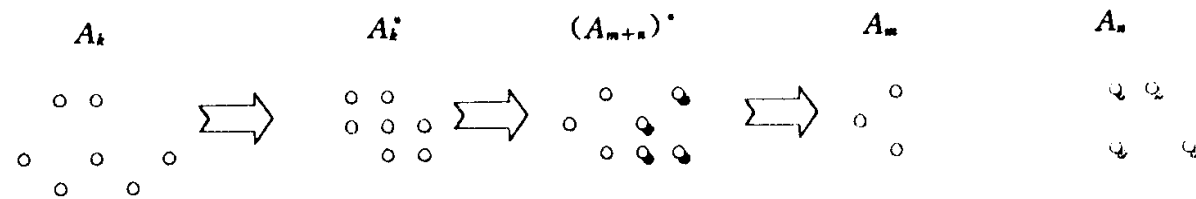


图 2 团聚的分离过程

动态行为与通常的化学反应相似。在聚集 (clustering) 开始时, 分子的吸附是主要过程; 随着团聚的成长, 其合并和破碎变得不可忽视。

团聚的形成过程包括 3 个连续阶段: (1) 团聚 A_m 和 A_n 碰撞形成非束缚耦合态 $(A_m A_n)^*$, $A_m + A_n \rightarrow (A_m A_n)^*$; (2) 非束缚耦合态 $(A_m A_n)^*$ 稳定为准耦合态 $(A_{m+n})^*$, $(A_m A_n)^* \rightarrow (A_{m+n})^*$; (3) 准耦合态进一步稳定, 形成束缚态 (A_{m+n}) , $(A_{m+n})^* \rightarrow (A_{m+n})$, 如图 1 所示。

上述高能量状态向较低能量状态的稳定过程要求能量从团聚分离并在其内部重新分配。正是这部分分离的能量提供了团聚集团体积增大所需的能量, 而团聚集团体积的增大也意味着与更多活化分子或其他团聚的碰撞。

团聚形成后, 在与其他分子或团聚的碰撞中, 合并的同时会导致分离, 尤其在外界扰动引起团聚的振动时, 更是如此。图 2 显示了团聚的分离。

因此, 团聚的形成过程其实就是聚集 (association) 与分离 (dissociation) 的竞争过程。所以, 当某种外界扰动导致分离过程占优势时, 团聚便不能持续发展。这一点由图 3 也可以看出。

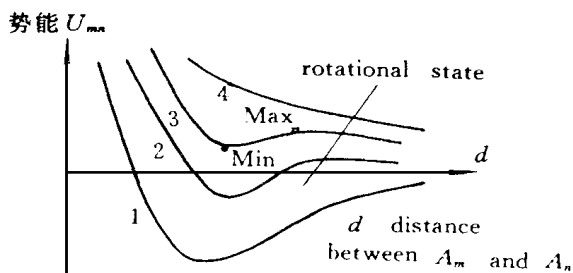


图 3 团聚过程势能曲线

$A_m A_n$ 体系势能曲线变化在状态 1 时, 为了达到较小的势能, d 趋向于较小值 (意味着聚集); 在状态 2 时, 为了达到较小的势能, d 趋向于较小值

(意味着聚集) 或较大值 (意味着分离), 这是一种亚稳态。当由扰动直接影响的振动和旋转程度增加到一定程度而处于状态 4 时, 为了达到较小的势能, d 只能趋向于较大值 (意味着分离), 因为只有能量趋于最小或更小值的过程才是统计上最可能实现的。

3 压力扰动模型

由 U_n 的表达式可知, 在团聚的发展中, 为达到统计上的最可几性, 必然伴随集团体积 V 的增加。下面将导出由此引起的一种扰动—压力脉冲, 并探讨它对微尺度相变起决定影响的可能性。

将团聚的发展过程简化或转化为扩展的团聚对其表面活化分子的吸附。图 4 中阴影区域是时刻团聚的集团体积 V , 其表面被具有临界能量的活化分子包围。由相平衡理论知道, 当具有高能的密度扰动半径增加到 r_c 时, 发生相变。这里我们认为过热液体中形成的团聚就是这种密度扰动, 因而对它的分析可以来研究相变过程。

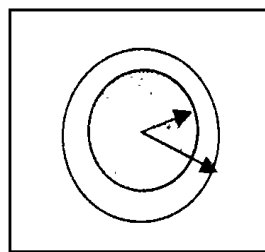


图 4 压力扰动模型

若 t 时刻团聚半径为 r , 则 dt 时刻后半径增量为 dr 。在体积元 $4\pi r^2 dr$ 内 (即 V 的表面层), 活化分子数为:

$$N = 4\pi r^2 dr / V_m \quad (1)$$

式中: $V_m = (4/3)\pi(d_m/2)^3$ 为单个活化分子体积。

同时, 若单位时间、单位体积内的核化率为 J_{nc} (nuclei/m³·s), 则在 dt 内 $4\pi r^2$ 表面沿径向单

位长度体积内的活化分子数为:

$$N = (J_{nc} \cdot 1m) \cdot n_c \cdot 4\pi r^2 dt = J_s \cdot n_c \cdot 4\pi r^2 dt \tag{2}$$

由于 dt 对应 dr , 将(1)和(2)式相等, 得 $4\pi r^2 dr / V_m = J_s \cdot n_c \cdot 4\pi r^2 dt$, 则: $dr / dt = J_s n_c V_m$

在 $T = \text{const}$ 时, $J_s = \text{const}$, 设 $t = 0$ 时, $r = 0$ 则:

$$r(t) = J_s n_c V_m t \tag{3}$$

所以团聚体积变化为 $dV = 4\pi (J_s n_c V_m)^3 t^2 dt$ 注意到团聚体积的增加将导致周围外部液体体积的压缩 $dV_{\text{外}} = -dV$

当外部液体按 Van der Waal 方程近似时, 有: $(p + a/v^2)(v - b) = RT$

所以, 在团聚附近外部液体

$$dp = \left[-\frac{RT}{(v-b)^2} + \frac{2a}{v^3} \right] dv = -\left[-\frac{RT}{(v-b)^2} + \frac{2a}{v^3} \right] \frac{1}{M} dV_{\text{外}}$$

令 $A = \left[-\frac{RT}{(v-b)^2} + \frac{2a}{v^3} \right] \cdot \frac{1}{M} 4\pi (J_s n_c V_m)^3$

有: $\int_{\infty} dp = \int A t^2 dt$

$$\text{则外部液体压力有: } p = p_{\infty} + \frac{A}{3} t^3 \tag{4}$$

实际上(3)式描述了紧贴团聚的一层外部液体中压力变化, 表明此层内外存在压力差; 因时间尺度很小, 故将此压力差视为一个压力脉冲: $\delta p = p - p_{\infty} = (A/3)t^3$ 。同时, 由(3)式可知团聚发展到 r_c 的时间为: $t_c = r_c / J_s n_c V_m$ 。对 120°C 的水, 可估算出: $A \cong 10^{13}$, $t_c \approx 10 \mu\text{s}$

过热液体中团聚的发展也就是聚集与分离的竞争过程。从图 3 中可以看出, 外界扰动对其发展具有重要的影响。空间尺度非常小的时候, δp 在通道内部传播, 会在壁面反射, 并作为外加压力场开始作用于团聚; 假定从团聚产生压力脉冲到反射回来作用于团聚的时间为 t ; 若 t 小于或等于 t_c , 那么压力扰动作为一种以与分子迁移直接相关的密度传播为形式的扰动, 将有可能导致团聚以分离的形式达到较小势能的发展要求, 即阻止尺度较大的团聚形成。显然, 依据相变理论, 形成气泡而沸腾的可能就不存在了。

4 临界尺寸判据

若液体状态方程按 Van der Waal 方程 $(p + a/v^2)(v - b) = Rt$ 。则压力场传播的速度(即声速)为: $c = (dp/d\rho)^{-1/2} = [v(v-b)]^{-1/2} RT - (2a/v)$ 。所以

在尺度为 L 的微通道内, 压力脉冲 δp 反射回到团聚的时间 $t \propto (2L/c)$ 。当 t 小于团聚形成核化的时间 t_c 时, 压力脉冲 δp 将阻止尺度较大的团聚形成。则不产生核化的临界判据为: $2L/c < t_c$ 即

$$L < (1/2) c t_c \tag{5}$$

以 $T = 120^{\circ}\text{C}$, $p = 1 \text{ MPa}$ 的水为例, $c = 477.22 \text{ m/s}$, $t_c \approx 10 \mu\text{s}$ 。由上面的数据得到临界尺寸 $L \propto 0.0024 \text{ m}$ 。

由图 5 中的实验数据可以看出: 当通道当量直径小到 $1 \sim 2 \text{ mm}$ 左右时, 水核化所要求的热流密度开始急剧增高, 意味着很难出现常态下核态沸腾。因此, 所估计的临界尺寸在量级上与实验是比较一致的。

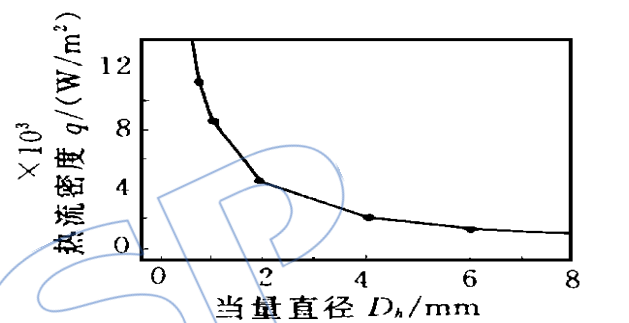


图 5 液体核化热负荷得临界值随通道当量直径得变化

存在加热面的非均匀核化情况下, 由于 t_c 会减小, 所以对应的临界尺寸相应减小, 即在更小的尺度下才能出现无相变的奇异现象。

5 “汽化空间”与“拟沸腾”的物理图象

文献[9]提出了“汽化空间”与“拟沸腾”的概念, 并指出其要点是热力学非平衡性。这两个概念在微尺度传热中的具体物理图象可由图 3 描述。

在常规尺度情况下, 由于压力扰动相对很小, 团聚的发展对应于曲线 1。若要系统势能 U_{mn} 尽可能小, 则要求 d 趋向减小, 意味着团聚 A_m 和 A_n 聚合长大。而尺度减小时, 压力扰动的影响逐渐增大, 团聚的发展曲线上移。当尺度减小到一定值时, 可以对应曲线 4, 很明显, 团聚 A_m 和 A_n 经碰撞能量重新分配后为达到较小的势能 U_{mn} , 趋向于增加彼此的距离, 意味着团聚的分离, 而不是形成更大的团聚以达到相变所要求的尺度。这就解释了微槽内观察不到蒸汽泡生成和存在的现象。

值得注意的是, 当外界扰动使得团聚发展曲线介于 1 和 4 之间, 如曲线 3 时, 向 Max 点两侧

的发展都可以使系统势能降低。由于系统是大量粒子的体系, 所以有部分团聚趋向 d 减小(聚合), 而部分团聚趋向 d 增大(分离)。在最近的进一步实验中发现, 即使在微尺度条件下, 或在微通道内存在较小空间尺度向较大尺度之间的跃变, 仍然会发生蒸汽泡的爆发。Peng 等^[13]在实验研究三角截面、尺度为 0.1~0.6 mm 大小的微通道内沸腾时, 观察到微槽板与玻璃盖板之间密封良好时没有气泡, 不好时则出现气泡。这种情况就属于微槽通道中存在空间尺度的跃变。对这一现象可作如下解释: 在较小尺度下, 压力扰动使发展曲线对应 4, 团聚难以长大; 当突然进入较大尺度时, 压力扰动骤减, 发展曲线跳跃到 2 和 3, 便会有部分团聚长大成泡。

6 结 论

由本文可以得出如下结论: (1) 基于分子动力学的团聚过程 (clustering) 分析可以定量地应用于微尺度传热理论研究, 它构成了“汽化空间”与“拟沸腾”的物理基础; (2) 压力扰动模型清晰地描述上述分析的具体物理过程, 其推论的有效性鼓舞了我们进一步将其深化的信心。

参 考 文 献

- 1 Tuckermann D B and Pease R F. High-Performance-Heat Sinking for VLS[J]. IEEE Electronic Device Lett. 1991, EDL-2, 126-129
- 2 Tuckermann D B and Pease R F. Optimized Convective Cool-

- ing Using Microcachined Structure[J]. J. Electrochem. Soc. 129(3), C98(1982)
- 3 Bowers M B, Mudawar I. High Flux Boiling in Low Flow Rate, Low Pressure Drop Mini-Channel and Microchannel Heat Sinks[J]. I. J. H. M. Trans., 1994, 37(2): 321-332
- 4 Lin L, U dell K S, Pisano A P. Liquid-Vapor Phase Transition and Bubble Formation in Micro Structures[J]. Thermal Science and Engineering, 1994, 2(1): 52-59
- 5 彭晓峰, 王补宣. 微型槽内液体受迫对流传热[C]. 全国高等学校工程热物理学会第五届学术会议论文集, 大连: 1994, 454-457
- 6 Peng X F, Wang B X. Forced Convection and Flow Boiling Heat Transfer for Liquid Flowing Through Microchannels[J]. Int. J. Heat Mass Transfer, 1993, 36(14): 3421-3427
- 7 Peng X F, Peterson G P, Wang B X. Heat Transfer Characteristics of Water Flowing Through Microchannels[J]. Int. J. Experimental Heat Transfer, 1995, 7(4): 265-283
- 8 彭晓峰, 王补宣, 胡杭英. 沸腾核化的异相扰动与叠加模型[J]. 工程热物理学报, 1996, 17(4): 457-461
- 9 彭晓峰, 王补宣. 液体内部汽化空间与拟沸腾[R]. 中国科学基金, 1994, 8(1): 7-12
- 10 Peng X F, Hu H Y, Wang B X. Boiling Nucleation During Liquid Flow in Microchannels[J]. Int. J. Heat Mass Transfer, 1998, 41(1): 101-105
- 11 Susumu Kotake. Microscale Energy Transport[M]. 1997, Chap. 5, 167-185
- 12 Kwak H Y, Sangbum Lee. Homogeneous Bubble Nucleation Predicted by A Molecular Interaction Model[J]. J. of Heat Transfer, 1991, 113: 714-721
- 13 Peng X F, Hu H Y, Wang B X. Flow Boiling Through V-shape Microchannels[J]. Experimental Heat Transfer, 1998, 11(1): 87-100

(责任编辑 杨再荣)

Clustering Process Analysis and Pressure Disturbance Model for Microscale Boiling

Liu Dong, Peng Xiaofeng, Wang Buxuan

(Thermal Engineering Department, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: The formation process of molecular clusters was considered in order to understand the boiling and nucleation of superheated liquid in microchannels and/or microstructure. The nucleation is inevitably accompanied with the volume increase of the clusters for the clusters to reach more stable state. This volume change causes pressure disturbance in the surrounding environment. Under microscale conditions, the pressure disturbance may play a leading role in phase change. The interaction of clusters with the pressure disturbance could cause the association and dissociation of clusters. The comparison between the propagation time of the pressure disturbance and the time of clusters growing to the critical radius in superheated liquid can determine whether the clusters are able to grow into boiling nuclei or vanish. Thus a critical microchannel size scale is obtained for "fictitious boiling". The estimated value is in a satisfactory agreement with experimental data for water.