

纤维表面 Zeta 电位对多孔纤维材料透湿性能的影响*

杨 静, 朱庆勇, 谢铭慧
(中山大学 工学院, 广东 广州 510275)

摘 要: 考虑双电层效应对多孔纤维材料热湿传递的影响, 根据双电层的 Poisson-Boltzmann 方程和液体运动的 Navier-Stokes 方程建立模拟多孔纤维材料热湿传递过程的数学模型, 并给定初始条件和边界条件, 数值计算了多孔纤维材料热湿传递过程中温度和电解液体积百分比的分布。和实验结果的对比表明该数学模型能很好的反映多孔纤维材料热湿传递过程, 也显示出双电层效应对多孔纤维材料热湿传递过程存在影响。

关键词: 双电层; 透湿性能; 多孔纤维材料

中图分类号: TS106 **文献标志码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2010) 04-0026-04

Effects of Zeta Potential on the Liquid Moisture Permeability in Porous Fibrous Media

YANG Jing, ZHU Qingyong, XIE Minghui

(School of Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: Based on the Poisson-Boltzmann equation for electric double layer and Navier-Stokes equation for the flow of liquid, a mathematical model to simulate the complex coupled heat and moisture transfer in porous fibrous media with consideration of the effects of electric double layer is presented. With specification of initial and boundary conditions, the distributions of the temperature and liquid water content in the porous fibrous media were numerically computed. The comparison with a series of experimental measurements, which shows the superiority of this model in resolving the coupled heat and liquid moisture transfer in porous fibrous media, illustrates that the heat and moisture transfer process is influenced by the electric double layer.

Key words: electric double layer; liquid moisture permeability; porous fibrous media

在组织工程领域, 如人造皮肤, 多孔纤维材料已得到广泛的应用, 其热湿传递过程也引起人们广泛关注。多孔纤维材料内部存在大量不同尺度的孔隙, 可以看做是不同直径彼此相通的微管道, 当液体在多孔纤维材料内部流动时, 液固两相之间能够进行比较充分的热湿传递。多孔纤维材料的热湿传递过程是一个多相耦合作用的复杂过程, 其中包括水蒸汽由于浓度差的扩散过程、液态水的蒸发过程、液体在表面张力作用下的毛细管运动过程以及

湿气在固相纤维中的吸附过程。大量实验结果表明, 微尺度下液体的流动情况和宏观尺度下有所不同, 一般认为是由于双电层的影响, 在宏观尺度下, 由于双电层厚度太小, 双电层效应几乎可以忽略, 而微尺度下, 双电层效应不可忽略^[1-3]。由于组成纤维材料的纱线内部孔隙尺寸一般在微米量级, 双电层效应对多孔纤维材料热湿传递存在一定影响。

Li 和 Zhu 等^[4-10] 在多孔纤维材料热湿传递方

* 收稿日期: 2009-12-04

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (40704007, 10572154); 教育部新世纪优秀人才支持计划资助项目 (NCET-06-0731); 中山大学优秀研究生导师逸仙创新人才培养计划资助项目

作者简介: 杨静 (1987 年生), 女, 硕士生; 通讯作者: 朱庆勇; E-mail: mcszqy@mail.sysu.edu.cn

面作了大量的研究及推导, 并建立了一个模拟多孔纤维材料热湿传递过程的数学模型, 得到了重要的结论, 但其研究还没有考虑双电层效应对多孔纤维材料热湿传递过程的影响。Hsu 等^[11]研究了电解液在通过由一簇圆柱组成的微管道时产生的电渗效应, 其结果表明, 双电层效应对微管道内流体的流场分布有着重要的影响, 当通道直径与双电层厚度的比值越小时, 其影响越大。Xuan 等^[12]研究了毛细管内电渗流的热效应, 结果显示双电层效应对毛细管内的热量传递有着关键的作用。

本文从双电层和液体流动的基本方程出发, 基于 Li 和 Zhu 的多孔纤维材料热湿传递过程的数学模型, 考虑双电层效应多孔纤维材料热湿传递过程的影响。通过理论推导电解液的扩散系数, 得到一个描述双电层效应的无量纲参数 Θ , 并通过数值计算不同 Θ 值的多孔纤维材料热湿传递过程, 对比其温度场分布和电解液体积百分比分布, 讨论双电层效应对多孔纤维材料热湿传递过程的影响。

1 数学模型

本文主要研究由蚕丝组成的多孔纤维材料。蚕丝纤维材料由大量蚕丝纱线通过特定编织而成, 而蚕丝纱线是由大量的蚕丝纤维通过加工捻成 (如图 1 所示)。这样在蚕丝纤维材料内部存在大量彼此相通的孔隙, 在毛细管力作用下, 电解液由高浓度区向低浓度区扩散, 同时伴随着电解液的相变过程。根据实际情况, 本文做如下假设: ①纤维材料处于局部热力平衡状态; ②忽略纤维材料内部电解液的惯性力; ③忽略纤维因吸附电解液而产生的几何变形。

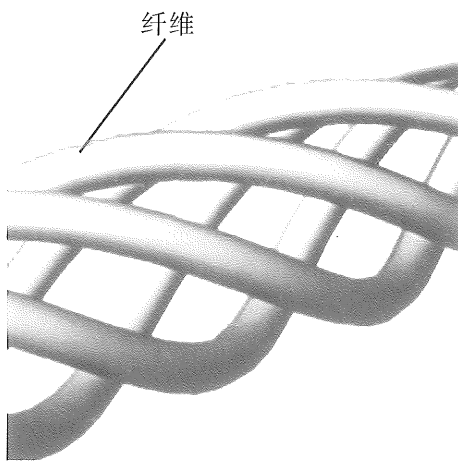


图 1 蚕丝示意图

Fig. 1 Structure of fibers

根据文献 [6], 电解液在纤维材料内部运动时, 气相水蒸汽质量方程可表示为方程 (1), 液相水的质量方程可表示为方程 (2), 能量守恒方程可表示为方程 (3)。

$$\frac{\partial(C_a \varepsilon_a)}{\partial t} + \varpi_1 \frac{\partial(C_f \varepsilon_f)}{\partial t} - h_{l \leftrightarrow g} S_v' (C^*(T) - C_a) = \frac{1}{\tau_a} \frac{\partial}{\partial x} \left[D_a \frac{\partial(C_a \varepsilon_a)}{\partial x} \right] \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho_l \varepsilon_l)}{\partial t} + \varpi_2 \frac{\partial(C_f \varepsilon_f)}{\partial t} + h_{l \leftrightarrow g} S_v' (C^*(T) - C_a) = \frac{1}{\tau_l} \frac{\partial}{\partial x} \left[D_l \frac{\partial(\rho_l \varepsilon_l)}{\partial x} \right] \quad (2)$$

$$c_v \frac{\partial T}{\partial t} = \varpi_1 \iota_{av} \frac{\partial(C_f \varepsilon_f)}{\partial t} + \varpi_2 \iota_{al} \frac{\partial(C_f \varepsilon_f)}{\partial t} - \iota_a h_{l \leftrightarrow g} S_v' (C^*(T) - C_a) + \frac{\partial}{\partial x} \left[K_{mix} \frac{\partial T}{\partial x} \right] \quad (3)$$

$$\varepsilon_l + \varepsilon_a + \varepsilon_f = 1 \quad (4)$$

纤维内电解液的吸附过程可以用 Fickian 定律描述^[13]

$$\frac{\partial C_f(x, r, t)}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r D_f(x, t) \frac{\partial C_f(x, r, t)}{\partial r} \right] \quad (5)$$

考虑电解液流经蚕丝纤维材料内部的微管道, 其动量方程为

$$\mu \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) = \frac{\partial p}{\partial x} - \rho_e E \quad (6)$$

双电层电位势 Ψ 和电荷密度 ρ_e 满足如下 Poisson-Boltzmann 方程

$$\nabla^2 \psi = \frac{2\chi \varepsilon n_0}{\varepsilon} \sinh\left(\frac{\chi e \psi}{k_b T}\right) \quad (7)$$

$$\rho_e = -\varepsilon \nabla^2 \psi = -2\chi \varepsilon n_0 \sinh\left(\frac{\chi e \psi}{k_b T}\right) \quad (8)$$

本文采用接近正态分布的三次多项式分布函数描述纤维材料内部不同尺度的孔隙分布, 并理论推导电解液的扩散系数^[14], 它由下式决定

$$D_l(\varepsilon_l) = \frac{5(7\varphi^{\frac{1}{3}} - 3\varepsilon_l^{\frac{1}{3}})}{126(5\varphi^{\frac{1}{3}} - 2\varepsilon_l^{\frac{1}{3}})} \cdot \frac{\sigma \cos \varphi \sin^2 \gamma \varepsilon_l d_{\max}}{\mu \varphi^{\frac{1}{3}} (4\varepsilon_l^{\frac{2}{3}} + \rho_e^2 \Theta \varphi^{\frac{2}{3}})} \quad (9)$$

其中, $\bar{\rho}_e = \rho_e / (-\varepsilon \zeta / r_c^2)$ 是电荷密度 ρ_e 的无量纲形式; $\Theta = \varepsilon^2 \zeta^2 / \mu \lambda d_{\max}^2$ 为描述纤维材料内部双电层效应的无量纲系数, 它与表面 Zeta 电势的平方、介电常数的平方成正比, 与最大孔隙直径的平方、液体的动力粘度、电导率成反比。由 Θ 的定义可知, Θ 值的大小主要由纤维表面 Zeta 电势和最大孔隙直径决定, Θ 值越大则双电层效应越明显。

2 物理模型

为了验证本文的数学模型, 下面分别计算了在

不同 Θ 值下的蚕丝纤维材料热湿传递过程。相同环境条件下,把蚕丝纤维材料拉成直线水平放置,一端浸泡在电解液上,电解液由于毛细管力向另一端扩散。为了方便与实验进行对比,本文定点计算距离纤维左端浸泡电解液处 2 cm 的点。根据实验的环境条件,设定环境初始温度 $T_0 = 22\text{ }^\circ\text{C}$,相对湿度 $\text{RH} = 70\%$ 。在 $t = 0$ 时,左边界条件由初始条件突然改变为: $T_1 = 21\text{ }^\circ\text{C}$,相对湿度 $\text{RH} = 100\%$,右边界条件和初始条件一样: $T_2 = 22\text{ }^\circ\text{C}$,相对湿度 $\text{RH} = 70\%$ 。不同 pH 值的电解液在蚕丝纤维材料内部流动时,纤维表面 Zeta 电势会有所不同,而不同编织工艺的蚕丝纤维材料内部最大孔隙直径也会有所不同。我们将计算出不同情况的 Θ 值,双电层效应的影响主要体现在 Θ 值上,然后研究不同 Θ 值的蚕丝纤维材料热湿传递过程中温度和电解液体积百分比随时间的变化关系。

图 2 给出了计算点的电解液体积百分比随时间的变化关系。不同 Θ 值对应不同的双电层效应,从而导致电解液体积百分比在纤维材料内部的分布情况不同。图 2 显示出,一开始在计算点处还不存在电解液,此时电解液的体积百分比为 0,电解液在毛细管力的作用下从左向右扩散,在一定时间后到达计算点。电解液到达指定位置后,电解液体积百分比开始发生剧烈变化,这是因为电解液在纤维中的扩散是一个很快的过程,电解液到达计算点处并达到平衡的时间大概是 0.03 min。从图 2 中也可以明显看到, Θ 值越大,电解液到达计算点处的时间越长,这是因为 Θ 值越大,双电层效应的影响越大,根据 (9) 式可知扩散系数 D_i 越小,表现为双电层效应阻碍电解液在纤维材料内部扩散,使得电解液到达计算点的时间越长。

3 实验及对比

为了验证模型的准确性,本文做了一系列的实验。把实验用的蚕丝纤维材料拉直水平放置,一端浸泡在电解液上,电解液由于毛细管力的作用向另一端扩散扩散,实验简图如图 3 所示。我们定点观察距离左端浸泡电解液处 2 cm 的位置,测量其温度随时间的变化情况。对于不同编织工艺样品有不同的最大孔隙直径,而不同的电解液渗透会导致纤维表面 Θ 电势的不同,两者综合考虑可以得到不同的 Θ 值。我们确保不同的实验其环境条件一致,然后用红外热像仪测量不同 Θ 值下纤维材料内温度的变化,并与数值计算结果作对比。为了精确,本文重复做了 3 次实验,并把 3 次实验的平均

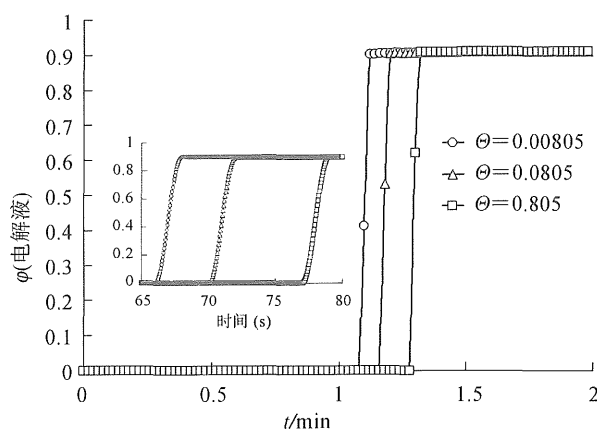


图 2 电解液体积百分比随时间的变化

Fig. 2 Distribution of liquid volume fraction

值和数值计算的模拟曲线做对比,图 4 给出了计算值与实验值的比较。一开始纤维材料温度与环境温度一致,同为 $22\text{ }^\circ\text{C}$,当电解液从左端由于毛细管力作用向右端扩散时,距离 2 cm 处的蚕丝纤维开始吸附水分子并且释放吸附热,使得温度上升,由于电解液的比热容较大,而且电解液蒸发也会带走热量,所以一段时间后,温度开始下降,最后和电解液的温度一致,同为 $21\text{ }^\circ\text{C}$ 。从图 4 中我们可以看到,当 Θ 值大的时候温度的峰值来得越迟,这是因为 Θ 值越大,双电层效应越明显,阻碍电解液扩散,电解液到达我们定点观察的位置越迟,从而使得温度峰值来得较迟。

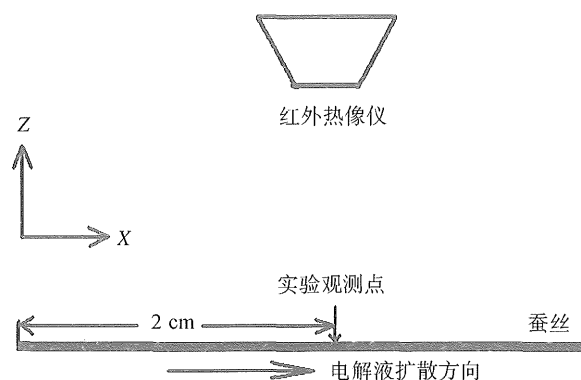


图 3 实验示意图

Fig. 3 Experimental installation

4 结论

本文研究了考虑双电层效应的蚕丝纤维材料热湿传递过程的数值模型,在该模型中,根据双电层的 Poisson-Boltzmann 方程和液体运动的 Navier-Stokes 方程出发,理论推导了双电层效应对纤维材

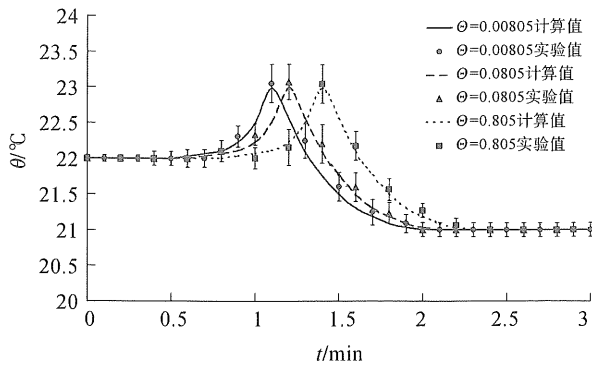


图4 温度计算值与实验值的比较

Fig. 4 Comparison between computational and experimental results of temperature

料热湿传递的影响,并给出了描述纤维内部双电层效应的无量纲系数 Θ ,它与表面 Zeta 电势、介电常数,最大孔隙直径、液体的动力粘度、电导率等有密切的关系。最后通过数值计算与实验结果对比分析了双电层效应在纤维材料热湿传递过程中的影响作用。计算结果与实验是吻合的,进一步说明本文模型的合理性。

参考文献:

- [1] PENNATHUR S, SANTIAGO J G. Electrokinetic transport in nanochannels [J]. *Analytical Chemistry*, 2005, 77(21): 6772 - 6781.
- [2] ZHOU X, HEROLD K E. Streaming potential effects in flows on bio chips [C]// Florida; 2003 Summer Bioengineering Conference, 2003.
- [3] 李卓,唐桂华,陶文铨. 微通道中极性流体流动特性的研究[J]. *西安交通大学学报*, 2007, 41(3): 274 - 278.
- [4] 朱庆勇,李毅. 一个多孔有机织物湿热传递过程的数学模式[J]. *计算力学学*, 2003, 20(6): 641 - 648.
- [5] LI Y, LI F Z, ZHU Q Y. Numerical simulation of virus diffusion in facemask during breathing cycles [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2005, 48: 4229 - 4242.
- [6] ZHU Q Y, LI Y. Effects of pore size distribution and fiber diameter on the coupled heat and liquid moisture transfer in porous fibrous media [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2003, 46: 5099 - 5111.
- [7] LI Y, ZHU Q Y, YEUNG K W. Influence of thickness and porosity on the coupled heat and liquid moisture transfer in porous fibrous media [J]. *Textile Research Journal*, 2002, 72(5): 435 - 446.
- [8] LI Y, ZHU Q Y. Simultaneous heat and moisture transfer with moisture sorption, condensation and capillary liquid diffusion in porous fibrous media [J]. *Textile Research Journal*, 2003, 73(6): 515 - 524.
- [9] LI Y, ZHU Q Y. A model of coupled liquid moisture and heat transfer in porous textiles with consideration of gravity [J]. *Numerical Heat Transfer: Part A*, 2003, 43(5): 501 - 523.
- [10] 谢铭慧,朱庆勇. 机织织物渗透率张量的分形分析[J]. *中山大学学报: 自然科学版*, 2008, 47(11): 50 - 56.
- [11] HSU J P, TING C C, LEE D J, et al. Residence time distribution for electrokinetic flow through a microchannel comprising a bundle of cylinders [J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2007, 307: 265 - 271.
- [12] XUAN X C, SINTON D, LI D Q. Thermal end effects on electroosmotic flow in a capillary [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2004, 47: 3145 - 3157.
- [13] LI Y, LUO Z. An improved mathematical simulation of the coupled diffusion of moisture and heat in wool fabric [J]. *Textile Research Journal*, 1999, 69(10): 760 - 768.
- [14] ZHU Q Y, LI Y. Numerical simulation of the transient heat and liquid moisture transfer through porous fibrous media with consideration of electric double layer [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2010, 53: 1417 - 1425.