

球形纳米颗粒 Brown 凝并碰撞效率的新表达式*

陈忠利¹, 游振江²

(1. 浙江大学 流体传动及控制国家重点实验室, 杭州 310027;

2. 澳大利亚阿德莱德大学 澳大利亚石油学院, 阿德莱德 SA 5005, 澳大利亚)

(林建忠推荐)

摘要: 研究了邻苯二甲酸二辛酯纳米颗粒在 Brown 凝并过程中的碰撞效率. 在考虑 Stokes 阻力、润滑力、van der Waals 力和颗粒变形恢复力的情况下推导了一组碰撞方程, 通过数值求解这组方程, 得到了当颗粒半径从 50 nm 到 500 nm 变化时, 颗粒碰撞效率和半径之间的关系, 计算得到的结果和实验结果符合较好. 计算结果表明, 在颗粒半径为 50 nm 到 500 nm 的情况下, 颗粒的碰撞效率随颗粒半径的增加而减小. 基于计算结果, 提出了颗粒碰撞效率的新表达式.

关键词: 纳米颗粒; Brown 凝并; 碰撞效率; Stokes 阻力; 润滑力

中图分类号: O359 **文献标志码:** A

DOI: 10.3879/j.issn.1000-0887.2010.07.006

引言

纳米颗粒输运和凝并的普遍性以及工业过程中的广泛应用说明了对它进行理论研究的重要性^[1-5]. 在城市里被污染空气中, 半径小于 500 nm 的纳米颗粒是不稳定的. 纳米颗粒之间的相互碰撞并且形成更大颗粒的过程叫做凝并. 对于半径小于 1 000 nm 的颗粒而言, 使颗粒发生凝并的主要驱动力是 Brown 运动^[6-8]. 换言之, 纳米颗粒的生长主要源于 Brown 凝并.

就 Brown 凝并而言, 单分散颗粒单位体积颗粒数的变化速率只正比于理想速率 k_0 和碰撞系数 α , 这里 k_0 是忽略颗粒间流体作用和胶体相互作用时得到的理想凝并效率, α 是两碰撞颗粒发生凝并的概率^[9]. Smoluchowski 通过理论推导获得了 k_0 的表达式, 因此, 获得准确的碰撞系数 α 变得尤为必要. 最近的 20 年间, 陆续有一些研究颗粒碰撞系数的论文发表. Russel 等^[10] 在考虑 van der Waals 力的情况下, 计算了纳米颗粒的 Brown 凝并效率. 为了预测单分散相颗粒系统的初始凝并效率, Chun 和 Koch^[9] 研究了单分散相纳米颗粒凝并过程中的非连续介质润滑力和 van der Waals 力. Feng 和 Lin^[11] 研究了在 van der Waals 力和变形力作用下的碰撞效率. 然而, 润滑力和 Stokes 阻力在纳米颗粒的碰撞过程中同样影响着碰撞效率. 迄今为止, 在同时考虑 Stokes 阻力、润滑力、van der Waals 力和变形恢复力的情况下, 计算碰撞系数仍然

* 收稿日期: 2009-04-20; 修订日期: 2010-06-01

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10602052)

作者简介: 陈忠利(1986—), 男, 杭州人, 博士生(联系人. Tel: +86-571-87952221; E-mail: chenzhongli-zju@gmail.com).

是一个没有被涉及的研究主题,因此,本文目的是在考虑 Stokes 阻力、润滑力、van der Waals 力和变形恢复力的情况下,得出邻苯二甲酸二辛酯纳米颗粒在 Brown 凝并过程中碰撞效率的一个新表达式。

1 有关作用力的表达式

1.1 Stokes 阻力定律及其修正

对于纳米尺度的颗粒,气体分子的平均自由程与颗粒的半径有相近的数量级.于是,非连续介质效应将影响颗粒的 Stokes 阻力. Cunningham 推导得到了一个修正因子 C_C 来修正 Stokes 阻力^[12]:

$$F_D = \frac{6\pi\mu RV}{C_C}, \quad (1)$$

式中, μ 是悬浮气体的粘度, R 是颗粒的半径, V 是颗粒相对于悬浮气体的速度. Cunningham 修正因子为 $C_C = 1 + 1.26\lambda/R$, 其中 λ 是气体分子的平均自由程. 方程(1)适用于半径大于 $0.05 \mu\text{m}$ 的颗粒. 如果两个颗粒的位置如图 1 所示, 颗粒不能被认为是彼此孤立的, 于是 Stokes 阻力定律将不再适用, 此时可以将 Cunningham 修正因子写成如下形式^[13]:

$$C_{sw} = 1 - \frac{9}{4} \times \frac{R^2}{(2R + h)^2}, \quad (2)$$

式中, h 是两个颗粒表面的距离, R 是颗粒的半径. 此时, 式(1)中的速度 V 为颗粒之间的相对速度。

1.2 颗粒间润滑力

润滑力的出现来自于两颗粒表面间液体被挤出缝隙时所产生的流体压力. 经典润滑理论给出的润滑力表达式为^[14]

$$F_{lc} = \frac{3\pi\mu R^2 v}{2h}, \quad (3)$$

式中, R 是颗粒半径, v 是两颗粒的相对速度, h 是两颗粒表面之间的最近距离。

由式(3)可知, 当两个粒子的距离趋向于 0 时, 润滑力将趋向于无穷大. 可以采用两个方法来解决这一问题, 方法一是考虑非连续介质的影响, 颗粒表面上采用的滑移边界, 另一方法是考虑颗粒的表面粗糙度。

对于半径为 $0.1 \mu\text{m}$ 到 $1 \mu\text{m}$ 的颗粒而言, 非连续介质效应必须在碰撞过程中予以考虑. 基于颗粒表面的 Maxwell 滑移边界条件, Hocking 推导了如下润滑力表达式^[15]:

$$F_{ln} = \frac{\pi\mu R^2 v}{12\lambda^2} \left[(h + 6\lambda) \ln \left(1 + \frac{6\lambda}{h} \right) - 6\lambda \right], \quad (4)$$

式中 λ 是气体分子的平均自由程。

把式(3)和式(4)整理成 Stokes 阻力的形式, 可以得到

$$F_{lc} = 6\pi\mu R v f_{lc}, \quad (5)$$

$$F_{ln} = 6\pi\mu R v f_{ln}. \quad (6)$$

图 2 给出了 $R = 250 \text{ nm}$ 和 $\lambda = 66 \text{ nm}$ 时两润滑力系数和颗粒间距 h 之间的关系. 可见考虑

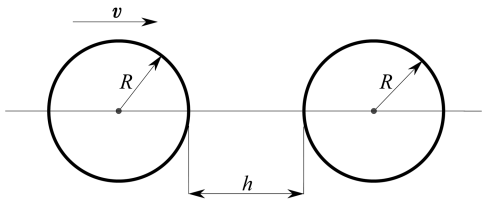


图 1 两颗粒相对位置示意图

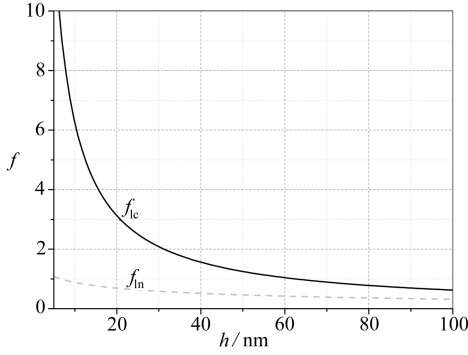


图2 连续介质和非连续介质润滑力的比较

非连续介质效应的润滑力系数远远小于连续介质假设下的润滑力系数。换言之,当两颗粒的距离趋向于0时,用式(4)计算的润滑力趋向于无穷大的速度远比用式(3)计算的慢。

此外,我们假设当两颗粒的表面距离 h 等于颗粒的表面粗糙度时,两颗粒发生接触。假设颗粒表面的相对粗糙度满足如下抛物型分布:

$$f(x) = -6000x^2 + 600x, \quad x \in [0, 0.1], \quad (7)$$

这样当 $h = 0$ 时,式(4)的奇点就可以避免。

1.3 颗粒间 van der Waals 力

颗粒间的相互吸引力即 van der Waals 力,产生于颗粒相互靠近过程中的电极化效应。当颗粒处于 μm 尺度或者更小时, van der Waals 力不能被忽略。根据 Hamaker 理论,分子间电势能的总和可以通过将所有颗粒对电势能求和得到。半径相等的两颗粒间相互作用的电势能由下式给出:

$$\Phi_v = -\frac{A}{6} \left[\frac{2R^2}{h^2 + 4Rh} + \frac{2R^2}{h^2 + 4Rh + 4R^2} + \ln \left(\frac{h^2 + 4Rh}{h^2 + 4Rh + 4R^2} \right) \right], \quad (8)$$

式中, A 是 Hamaker 常数, R 是两颗粒的半径, h 是两颗粒间的表面间隙距离。当两个颗粒非常靠近时,即 $h \ll R$ 时,式(8)可以写成如下简单的形式:

$$\Phi_v = -\frac{AR}{12h}. \quad (9)$$

特定介质中两相同颗粒之间的 Hamaker 常数可以用下式近似计算得到^[16]:

$$A = \frac{3}{4}kT \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_3}{\varepsilon_1 + \varepsilon_3} \right)^2 + \frac{3pv_e}{16\sqrt{2}} \frac{(n_1^2 - n_3^2)^2}{(n_1^2 + n_3^2)^{3/2}}, \quad (10)$$

式中, k 是 Boltzmann 常数, T 是绝对温度, p 是 Planck 常数, v_e 是自由电子气体的等离子体频率,通常情况下取 $3.0 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$, n_1 和 ε_1 分别是颗粒的折射率和介电常数, n_3 和 ε_3 分别是悬浮介质的折射率和介电常数。在本文所涉及的研究中,空气和邻苯二甲酸二辛酯分别作为悬浮介质和碰撞颗粒,由此可以得到 Hamaker 常数为 $6.8 \times 10^{-20} \text{ J}$ 。

Schenkel 和 Kitchener 在 Hamaker 方程中加入延迟效应,并通过数值积分方法得到了所推荐的最优近似。对于两半径相等的颗粒而言,该近似方程可以写成

$$\Phi_v = \begin{cases} -\frac{A}{12} \frac{R}{h} \frac{1}{1 + 1.77p}, & 0 < p < 0.57, \\ -A \frac{R}{h} \left[\frac{2.43}{60p} - \frac{2.17}{180p^2} + \frac{0.59}{420p^3} \right], & p \geq 0.57, \end{cases} \quad (11)$$

式中, $p = 2\pi h/\lambda_L$, $\lambda_L = 100 \text{ nm}$ 是 London 波长。

当两个颗粒已经碰到一起,颗粒间的 van der Waals 力可以表达为^[10]

$$F_v = \frac{AR}{12Z_0^2} + \frac{sRA}{6Z_0^3}, \quad (12)$$

其中, s 是每个颗粒的变形量, Z_0 是 van der Waals 力开始起作用的距离,通常将它取为 $16.5 \sim 40 \text{ nm}$ 。

1.4 颗粒间变形恢复力

图3显示了两半径相等的颗粒正发生一次对心碰撞, s 是两个颗粒的变形量. 颗粒间的碰撞过程可以分为两个阶段, 即压缩阶段和回弹阶段. 两个阶段的临界点是颗粒变形量达到最大的时候, 此时颗粒A的速度减小到0.

根据弹性理论, 当两半径相等的颗粒沿连心线相互挤压时, 每个颗粒将受到变形恢复力的作用, 其大小为

$$F_e = \frac{4E}{3(1-\nu^2)} \sqrt{R} s^{3/2}, \quad (13)$$

其中, E 是组成颗粒的材料的弹性模量, ν 是 Poisson 比. 也可以将上式写成另外一种形式^[17]:

$$F_e = \frac{4k_e}{3\pi} \sqrt{R} s^{3/2}. \quad (14)$$

式中 k_e 被定义为等效刚度系数并且只取决于颗粒的材料特性.

考虑颗粒发生非完全弹性碰撞的情况, 因此使用恢复系数 e 来描述两颗粒在回弹阶段的弹性恢复力. e 越小, 碰撞过程中的机械能损失就越大. 当碰撞过程中机械能损失足够大时, 颗粒就会发生凝并. 回弹阶段的变形恢复力由下式给出:

$$F_e = \begin{cases} \frac{4k_e}{3\pi} \sqrt{R} \left(s_m - \frac{1}{e}(s_m - s) \right)^{3/2}, & s \in [(1-e)s_m, s_m], \\ 0, & s \in [0, (1-e)s_m], \end{cases} \quad (15)$$

式中, s_m 是碰撞过程的最大变形量, s 的定义如图3所示.

2 双球碰撞模型

2.1 基本假设

关于碰撞模型, 引入如下假设:

- 1) 双颗粒中, 一颗粒在空间中被固定, 另一颗粒沿其连心线运动;
- 2) 运动颗粒在接近但还未碰到固定颗粒的过程中, 只受到 Stokes 阻力和 van der Waals 力作用;
- 3) 当两颗粒接触后, Stokes 阻力系数为常数.

2.2 两颗粒的接近过程

如图1所示, 一个颗粒以一初始速度向另一固定颗粒运动. 对运动颗粒使用 Newton 第二运动定律, 可以得到如下方程:

$$m \frac{dv}{dt} = F_v - F_f, \quad (16)$$

其中, $F_v = -d\Phi_v/dh$, Φ_v 由式(9)给出, F_f 表示总的流体阻力, 包括 Stokes 阻力 F_D 、非连续介质润滑力 F_{ln} , 具体表达式由式(1)和式(4)给出.

由于颗粒尺寸没有达到远远大于气体分子平均自由程的条件, 颗粒表面的滑移效应不能被忽略. 这里使用 Cuunningham 修正因子对 Stokes 阻力进行修正, 于是 F_f 可以写成

$$F_f = F_D/C_C + F_{ln}, \quad (17)$$

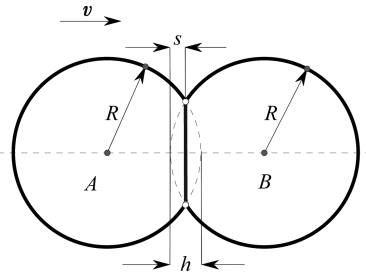


图3 两颗粒碰撞示意图

其中 C_c 是 Cuunningham 修正因子,即

$$C_c = 1 + \frac{1.26\lambda}{R}, \quad (18)$$

式中, λ 是气体分子的平均自由程, R 是颗粒的半径.

利用以下方程

$$\frac{dv}{dt} = \frac{dv}{dh} \frac{dh}{dt} = \frac{dv}{dh}(-v) = -\frac{1}{2} \frac{dv^2}{dh}, \quad (19)$$

式(16)可以转化成如下能量形式的方程:

$$-\frac{1}{2}m \frac{dv^2}{dh} = F_v - F_f. \quad (20)$$

2.3 颗粒压缩过程

在颗粒压缩过程的初始阶段,运动颗粒的速度等于两颗粒靠近过程结束时的速度.在压缩过程中,考虑颗粒 van der Waals 力、流体阻力和变形恢复力对颗粒运动的影响.如图3所示,运动颗粒的运动方程可以表示为

$$m \frac{dv}{dt} = F_v - F_e - F_f. \quad (21)$$

利用式(12)和式(14)计算 F_v 和 F_e , 并且利用式(17)计算 F_f . 为了避免在计算 F_f 时所产生的奇异性,令颗粒间距 h 等于 H_s , H_s 称为颗粒碰撞距离并且等于两碰撞颗粒的表面粗糙度.当使用式(12)计算 van der Waals 力时,取 $Z_0 = 20 \text{ nm}$.

利用同样的方法,可以得到压缩过程中以能量形式表述的运动方程:

$$\frac{1}{2}m \frac{dv^2}{dh} = F_v - F_e - F_f. \quad (22)$$

为了求解该常微分方程,必须得到如图3所示的压缩过程中颗粒A的初始速度.

2.4 颗粒回弹过程

在回弹过程中,考虑压缩过程中所提及的力,运动方程为

$$m \frac{dv}{dt} = F_e - F_f - F_v, \quad (23)$$

$$-\frac{1}{2}m \frac{dv^2}{dh} = F_e - F_f - F_v. \quad (24)$$

为了引入颗粒在碰撞过程中出现的机械能损失,式(15)将用来计算变形恢复力,方程中的恢复系数 e 取 0.7. 式(24)中的流体阻力和 van der Waals 力可以用和压缩过程中相同的表达式求得.该过程的初始条件可以表示为

$$\begin{cases} v|_{t=0} = 0, \\ h|_{t=0} = 2s_m, \end{cases} \quad (25)$$

式中 s_m 是压缩过程结束时颗粒所产生的最大变形量,可以由压缩过程确定.

3 碰撞系数的确定

两相互作用的颗粒经过接近、变形、回弹过程,最终发生分离或者凝并.在碰撞过程中,由于颗粒发生了非完全弹性碰撞,系统的机械能将有所损失.因此,如果颗粒速度在回弹阶段结束之前减小到0,则两颗粒被认为发生了凝并,反之,两颗粒将发生分离.如下文中将要指出的那样,给定半径的两颗粒碰撞的结果(凝并或者分离)取决于两碰撞颗粒表面的粗糙度.假设

颗粒表面的相对粗糙度服从如式(7)所给出的抛物线分布,则可以通过计算颗粒的临界粗糙度来确定 Brown 凝并碰撞效率,计算公式为

$$\alpha = \int_{R_c}^{0.1} f(x) dx, \quad (26)$$

式中 R_c 是用颗粒半径进行无量纲化的临界相对粗糙度. 颗粒的临界粗糙度被定义为当回弹阶段颗粒变形恢复力减小到 0 时,运动颗粒的速度恰好也减小到 0 这种情况下所对应的颗粒粗糙度. 如果颗粒的表面粗糙度大于临界值,两颗粒碰撞的结果将发生凝并,反之,两碰撞颗粒将发生分离.

4 结果和讨论

4.1 数值方法和计算设定

式(20)、(22)和(24)可以用四阶 Runge-Kutta 法数值求解. 为了适合用这种方法求解,将方程整理成如下形式:

$$\begin{cases} \frac{dv^2}{dh} = -2 \times \frac{F_v - F_f}{m} = f_1(h, v^2), & \text{接近过程,} \\ \frac{dv^2}{dh} = 2 \times \frac{F_v - F_e - F_f}{m} = f_2(h, v^2), & \text{压缩过程,} \\ \frac{dv^2}{dh} = -2 \times \frac{F_e - F_f - F_v}{m} = f_3(h, v^2), & \text{回弹过程.} \end{cases} \quad (27)$$

这里将利用邻苯二甲酸二辛酯气溶胶颗粒凝并的实验结果来证实本文的双球碰撞模型. 邻苯二甲酸二辛酯气溶胶颗粒的参数由表 1 给出,假定颗粒的半径为 250 nm.

表 1 邻苯二甲酸二辛酯气溶胶颗粒有关参数

ρ	$R \times 10^{-9}$	$A \times 10^{-20}$	k_e	e
982	250	6.8	$f(R)$	0.7

在表 1 中, ρ, R, A, k_e, e 分别代表邻苯二甲酸二辛酯气溶胶颗粒的密度、颗粒半径、系统的 Hamaker 常数、给定半径颗粒的等效刚度系数和碰撞的恢复系数. 空气粘度和空气分子的平均自由程分别取其典型值,即 $17.9 \times 10^{-6} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ 和 $66 \times 10^{-9} \text{ m}$, $f(R)$ 通过实验数据来确定^[18].

利用双球体颗粒碰撞模型,可以发现当颗粒间的初始距离足够大时,运动颗粒初始速度的选取不是非常重要,它几乎不会影响颗粒碰撞的结果. 表 2 给出了碰撞模型参数以及数值计算参数的设定.

表 2 碰撞模型参数以及数值计算参数的设定

H_R	H_0	V_0	H_s	$Z_0 \times 10^{-9}$	$D \times 10^{-5}$	$D_s \times 10^{-7}$
0.05	1	1	0.01	20	1	1

表 2 中, H_R 为速度参考点所对应的颗粒相对间距,运动颗粒在该点的受力平衡速度将用来无量纲化整个过程中的运动速度, H_0 为两颗粒之间的初始相对距离(用颗粒半径进行无量纲化), V_0 为运动颗粒的初始相对速度, H_s 为相对碰撞距离(即颗粒的相对粗糙度), Z_0 为 van der Waals 力开始产生作用的距离, D 为两颗粒接近过程中的数值迭代步长, D_s 为压缩和回弹过程中的迭代步长. 除 Z_0 外的所有参数都用颗粒半径和参考速度进行无量纲化.

如果取等效刚度系数 k_e 为 2.43×10^6 , 可以用四阶 Runge-Kutta 法来确定运动颗粒在整个过程中的相对速度. 图 4、图 5 和图 6 分别给出了运动颗粒相对速度和颗粒间距及压缩变形之

间的关系. 从图 6 可以看出, 在碰撞过程结束之后, 颗粒的速度并没有减小到 0, 于是可以认为两碰撞颗粒最终发生了分离. 如果减小颗粒的相对碰撞距离 H_s , 当碰撞距离大于临界碰撞距离 H_{sc} 时, 两颗粒将发生凝并.

表 3 给出了其它参数不变的情况下, 相对分离速度和相对碰撞距离之间的关系. 由此可以确定临界相对碰撞距离在 0.06 到 0.08 之间.

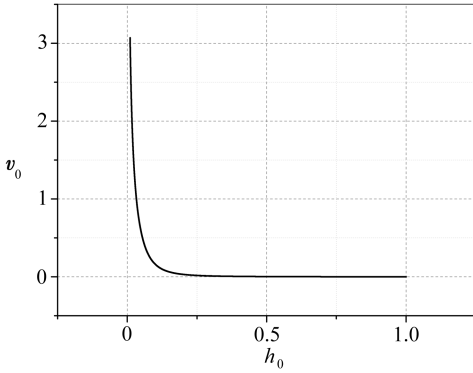


图 4 颗粒接近阶段相对速度和相对距离的关系

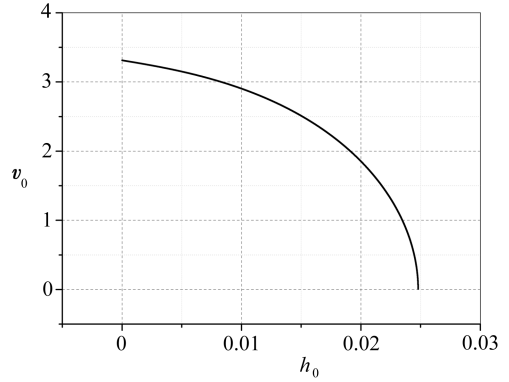


图 5 颗粒压缩阶段相对速度和相对距离的关系

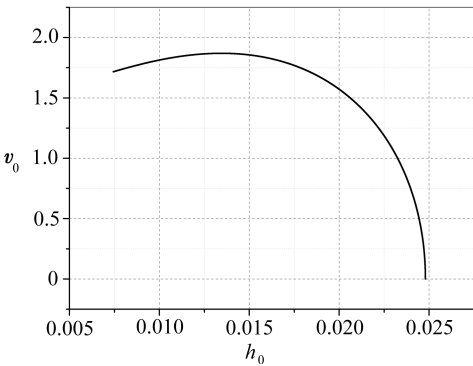


图 6 颗粒回弹阶段相对速度和相对距离的关系

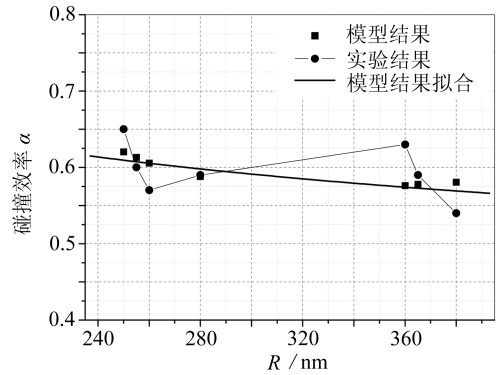


图 7 碰撞效率和颗粒半径之间的关系

表 3 相对分离速度和相对碰撞距离之间的关系

H_s	0.1	0.08	0.06	0.04	0.02	0.01
v_t	0.000 0	0.000 0	0.016 8	0.319 3	0.885 7	1.716 7

4.2 碰撞效率的计算

利用 Devir^[18] 给出的实验数据, 可以确定颗粒的等效刚度系数为

$$k_e = 0.011 5R - 1.741 1, \quad (28)$$

式中, k_e 和 R 的单位分别为 10^6 Pa 和 nm.

由此可以利用双球碰撞模型来确定不同半径颗粒之间的临界相对碰撞距离. 表 4 给出了计算得到的结果.

表 4 不同半径颗粒之间的临界相对碰撞距离

R/nm	250	255	260	280	360	365	380
R_c	0.041 9	0.042 4	0.042 9	0.044 1	0.044 9	0.044 8	0.044 6

由于假设颗粒的相对表面粗糙度服从抛物线分布,所以颗粒间的碰撞效率可以由式(26)和表4来确定.表5给出了不同半径颗粒的碰撞效率.

表5 不同半径颗粒的碰撞效率

R/nm	250	255	260	280	360	365	380
α	0.620 4	0.613 1	0.605 7	0.588 1	0.576 2	0.577 7	0.580 7

根据 Chun 等^[9]给出的碰撞效率表达式,对表5给出的数据进行非线性拟合.图7同时给出了碰撞系数的拟合曲线以及 Devir^[18]的实验数据,该拟合曲线可以由下式给出:

$$\alpha = \left(1.079\ 1 + 0.277\ 4 \ln \frac{2R}{\lambda} \right)^{-1}, \quad (29)$$

式中 λ 为气体分子的平均自由程,这里取 66 nm.

Chun 等^[9]给出了不考虑非连续介质效应条件下的颗粒碰撞效率表达式

$$\alpha = \left(1.235\ 9 + 0.25 \ln \frac{2R}{\lambda} \right)^{-1}. \quad (30)$$

图8比较了利用式(29)和式(30)计算得到的碰撞效率.由于式(30)中没有考虑颗粒间的 van der Waals 力,所以计算得到的碰撞效率比实验数据和式(29)的计算结果都小.正如图8所示, van der Waals 力对颗粒碰撞效率的影响随着颗粒半径的增加而减小.

利用多项式修正 Chun 的碰撞效率公式,可得

$$\begin{aligned} \alpha = C_4 \left(1.235\ 9 + 0.25 \ln \frac{2R}{\lambda} \right)^{-1} = \\ (0.281\ 8R^4 - 0.763\ 5R^3 + 0.777\ 1R^2 - 0.383\ 5R + \\ 1.120\ 1) \left(1.235\ 9 + 0.25 \ln \frac{2R}{\lambda} \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (31)$$

式中 R 的单位为 μm .

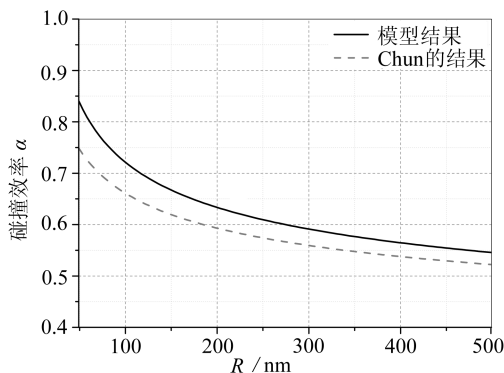


图8 双球模型结果和Chun的结果的比较

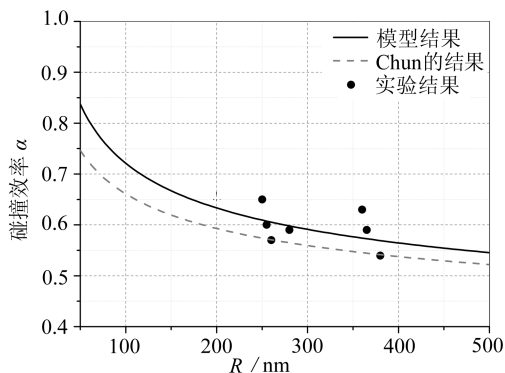


图9 用式(30)、(31)计算的碰撞效率和实验结果比较

图9对用式(30)、(31)计算的碰撞效率和实验结果进行了比较,可见用式(30)计算的结果比用式(31)计算的结果与实验结果吻合得更好.由图可见,由于 van der Waals 力的存在,颗粒的碰撞效率随颗粒半径的减小而增大.很显然,变形恢复力在双球碰撞模型中是非常重要的,因为只有它才能真正和 van der Waals 力抗衡.可以肯定的是,变形恢复力在气溶胶凝并过程中具有重要的作用,并且从某种程度上减小了颗粒的碰撞系数.

5 结 论

Brown 凝并在纳米颗粒生长过程中起着重要的作用,两颗粒是否发生凝并和颗粒的碰撞系数有关,而颗粒的碰撞系数取决于颗粒碰撞模型和因颗粒变形而引起的恢复力.本文在考虑 Stokes 阻力、润滑力、van der Waals 力和变形恢复力的条件下,建立并数值求解了双球碰撞模型的碰撞方程,由此得到了半径为 50 nm 到 500 nm 的单分散相邻苯二甲酸二辛酯球形纳米颗粒的碰撞效率,本文所得到的结果和实验结果符合较好.结果表明,碰撞效率随着颗粒半径的增加而减小,颗粒间的变形恢复力不能忽略,因为它是唯一能够减小碰撞效率的力.van der Waals 力在颗粒碰撞过程中也非常重要.最后,本文提出了计算碰撞效率的一个新表达式.

参考文献:

- [1] LIN Jian-zhong, LIN Pei-feng, CHEN Hua-jun. Research on the transport and deposition of nanoparticles in a rotating curved pipe[J]. *Physics of Fluids*, 2009, **21**(12):1-11.
- [2] YU Ming-zhou, LIN Jian-zhong. Taylor-expansion moment method for agglomerate coagulation due to Brownian motion in the entire size regime[J]. *Journal of Aerosol Science*, 2009, **40**(6):549-562.
- [3] YU Ming-zhou, LIN Jian-zhong, CHAN Tat-leung. Effect of precursor loading on non-spherical TiO₂ nanoparticle synthesis in a diffusion flame reactor[J]. *Chemical Engineering Science*, 2008, **63**(9): 2317-2329.
- [4] YU Ming-zhou, LIN Jian-zhong, CHAN Tat-leung. Numerical simulation of nanoparticle synthesis in diffusion flame reactor[J]. *Powder Technology*, 2008, **181**(1): 9-20.
- [5] Yin Z Q, Lin J Z, Zhou K, Chan T L. Numerical simulation of the formation of pollutant nanoparticles in the exhaust twin-jet plume of a moving car[J]. *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulations*, 2007, **8**(4): 535-543.
- [6] YU Ming-zhou, LIN Jian-zhong, CHEN Li-hua, CHAN Tat-leung. Large eddy simulation of a planar jet flow with nanoparticle coagulation[J]. *Acta Mechanica Sinica*, 2006, **22**(4): 293-300.
- [7] Chan T L, Lin J Z, Zhou K, Chan C K. Simultaneous numerical simulation of nano and fine particle coagulation and dispersion in a round jet[J]. *Journal of Aerosol Science*, 2006, **37**(11): 1545-1561.
- [8] Lin J Z, Chan T L, Liu S, Zhou K, Zhou Y, Lee S C. Effects of coherent structures on nanoparticle coagulation and dispersion in a round jet[J]. *Int J Nonlinear Sciences and Numerical Simulation*, 2007, **8**(1):45-54.
- [9] Chun J, Koch D L. The effects of non-continuum hydrodynamics on the Brownian coagulation of aerosol particles[J]. *Journal of Aerosol Science*, 2006, **37**(4): 471-482.
- [10] Russel W B, Saville D A, Schowalter W R. *Colloidal Dispersions*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1989.
- [11] FENG Yu, LIN Jian-zhong. The collision efficiency of spherical dioctyl phthalate aerosol particles in the Brownian coagulation[J]. *Chinese Physics B*, 2008, **17**(12): 4547-4553.
- [12] Cunningham E. On the velocity of steady fall of spherical particles through fluid medium[J]. *Proc Roy Soc London Ser A*, 1910, **83**(563): 357-369.
- [13] Yan Z Y. *Theory of Flow With Low Reynolds Number*[M]. Beijing: Peking University Press, 2002.

- [14] Zhang W B, Noda R J, Horio M. Evaluation of lubrication force on colliding particles for DEM simulation of fluidized beds[J]. *Powder Technology*, 2005, **158**(1/3): 92-101.
- [15] Hocking L M. The effect of slip on the motion of a sphere close to a wall and of two adjacent spheres[J]. *J Engineering Mathematics*, 1973, **7**(3): 207-221.
- [16] Israelachvili J. *Intermolecular and Surface Forces*[M]. New York: Academic, 1992.
- [17] Zhang J P, Fan L S, Zhu C, Pfeffer R, Qi D. Dynamic behavior of collision of elastic spheres in viscous fluids[J]. *Powder Technology*, 1999, **106**(1/2): 98-109.
- [18] Devir S E. On the coagulation of aerosols III: effect of weak electric charges on rate[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1967, **23**(1): 80-89.

New Expression for Collision Efficiency of Spherical Nanoparticles in Brownian Coagulation

CHEN Zhong-li¹, YOU Zhen-jiang²

(1. State Key Laboratory of Fluid Power Transmission and Control,
Zhejiang University, Hangzhou 310027, P. R. China;

2. Australian School of Petroleum, University of Adelaide, Adelaide SA 5005, Australia)

Abstract: The collision efficiency of dioctyl phthalate nanoparticles in the Brownian coagulation was studied. A set of collision equations were solved numerically to find the relationship between the collision efficiency and the particle radius varying from 50 nm to 500 nm in the presence of Stokes resistance, lubrication force, van der Waals force and elastic deformation force. The calculated results are in agreement with the experimental ones qualitatively. The results show that the collision efficiency decreases with the increase of particle radius in the range of 50 nm to 500 nm. Based on the numerical data a new expression for collision efficiency was presented.

Key words: nanoparticles; Brownian coagulation; collision efficiency; Stokes resistance; lubrication force