

孔隙尺度流动结晶过程机理研究¹⁾

杨丰畅^{*, 2)}

* (非线性力学国家重点实验室, 中国科学院力学研究所, 北京, 100190)

摘要: 孔隙尺度渗流中的结晶及晶体生长过程常见于矿物质沉积、生物矿化等自然现象中, 且在医药、食品、精细化工品、新材料等领域有着广泛应用。在实际应用中, 理解并控制结晶及晶体生长过程具有极其重要的意义, 例如: 油气生产中的渗流孔隙结垢导致产量下降、稀土提取过程中的杂质浸出、医药产业中的提纯过程等。因此, 研究水溶液中晶体结晶生长过程和其潜在机理就显得尤为重要。当前, 微观尺度结晶现象由于其复杂性导致晶体形成机理尚不明确, 过往研究试图通过分子动力学(Molecular dynamics)及密度泛函理论(Classical density function theory)对结晶过程进行研究。然而, 受限于这些方法庞大的计算成本, 较大尺度流动结晶现象无法被有效模拟及分析, 这就导致在连续介质尺度结晶现象往往被忽视, 与实际不符。此外, 微纳尺度下现存晶体的生长对未来结晶过程的影响及相关机理仍待进一步研究。针对这些问题, 报告人在橡树岭国家实验室工作期间将经典成核理论与流动、传质、相变反应耦合, 开发了基于 Darcy-Brinkman-Stokes (DBS)架构的数值求解器 mpFoam。该求解器通过与在布鲁克海文国家实验室 NSLS2 光源进行的 fast X-ray nanotomography (XnT)微通道流动结晶实验结果进行对比, 验证了其准确性。利用该新型求解器, 报告人针对不同无量纲数下孔隙流动内的表面结晶率进行了研究, 结果发现有效表面结晶率受 Damkohler 数、Peclet 数及结晶参数影响。晶体表面的沉积反应会通过消耗溶液中的反应物浓度产生排空效应影响附近新晶体的形成, 进而降低表面结晶率。为了有效控制表面结晶现象, 申报人提出了一个新的无量纲数 α 来描述表面反应率与结晶率的比值。通过同时维持相同的 Damkohler 数、Peclet 数和 α , 尽管反应率及结晶率改变, 表面结晶现象却能够基本保持不变。该研究成果的普适性能够为理解微纳尺度流动结晶过程机理提供理论基础, 同时帮助指导未来类似渗流实验设计, 有效控制微纳尺度孔隙流动过程中的表面结晶现象。

关键词: 孔隙尺度渗流; 流动相变; 结晶; 反应流

1) 资金资助项目 (中科院率先行动百人 B 人才项目)