

简介: 全球能源需求的不断增长, 以及解决与日俱增的环境污染和气候变化的迫切需求, 都在不断地刺激着更有效的能源获取技术。虽然在盐度梯度中发现了可提取的能量, 即通过开发自然水生系统来获取蓝色能量 (blue energy), 但单位面积上的能量功率 ($\sim 5 \text{ W/m}^2$) 并不高。为了进一步提高能量转化效率, 就不能单纯依靠吉布斯自由能 (Gibbs free energy), 还应该充分利用磁场。故, 探究磁场对带电纳米孔道中阴阳离子运输的影响, 来启发实验取得进一步的突破。

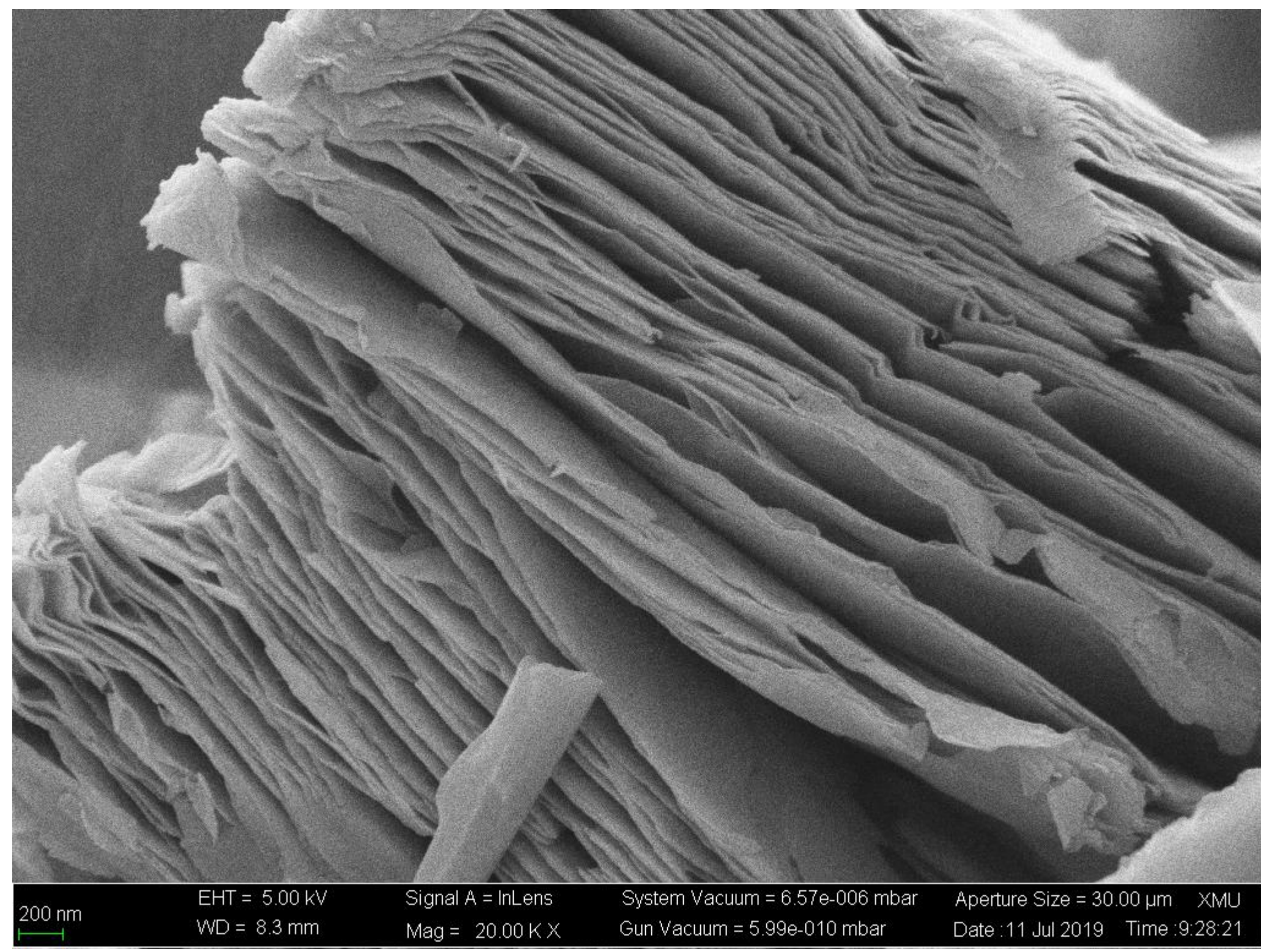


图 1. 带电纳米孔道的SEM形貌表征

计算方法: 离子在纳米孔中的运输主要由Poisson和Nernst-Planck(PNP)方程表达。通过耦合AC/DC和稀物质传递模块, 求解海水(NaCl)中的传质情况。其中, 描述离子浓度改变电场分布的方程式:

$$\epsilon_0 \epsilon_r \nabla^2 V = \rho_v$$

$$\rho_v = F \sum_i z_i c_i \quad \text{即} \quad \rho_v = F(c_+ - c_-)$$

描述离子在纳米孔的扩散机制和双电荷层导致电场分布改变离子浓度的方程式:

$$\mathbf{j}_{\pm} = -D_{\pm} \left(\nabla c_{\pm} + \frac{z_{\pm} e c_{\pm}}{k_B T} \nabla V \right)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_{\pm} = 0$$

基于洛伦兹方程, 用纲量分析的方法推导了磁场中的PNP方程:

$$\nabla \cdot [\epsilon_0 \epsilon_r (\nabla V + \mathbf{v} \times \mathbf{B})] = -F(c_+ - c_-)$$

$$\mathbf{j}_{\pm} = -D_{\pm} \left[\nabla c_{\pm} + \frac{z_{\pm} F c_{\pm}}{RT} (\nabla V + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \right]$$

并在“传递属性-方程式图-弱表达式”中做相应修改; 对孔道边界网格进行精确剖分, 同时简化溶液池的网格精细度, 从而优化计算成本。

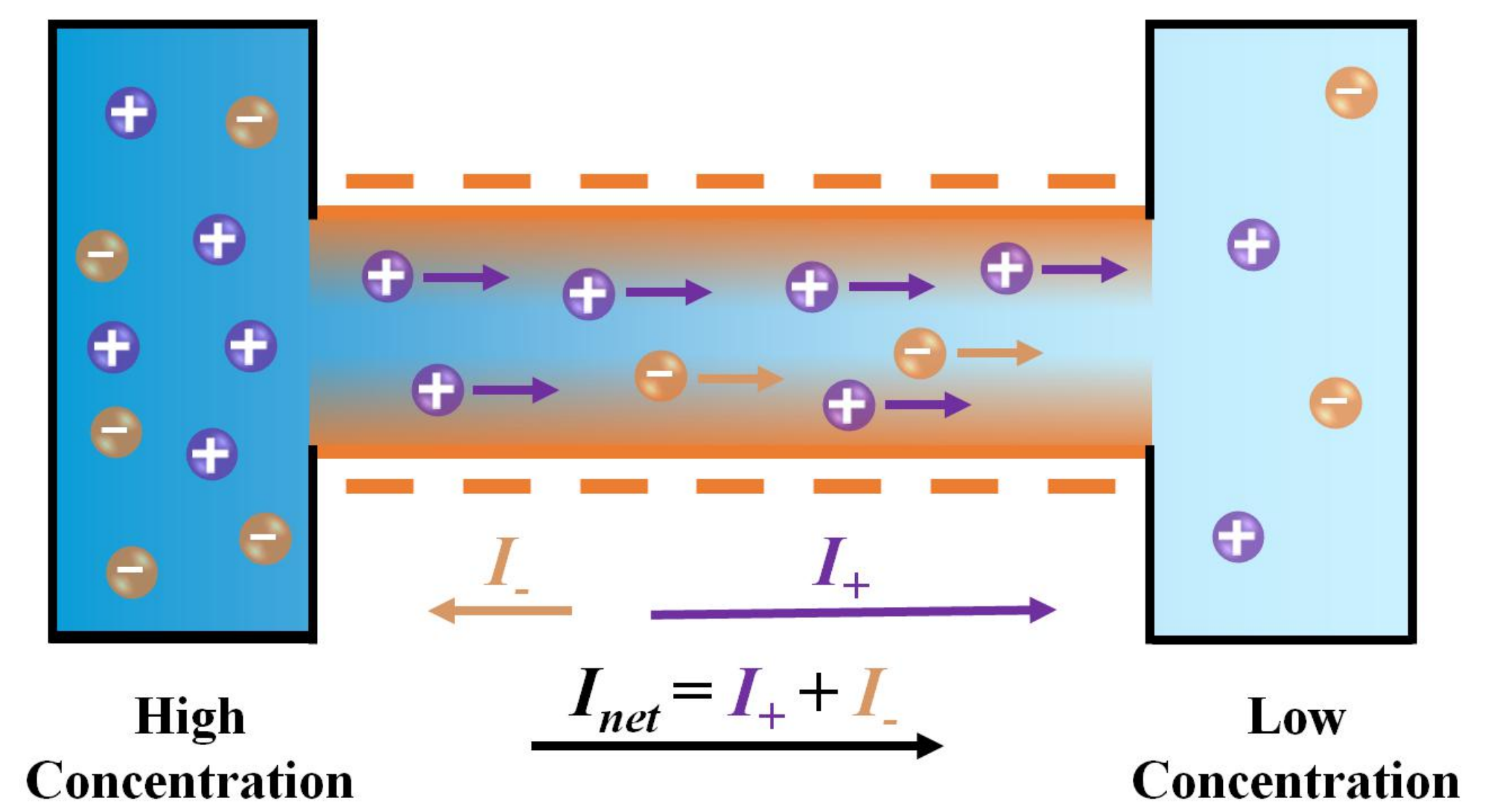


图 2. 构建模型的示意图

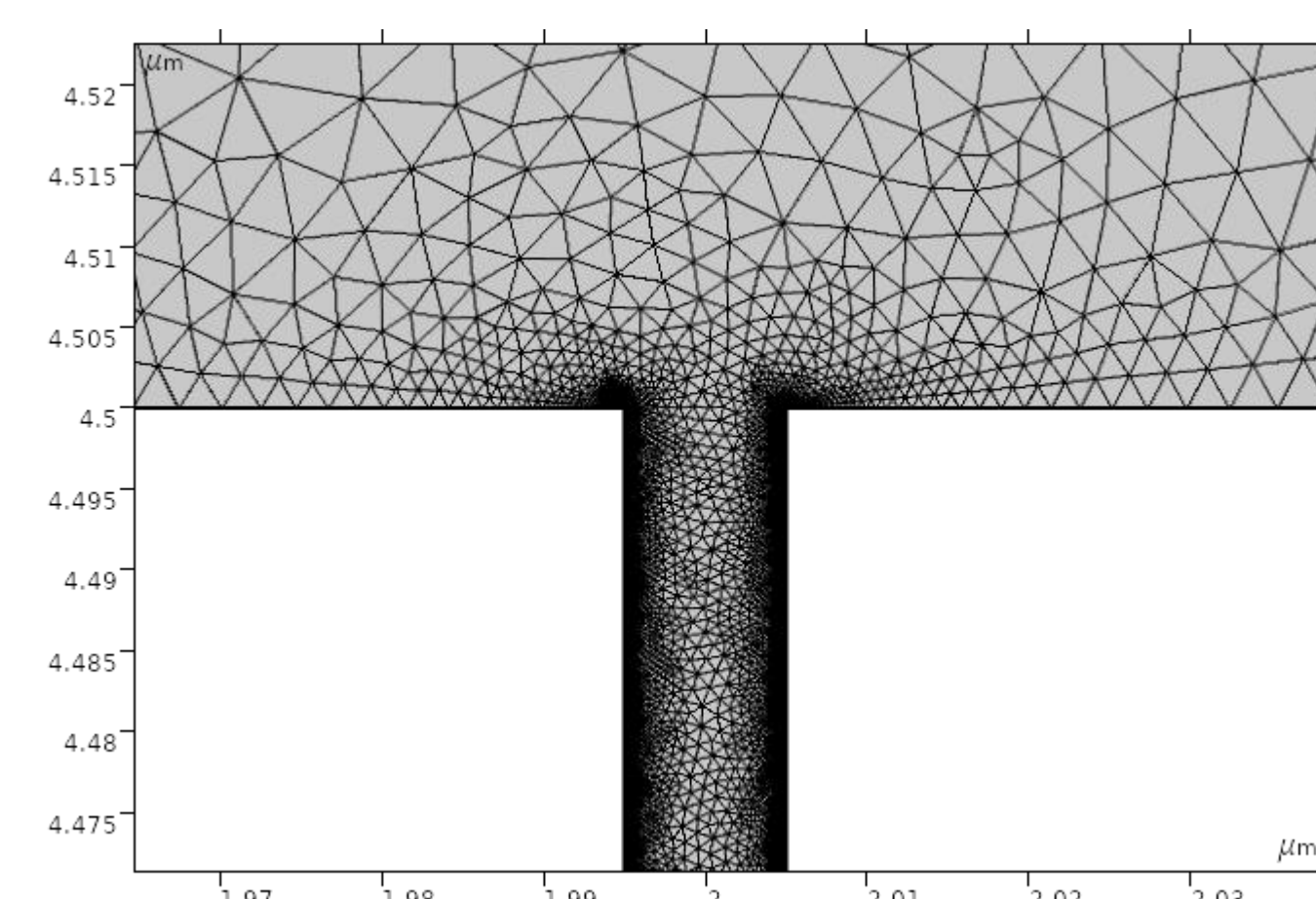


图 3. 孔道内被细化的网格

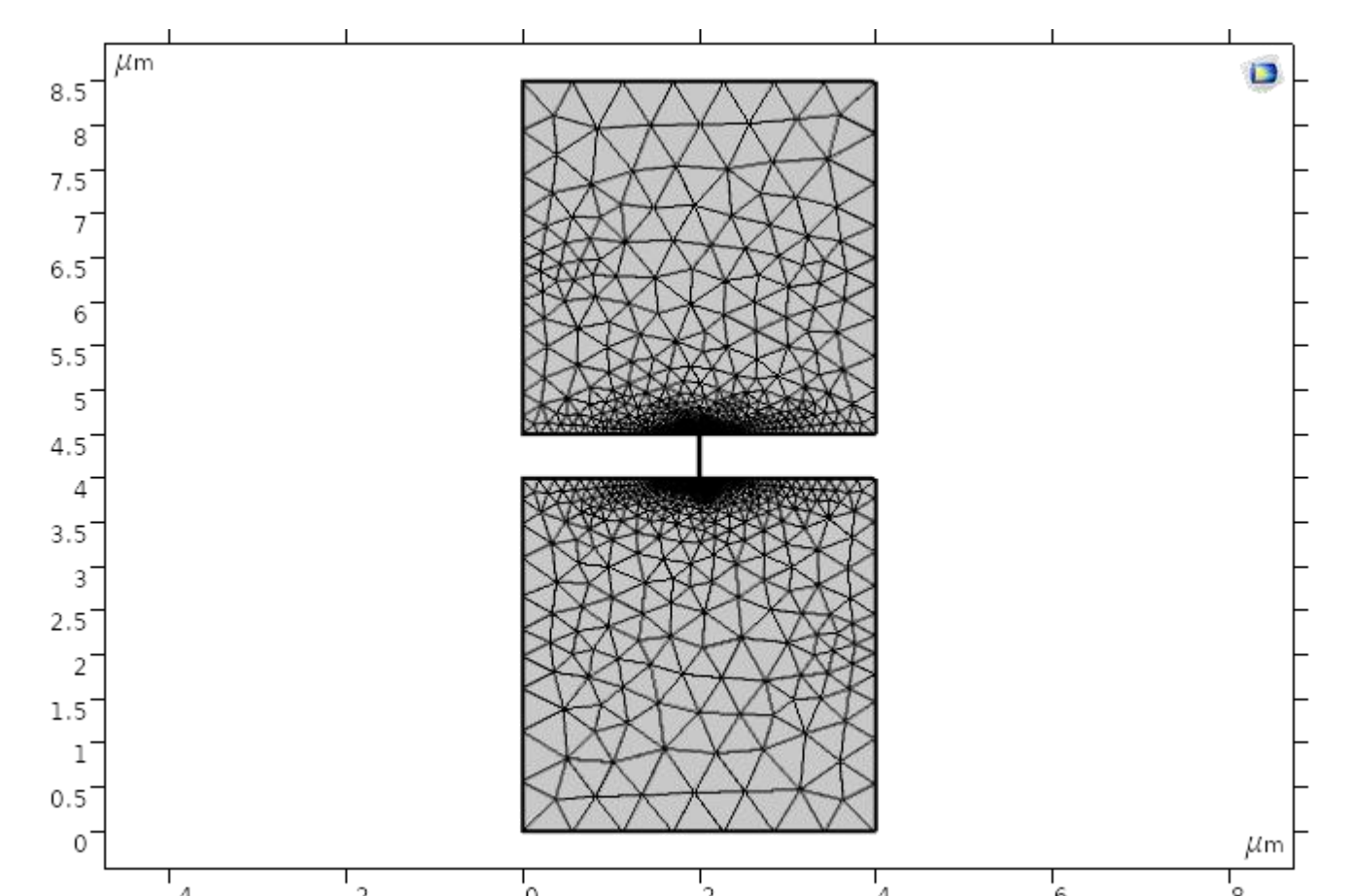


图 4. 优化后的网格

结果:

参数	数值	单位
Na ⁺ 扩散系数	1.334e-9	m ² /s
Cl ⁻ 扩散系数	2.032e-9	m ² /s
表面电荷密度	-0.06	C/m ²
溶液池宽度	4e-6	m

表 1. 建模相关参数

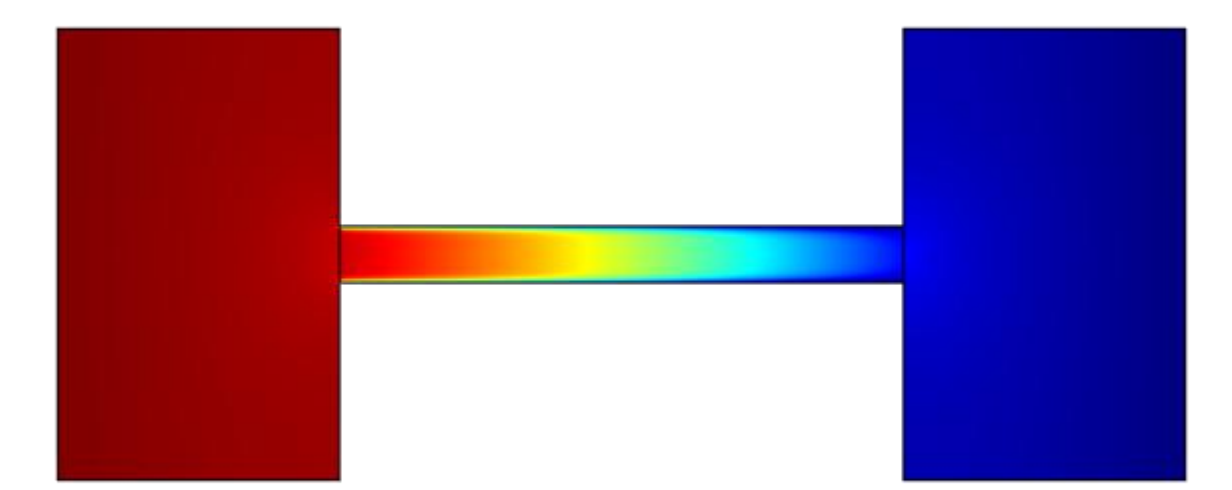


图 5. 浓度分布

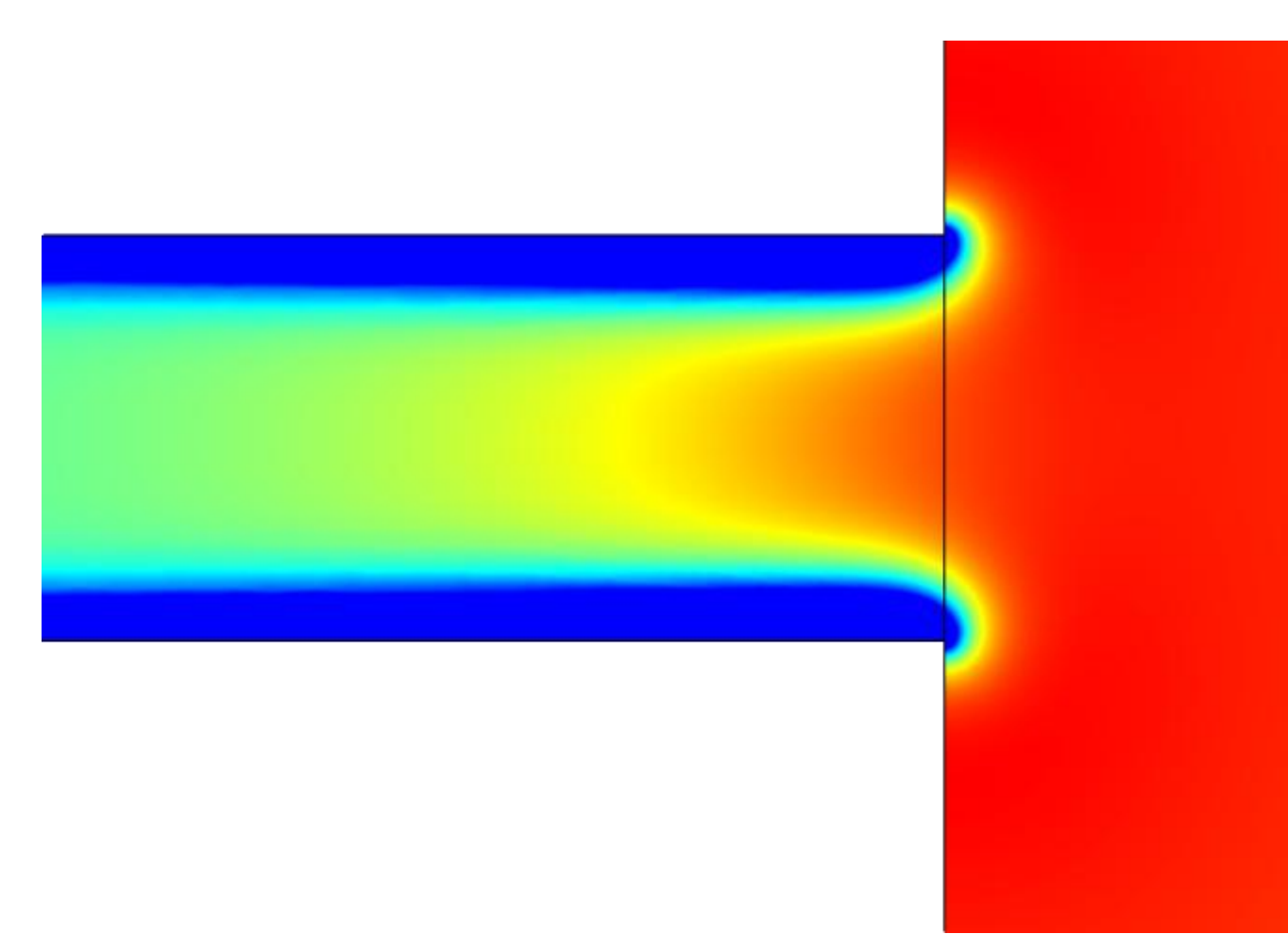


图 6. 双电荷层的电势分布

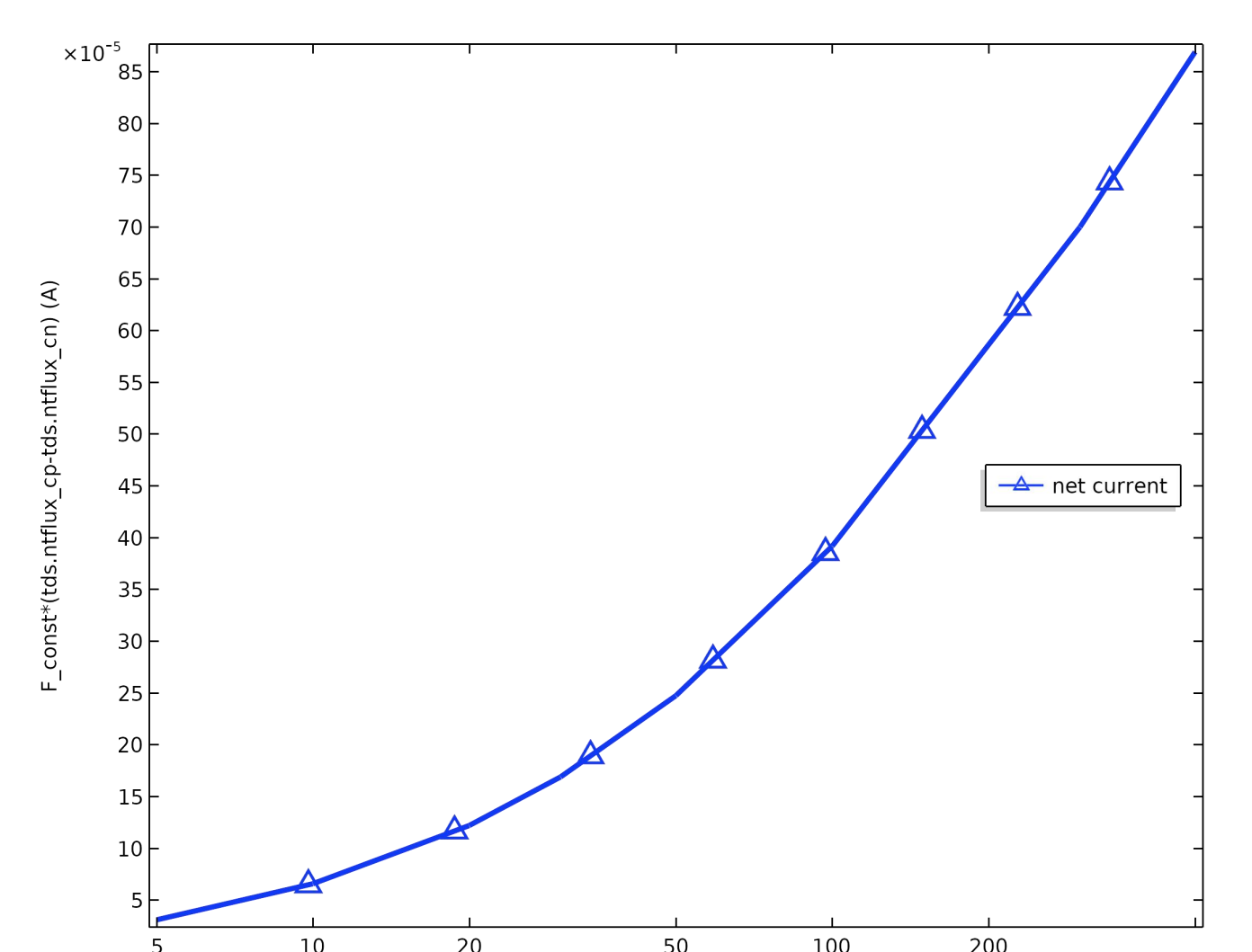


图 7. 磁场与净电流的关系

结论: 磁场会影响纳米孔道的选择性, 从而导致阴阳离子剧烈的不均匀扩散, 使得净电流增加。这项工作为航天器及人造天体的能源供应提供了启发性的思路。

参考文献:

1. Cervera, J., B. Schiedt, A Poisson/Nernst-Planck model for ionic transport through synthetic conical nanopores. *Europhysics Letters*, 2005. 71:35-41.
2. Cervera, J., et al., Ionic conduction, rectification, and selectivity in single conical nanopores. *the journal of chemical physics*, 2006. 124:104706-104714.
3. Cervera, J., et al., Asymmetric selectivity of synthetic conical nanopores probed by reversal potential measurements. *Journal of Physical Chemistry C*, 2007. 111(33): 12265-12273.