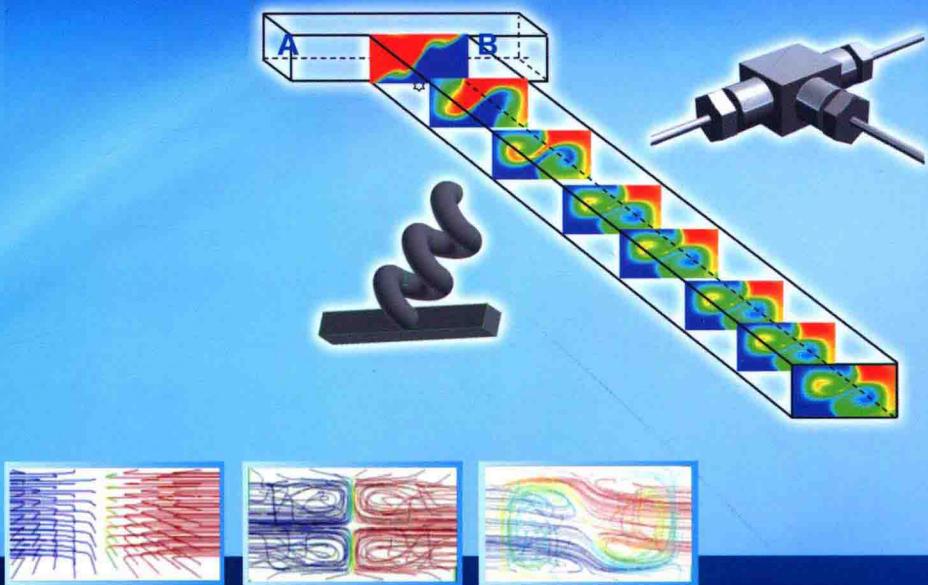


WEIFANYINGQI DE SHEJI YU YINGYONG

微反应器的 设计与应用

王林 编著



化学工业出版社

微反应器的 设计与应用

王 林 编著



化学工业出版社

· 北京 ·

微反应器是反应工程的研究前沿和热点方向之一，是实现生产过程安全、高效、绿色的重要途径。本书以微反应器中化学反应与流动、传热、传质等传递过程的相互影响为主线，阐述了微反应器设计的基本方法，并结合典型应用案例介绍了微反应器设计与操作的基本流程。

全书共分 7 章，第 1 章以“三传一反”为特征介绍微流体的移动现象；第 2 章介绍了微混合器的设计方法和两种典型微混合器的设计步骤，同时结合微流控芯片技术介绍了微混合器的应用领域；第 3 章～第 6 章分别讲述了液液均相反应、液液异相反应、微粒制备和催化微反应器中传热、传质对反应速率和选择性的影响，以及各类微反应器结构和尺寸设计对反应进程的影响，进而归纳出各类微反应器设计的一般原则和设计流程；第 7 章介绍了微反应器系统的设计方法，对设计过程中检测元件选择和确定控制系统结构作了详细描述。

本书可供从事工业反应工程设计、开发、运行的工程技术人员参考，也可作为入门参考书供从事化学工程、生物医学工程或相关领域的科研人员使用。

图书在版编目(CIP)数据

微反应器的设计与应用/王林编著. —北京：化学工业出版社，2016. 6
ISBN 978-7-122-27091-7

I. ①微… II. ①王… III. ①反应器-研究
IV. ①TQ052. 5

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2016）第 139392 号

责任编辑：徐雅妮

文字编辑：丁建华

责任校对：宋 玮

装帧设计：关 飞

出版发行：化学工业出版社（北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011）

印 刷：北京永鑫印刷有限责任公司

装 订：三河市宇新装订厂

710mm×1000mm 1/16 印张 12 字数 221 千字 2016 年 10 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询：010-64518888（传真：010-64519686） 售后服务：010-64518899

网 址：<http://www.cip.com.cn>

凡购买本书，如有缺损质量问题，本社销售中心负责调换。

定 价：48.00 元

版权所有 违者必究

前 言

微反应器也被称为“微通道反应器”，是微反应器、微混合器、微换热器和微控制器的统称。微反应器是重要的化工过程强化设备。当化学反应在微米尺度空间进行时，可以充分提高传热和传质效率，进而极大地提高反应转化率和选择性、减小反应器体积、提高反应过程的集成度和安全性，实现化学工业节能降耗的生产目标。

微反应器的基础研究有 20 多年的历史，围绕微反应器的制造、提升混合效果和换热能力、扩大应用范围等方面，研究者都做了很多工作，也筛选出了一些最有可能进行大规模生产的化学反应。微反应器的出现为强放热反应——硝化反应、费托合成反应和重氮合成反应等开辟了新的安全模式，为贝克曼重排反应、Friedel-Crafts 酰化反应、二羰基化合物直接氟化反应提高了选择性和转化率，为醇醛缩合反应、贝里斯-希尔曼反应缩短了反应时间。作为微反应器的孪生装备，微流控芯片的出现为抑制肿瘤细胞迁移，实现伤口快速无疤痕愈合等多种生物医学需求提供了崭新的技术平台，为食品类沙门氏菌检测、医学类血液检测提供了快速微量的检测方法，为药物毒性研究和药物筛选模拟了人体生长微环境。围绕微通道，一个新的绿色强化反应体系正在生成。

根据日本新能源产业技术综合发展研究机构的预测，2020 年开始基于微化工的生产过程开始形成工业规模。在工业生产中，有能力的工程技术人员和初涉微反应器研究领域的研究者，需要架构一个大化工和微化工之间的知识连接，了解微化工工业生产中的具体问题。尽管微反应器是一种新型的反应装置，它改善了反应体系的换热特性和流体流动特性，但是没有改变反应和流动的机理，因此从传递现象和反应、扩散等方面解释微反应器的工作过程，进而阐明微反应器的设计机理，可以使工程技术人员和相关研究者比较快地了解微反应器的特征和应用背景，逐步扩大微反应器的工业应用规模。

本书以传递现象、反应动力学机理为基础，建立微反应器设计与应用的特征，描述其与大化工的差异。重点解决微反应器设计中的结构、尺寸、材料、反应物系制备、反应温度、控制与检测等问题。同时解决微反应器应用过程中的反应物质量控制、产量控制以及降低能耗的策略。

全书分为 7 章，第 1 章介绍微流体流动、传热和传质的基本原理；第 2 章主要介绍 T 形和 Y 形微混合器的设计；第 3 章以流段设计为核心，介绍均相

微反应器的设计思想和设计方法；第4章以液液异相系反应为背景，介绍微反应器在液滴制备、微萃取以及相转移反应中的应用方式和强化手段；第5章介绍微粒制备过程中，微反应器设计方式对成核和生长过程的影响；第6章介绍催化反应和微反应器设计相结合，提高转化率和收率的方法；第7章以产业化需求为背景，重点介绍微反应器系统的设计流程和控制策略的实施。

书中所引用的文献资料基本都是近十年的研究成果，有助于读者了解微反应器技术和应用的最新趋势。在此谨向文中所引述作者致以诚挚的谢意。全书在结构及内容上都融入了编者的理解及观点，也反映了编者近几年来从事微反应器研究工作的思考。希望对微反应器的产业化实践起到抛砖引玉的作用。

本书可以作为高等院校微化工技术及相关专业师生的参考书，也可供从事微反应器设计及应用的研究开发人员及相关工程技术人员参考。

参与本书编写工作的还有齐咏生、孔宪佐、王少杰、綦智硕等。王娜女士在书稿校录方面做了大量工作，在此一并表示感谢。本书的出版得到了国家自然科学基金（项目编号21466026）和内蒙古自治区高等学校科学研究重点项目（项目编号NJZZ14054）的资助。

由于编者水平有限，不足和疏漏之处恳请读者批评指正。

王林

2016年7月

目 录

第1章 微流体的移动现象

1.1 基础知识	002
1.1.1 无量纲数及相似准则	002
1.1.2 量纲分析方法	003
1.1.3 尺度效应	004
1.2 微流体的流动	005
1.2.1 微通道内流体的速度分布	005
1.2.2 微通道的压损	006
1.2.3 微通道特有的流动现象	007
1.3 微流体的传热	008
1.3.1 微通道内流体的温度分布	008
1.3.2 微通道内热交换过程	009
1.3.3 微通道内增强传热效果的方法	011
1.4 微流体的传质	012
1.4.1 通量和费克定理	012
1.4.2 扩散方程式	013
1.4.3 气液、液液界面之间的传质过程	013
参考文献	014

第2章 微流体的混合

2.1 宏观混合与微观混合	016
2.1.1 微观混合对化学反应的影响	018
2.1.2 预混合对化学反应的影响	019

2.2 混合操作	021
2.2.1 搅拌操作	021
2.2.2 微混合	023
2.2.3 微混合器的分类	023
2.3 基于微团尺度的微混合器设计	027
2.3.1 微团尺度	027
2.3.2 微混合器的设计过程	028
2.4 T形微混合器的设计	030
2.4.1 T形微混合器的简化模型	030
2.4.2 T形微混合器的优化设计	033
2.4.3 设计案例分析	033
2.5 Y形微混合器的设计	035
2.5.1 混合性能评价方法	036
2.5.2 Y形微混合器结构参数设计	036
2.5.3 Y形微混合器混合效果的强化设计	039
2.6 微混合器的应用与实践	040
2.6.1 基于微流控芯片的免疫凝集检测技术的应用	041
2.6.2 气动微阀在DNA杂交反应中的应用	043
参考文献	045

第3章 微反应器的设计与应用

3.1 微反应器的特点	048
3.1.1 层流特性	048
3.1.2 比表面积特性	049
3.1.3 微反应器适合反应类型的特征	050
3.1.4 微反应器的利用局限	051
3.2 常规反应器的设计	051
3.2.1 反应器设计基础	051
3.2.2 反应器设计的基本衡算式	053
3.2.3 管道式平推流反应器的设计	054
3.3 微反应器的设计	055
3.3.1 微反应器的混合性能	055

3.3.2 微反应器的设计思想	055
3.3.3 微反应器的设计方法	056
3.4 非等温微反应器的设计	063
3.5 微反应器的应用	066
3.5.1 微反应器中常用的流体驱动技术	066
3.5.2 适合微反应器的均相化学反应	068
参考文献	070

第 4 章 微通道中的液液异相系操作

4.1 乳化液滴的制备	072
4.1.1 液滴直径分布的支配因素分析	075
4.1.2 微通道设计	077
4.1.3 微液滴的应用	080
4.2 微萃取	082
4.2.1 微萃取系统的结构和评价指标	083
4.2.2 萃取通道内微观结构的设计	084
4.3 相转移反应	085
4.3.1 微反应器通道宽度和流速对流型的影响	087
4.3.2 微反应器通道结构的优化设计	088
4.4 基于弹状流分析的微反应器设计	089
4.4.1 混合前反应物配置方式对混合速率的影响	091
4.4.2 弹状流截面形状对混合速率的影响	091
4.4.3 弹状流直径和长度对混合速率的影响	093
4.4.4 混合速率与无量纲数 Peclet 数的关系	093
参考文献	096

第 5 章 微反应器在微粒制备中的应用

5.1 微粒的形成机理	099
5.1.1 超溶解度曲线与成核过程	099
5.1.2 微粒生长过程	100

5.1.3 LaMer 图	101
5.2 扩散混合型微反应器的设计 (I)	103
5.2.1 成核区域的计算	104
5.2.2 影响成核区域的要素分析	107
5.3 扩散混合型微反应器的设计 (II)	108
5.3.1 微反应器的结构和特征	109
5.3.2 微粒生成的机理分析	110
5.3.3 微反应器操作条件对微粒直径和分布的影响	111
5.3.4 微反应器结构参数对微粒直径和分布的影响	114
5.4 微反应器在纳米颗粒制备中的应用	117
5.4.1 实验设计及相关理论	117
5.4.2 实验结果分析及实验改进	118
5.4.3 微波辐射在纳米颗粒制备中的应用	119
参考文献	120

第 6 章 催化反应在微反应器中的设计与实现

6.1 催化反应的机理	122
6.2 液固相催化反应在微反应器中的应用——反应器设计	125
6.2.1 微反应器中催化剂的放置	125
6.2.2 微反应器类型对催化反应进程的影响	127
6.2.3 微反应器尺寸对催化反应结果的影响	130
6.3 液固相催化反应在微反应器中的应用——优化操作	132
6.3.1 流段配置方式对不可逆平行反应的影响	134
6.3.2 流段配置方式对可逆平行反应的影响	135
6.3.3 流段配置方式对串联平行反应的影响	135
6.4 气固相催化反应在微反应器中的应用——催化剂	137
6.4.1 微型反应器中催化剂非均匀分布对制氢过程的影响	138
6.4.2 催化涂层种类分布对制氢过程的影响	143
6.5 气固相催化反应在微反应器中的应用	145
6.5.1 基于无量纲参数的微反应器设计	146
6.5.2 费托合成催化微反应器的应用	151
参考文献	156

第7章 微反应器系统的设计

7.1 系统设计的基本流程	158
7.2 微反应器的形状优化设计	161
7.2.1 最优压损条件下的微反应器形状设计	161
7.2.2 流量一致性条件下的微反应器形状设计	162
7.2.3 考虑温度分布的微反应器形状设计	165
7.3 微反应器系统的控制	167
7.3.1 全流量控制和差压控制	168
7.3.2 差压控制的不同模式	169
7.4 一个典型微反应器系统的设计	172
7.4.1 Andrussov 过程合成 HCN 的工艺开发试验	173
7.4.2 Andrussov 过程的开发研究	174
7.4.3 Andrussov 过程的概念设计	175
7.5 微反应器系统的产业化	177
参考文献	181

第1章

微流体的移动现象

“三传一反”概括了化工生产过程的全部特征。其中，动量传递过程遵循流体动力学基本规律，涵盖了生产过程中的流体输送、过滤、沉降等传递流程；热量传递遵循热力学第二定律，包括加热、冷却、蒸发、冷凝等生产过程；质量传递则遵循扩散规律，形成蒸馏、吸收、萃取、干燥等生产过程。化学反应过程则描述了新物质的生成过程，是生产过程的核心。

以大化工为基础的“三传一反”特征，其基本概念、方程式、准则等在微化工生产中也完全适用。本章讨论如何描述微流体的移动现象，即微通道内流体流动、传热和扩散的特征。

1.1 基础知识

1.1.1 无量纲数及相似准则

几个物理量可以组合成无量纲数（也称为准数）。例如：在描述流体流动状态时通常用雷诺数（Reynolds number, Re ）判断流体的流动型态。雷诺数可以从无量纲化的不可压缩纳维-斯托克斯方程（Navier-Stokes equations, NS 方程）推导得来。

定义 L 为流路的代表长度（可以是管径或者管路的长度）， U 为流体的代表流速，因此，代表时间尺度为 L/U ，代表压力尺度为 ρU^2 （ ρ 是流体密度）。基于上述各代表度量，可以定义如下的无量纲数：

$$x^* = \frac{x}{L}, \quad u^* = \frac{u}{U}, \quad t^* = \frac{t}{L/U}, \quad p^* = \frac{p}{\rho U^2}, \quad g_x^* = \frac{g_x}{g}$$

利用这些无量纲数，可以将不可压缩纳维-斯托克斯方程变形为：

$$\frac{\partial u_i^*}{\partial t^*} + u_j^* \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j^*} = \left(\frac{Lg}{U^2} \right) g_i^* - \frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} + \left(\frac{\mu}{\rho UL} \right) \frac{\partial^2 u_i^*}{\partial x_j^{*2}} \quad (i, j = x, y, z) \quad (1-1)$$

式中， $\left(\frac{U^2}{Lg} \right)$ 和 $\left(\frac{\rho UL}{\mu} \right)$ 都是无量纲数，分别定义为弗劳得数（Froude number, Fr ）和 Re ，其中 Re 定义为：

$$Re = \frac{\text{惯性力}}{\text{黏性力}} = \frac{U \frac{\partial U}{\partial L}}{\frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^2 U}{\partial L^2}} \approx \frac{U \frac{U}{L}}{\frac{\mu}{\rho} \frac{U}{L^2}} = \frac{\rho UL}{\mu}$$

Fr 数是惯性力和重力之比。式 (1-1) 中，如果两种流体的 Fr 数和 Re 数相等，那么它们的运动方程是一样的。也就是说，无论管径和流速的组合差别

有多大，两种流体的流动型态是一样的，这是相似准则（也称为准数相似法则）的物理意义。这样的物理意义也说明，微化工中无论管径多小，流速多快，其流动型态总可以用大化工中曾经出现的流动型态描述。如果两种流体的流动型态有相似性，那么流动过程中的温度分布和浓度分布都有相似性。表1-1总结了流体流动、传热和扩散过程中有代表性的无量纲数。

表 1-1 无量纲数及其物理意义

流动	传热	扩散
$Re = \frac{\text{惯性力}}{\text{黏性力}} = \frac{\rho UL}{\mu}$	$Nu = \frac{\text{对流传热量}}{\text{导热量}} = \frac{hL}{k}$	$Sh = \frac{\text{物质移动量}}{\text{扩散移动量}} = \frac{k_c L}{D}$
$Fr = \frac{\text{惯性力}}{\text{重力}} = \frac{U^2}{gL}$	$St = \frac{\text{对流传热量}}{\text{热传递量}} = \frac{h}{\rho C_p U}$	$Pe = \frac{\text{对流移动量}}{\text{扩散移动量}} = \frac{UL}{D}$
$We = \frac{\text{惯性力}}{\text{表面张力}} = \frac{\rho U^2 L}{\sigma}$	$Pr = \frac{\text{运动黏度}}{\text{热扩散率}} = \frac{C_p \mu}{k}$	$Sc = \frac{\text{运动黏度}}{\text{扩散系数}} = \frac{\mu}{\rho D}$
$Ca = \frac{\text{黏性力}}{\text{表面张力}} = \frac{\mu U}{\sigma}$		$Da = \frac{\text{反应速率}}{\text{扩散速率}} = \frac{r_A}{N_A}$

注： L —长度； U —速度； g —重力加速度； ρ —密度； μ —黏度； σ —表面张力； h —对流传热系数； k —热导率； C_p —比热容； k_c —传质系数； D —扩散系数； r_A —反应速率； N_A —扩散速率。

1.1.2 量纲分析方法

量纲分析也被称为因次分析^[1]。量纲分析的基础是量纲一致性原则和π定理。量纲一致性原则表明：凡是根据基本物理规律导出的物理方程，其中的量纲必然相同。根据白金汉（Buckingham）所提出的π定理，即当一物理现象可由 n 个物理量的函数关系来描述，而这些物理量包括 m 种基本量纲时，则这一现象的特征可以用这 $(n-m)$ 个无量纲数群的关系形式来表示。

下面应用量纲分析法推导出流体在圆管中的流动压降关系式中的数群。

首先列出影响该现象的物理量。根据对流动压降的分析及有关实验研究，得知压力损失 Δp 与下列因素有关：管径 d 、管长 L 、平均速度 \bar{u} 、流体密度 ρ 和流体黏度 μ ，即 $n=5$ 。

$$\Delta p = f(d, L, \bar{u}, \rho, \mu) \quad (1-2)$$

从量纲一致性上来分析，式(1-2)等号右侧的量纲等于 Δp 的量纲，将式(1-2)写成幂函数的形式：

$$\Delta p = \beta d^a L^b \bar{u}^c \rho^d \mu^e \quad (1-3)$$

式中，系数 β 和指数 a 、 b 、 c 、 d 、 e 均为待定参数。

式中各物理量的量纲如下：

$$\begin{aligned}
 [p] &= ML^{-1}\tau^{-2} \\
 [d] &= L \\
 [\bar{u}] &= L\tau^{-1} \\
 [\rho] &= ML^{-3} \\
 [\mu] &= ML^{-1}\tau^{-1}
 \end{aligned} \tag{1-4}$$

M、L、 τ 分别代表质量、长度和时间的量纲， $m=3$ 。将式 (1-4) 带入式 (1-3)，可得：

$$\begin{aligned}
 ML^{-1}\tau^{-2} &= \beta L^a L^b (L\tau^{-1})^c (ML^{-3})^d (ML^{-1}\tau^{-1})^e \\
 &= \beta M^{d+e} L^{a+b+c-3d-e} \tau^{-c-e}
 \end{aligned} \tag{1-5}$$

联立上述方程式可得：

$$\begin{cases} d+e=1 \\ a+b+c-3d-e=-1 \\ -c-e=-2 \end{cases} \tag{1-6}$$

进行变量代换，解得： $a=-b-e$ ， $c=2-e$ ， $d=1-e$ 。实验证实： Δp 正比于管长 L ， $b=1$ 。因此，流动压降式 (1-3) 可写为：

$$\frac{\Delta p d}{\rho \bar{u}^2 L} = \beta \left(\frac{\rho \bar{u} d}{\mu} \right)^{-e} \tag{1-7}$$

公式左边是无量纲的范宁摩擦因数 $/2 (=f/2)$ ，右边是无量纲的 Re ，符合 π 定理指出的物理现象特征用 $(n-m=5-3)$ 2 个无量纲数群关系来表示的规律。

式 (1-7) 还表明，当流体流动型态为层流时，范宁摩擦系数 $f=16/Re$ ，也就是：

$$\Delta p = 64 \left(\frac{L}{d} \right) (Re)^{-1} \left(\frac{\rho \bar{u}^2}{2} \right) \tag{1-8}$$

1.1.3 尺度效应

对于微通道内流体流动、传热和扩散的特征，微尺度化会改变相关物理因素在过程中的重要性，例如尺度减小会使壁面导热的特征时间增加，热流和温升之间产生延迟，发生非傅里叶效应。表 1-2 所列为相关变量的特征时间和尺度之间的依存关系。

表 1-2 尺度效应

作用项	特征时间尺度	尺寸率
反应停留时间	L/\bar{u}	无关
热传导时间	$\frac{\rho C_p L^2}{4kNu}$	L^2

续表

作用项	特征时间尺度	尺寸率
扩散时间	$\frac{L^2}{D}$	L^2
均相一级反应时间	$\frac{1}{k_v}$	无关
非均相一级反应时间(反应主导型)	$\frac{L}{4k_s}$	L^1
非均相一级反应时间(扩散主导型)	$\frac{L^2}{4D \cdot Sh}$	L^2

注: k_v —反应速率常数; k_s —反应传质系数。

1.2 微流体的流动

1.2.1 微通道内流体的速度分布

微通道内流体的特点是低 Re , 因此流体在微通道中流动的型态一般是层流。在圆管内层流的速度分布可以用牛顿黏性定律作分析。在图 1-1 中, 圆管的半径为 r_0 , 长度为 l , 内部圆柱形流段的半径为 r , 按照牛顿黏性定律, 其作用于侧表面的黏性力等于流段入口处 (in) 和出口处 (out) 的压力之差, 即:

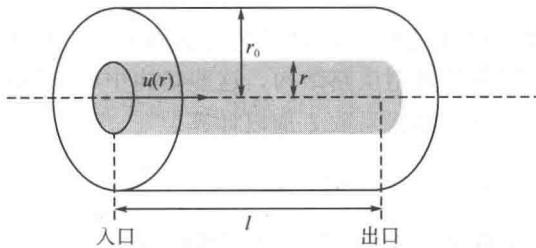


图 1-1 圆管内层流的速度分布

$$\pi r^2 \Delta p = \mu (2\pi r l) \frac{du}{dr} \quad (1-9)$$

式中, Δp 是流段中心点的压力差。 u 代表圆柱形流段内任意一点的流速, 对 u 积分, 并根据边界条件: $r=r_0$, $u=0$, 可以推出:

$$u = u_{\max} (1 - r^2 / r_0^2)$$

$$u_{\max} = \frac{\Delta p}{4\mu l} r_0^2 \quad (1-10)$$

u_{\max} 是流体中心部的最大流速。在整个圆管内，根据截面体积流量公式，可以推导出层流时的平均流速等于 $u_{\max}/2$ 。相似的求解方法，可以推导出矩形截面微通道内层流时的平均流速是 $2u_{\max}/3$ 。

1.2.2 微通道的压损

微通道的压损通常比较大，这主要是由其小管径引起的。压损大是限制微通道工业应用的主要障碍之一。在光滑圆管内的微通道压损可以由式（1-8）计算求得，下面主要推导非圆形截面微通道的压损公式。

对于非圆形管内的流体流动，必须找到一个和圆管直径 d 相当的量，才能按照式（1-8）计算压损。为此引入当量直径的概念：

$$D_h = 4 \times \text{液体流过的截面积} / \text{液体润湿的周边长度} \quad (1-11)$$

以矩形截面为例，上式可改写为：

$$D_h = 2 \times \text{矩形长度} \times \text{矩形宽度} / (\text{矩形长度} + \text{矩形宽度}) \quad (1-12)$$

研究表明：在非圆形通道内，计算层流阻力时，当量直径不大可靠，需要引入修正系数 C 。对矩形截面而言

$$\Delta p = 4C \left(\frac{L}{D_h} \right) (Re)^{-1} \left(\frac{\rho \bar{u}^2}{2} \right) \quad (1-13)$$

$$C = 24(1 - 3.56\alpha + 1.95\alpha^2 - 1.70\alpha^3 + 0.96\alpha^4 - 0.25\alpha^5) \quad (1-14)$$

$$\alpha = \text{矩形长度} / \text{矩形宽度} \quad (1-15)$$

$$Re = \frac{\rho \bar{u} D_h}{\mu} \quad (1-16)$$

在微通道的流路设计过程中，为了提高混合效果，经常会引入急缩、急扩、分流、合流、弯曲等异型流路结构。这些结构中的压损对整个微通道的压损影响极大，因此要引入摩擦系数 ζ 加以计算。

$$\Delta p = \zeta \left(\frac{\rho \bar{u}^2}{2} \right) \quad (1-17)$$

表 1-3 所列为异型管路结构及其相应的摩擦系数。

表 1-3 摩擦系数 ζ 的取值

管路结构	ζ
管入口	0.5
急缩	$0.45 \times (1 - \text{截面比})$
急扩	$(1/\text{截面比} - 1)^2$

续表

管路结构	ζ
孔	$2.7 \times (\text{截面比} - 1) / (\text{截面比}^2 - 1) / \text{截面比}^2$
45°弯头	0.35
90°弯头	0.75
三通	1

在微通道内，壁面的粗糙程度对流动过程中的压力损失影响很大。同时，微通道材质的选择也非常 important，因为，流体的疏水性和亲水性与通道材质相关，固体表面被液体浸润形成的表面力也会影响微通道的压力损失。

1.2.3 微通道特有的流动现象

流体力学中的 NS 方程在微通道流动过程中仍然适用。但是当通道的尺寸与流动工质分子的特征尺度相近时，就要考虑微通道尺寸的缩小程度和流体流动状态之间的数学关系。

(1) 气体介质

气体分子动力学研究已经将微通道的特征尺度与流动介质分子的特征尺度联系起来，1909 年 Knudsen 用气体平均自由程 λ 与通道的特征尺寸 L 的比值定义 Kn 数 ($Kn = \lambda/L$)，表征气体分子与固壁发生碰撞而导致的动量和能量传输。表 1-4 是根据不同 Kn 数划分的气体流动四个阶段。

其中滑移 NS 方程增加了线性滑移边界条件，即滑移速度与局部剪切率成正比：

$$u_{\text{gas}} - u_{\text{wall}} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \lambda \left. \frac{\partial u_{\text{gas}}}{\partial n} \right|_{\text{wall}} \quad (1-18)$$

式中， u_{gas} 为气体介质流速； u_{wall} 为壁面滑移速度； σ_v 为切向动量调节系数，一般在 0.8~1.0 之间； λ 为平均分子自由程； n 为沿界面法线方向的坐标。在这种边界条件来研究微通道内的气体流动，获得的结果与实验结果较为符合^[2]。

表 1-4 Kn 数、气体流动状态和应用数学方程之间的关系

Kn	气体流动状态	数学方程
$Kn \leq 10^{-3}$	连续介质流，无分子扩散现象	无滑移 NS 方程
$10^{-3} \leq Kn \leq 10^{-1}$	连续介质流，有分子扩散现象	滑移 NS 方程
$10^{-1} \leq Kn \leq 10$	过渡流	滑移 Burner 方程
$10 \leq Kn$	自由分子流	Boltzmann 模型