УДК 541.182.2/3

© 2004 г. С. П. Баканов

О ПРИРОДЕ ТЕРМОФОРЕЗА ВЫСОКОТЕПЛОПРОВОДНЫХ ТЕЛ В ГАЗАХ

Кратко излагается схема расчета скорости термофореза в газах крупных тел. Основное внимание обращается на особенности механизма термофореза высокотеплопроводных тел, попытки объяснения аномалий которого предпринимаются в течение многих лет. Дается качественное объяснение рассматриваемого механизма. Показано, что он обязан своим происхождением наличию в газе вблизи поверхности тела второй (смешанной) производной от температуры (в то время как термофорез Эпштейна–Максвелла обусловлен ее первой производной). Подчеркнуто, что в то время как классический термофорез не зависит от числа Кнудсена $\mathrm{Kn} = \lambda/R$ (λ – длина свободного пробега молекул газа, R – характерный размер тела), скорость термофореза высокотеплопроводных тел ему прямо пропорциональна. С другой стороны, классический термофорез сильно зависит от отношения теплопроводностей тела и газа, а скорость термофореза высокотеплопроводных тел от этого отношения не зависит. Показано, что надежные количественные результаты можно получить, лишь располагая достоверными данными о коэффициентах аккомодации при соударениях газовых молекул с поверхностью тела.

Классическое представление о природе термофореза тел в газах базируется на открытии Максвеллом [1] теплового скольжения газа вдоль поверхности раздела фаз. Эпштейн [2] положил его в основу решения задачи о термофорезе крупных тел в качестве граничного условия, связавшего воедино задачу об обтекании тела газом и задачу о распределении температуры, когда вдали от тела поддерживается малый постоянный градиент температуры. Работа Эпштейна дала толчок к исследованию природы термофореза крупных тел в газах. (Говоря о крупных телах, имеем в виду, что число Кнудсена много меньше единицы.) Последовавшие за этим эксперименты показали, что механизм максвелловского скольжения не исчерпывает всех возможных причин явления. В частности, такой подход не позволил объяснить экспериментально наблюдавшуюся неожиданно большую скорость термофореза высокотеплопроводных тел. Теоретическому изучению этой проблемы посвящено к настоящему времени уже значительное число работ (см., обзоры [3, 4]). Их авторы использовали разнообразные подходы и методы расчетов. Такое многоцветье, а также имеющиеся различия в конечных результатах не только не способствуют пониманию природы явления, но и серьезно затрудняют практическое их использование. В связи с этим представляется целесообразным и своевременным описать максимально доступным для широкого круга специалистов образом принципиальную схему расчета скорости термофореза крупных тел в газах, подчеркивая при этом ключевые моменты.

1. Постановка задачи. При решении задачи о термофорезе крупных тел рассматривают задачу Стокса для обтекаемой газом сферы, на бесконечном расстоянии от которой поддерживается малый постоянный градиент температуры. Ограничимся случаем нелетучих тел. Формально это означает, что поверхность сферы непроницаема для газовых молекул, т.е. нормальную составляющую скорости газа на поверхности тела следует положить равной нулю. Заметим, что, рассматривая случай достаточно крупных тел, для которых число Кнудсена $\mathrm{Kn} = \lambda/R$ много меньше единицы (λ – длина свободного пробега молекул газа, R – характерный размер тела), можно, соблюдая известную осторожность, отбросить некоторые слагаемые, пропорциональные Kn не только в ходе вычислений, но уже на стадии постановки задачи.

Таким образом, для нормальной составляющей имеем

$$\upsilon_r = 0 \tag{1.1}$$

Граничное условие для тангенциальной составляющей скорости газа менее очевидно. Запишем его в форме [5]

$$\upsilon_\theta = \mathrm{Kn}\frac{R}{\eta}C_m\sigma_{r\theta} + k_{\mathrm{TS}}\frac{\eta}{\rho T_0}\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{T+T_i}{2} + \frac{3}{2}\frac{\eta}{\rho T_0}\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{T-T_i}{2} \tag{1.2}$$

Согласно Эпштейну первые два слагаемых в выражении (1.2) описывают вязкое и тепловое скольжения. Отметим, однако, что здесь сделаны некоторые уточнения: в выражении для тензора вязких напряжений $\sigma_{r\theta}$ учитываются наряду с обычными также и тепловые напряжения $\sigma_{r\theta}^{(\mathrm{T})}$; во втором слагаемом вместо численного коэффициента используется коэффициент теплового скольжения k_{TS}, равный максвелловскому значению 0.75 лишь в частном (идеальном) случае зеркального взаимодействия газовых молекул с поверхностью конденсированной фазы. Кроме того, в более общем виде записано выражение для тангенциальной производной температуры. Однако наиболее существенное различие состоит в появлении третьего слагаемого, которое отсутствует в схеме Эпштейна.

Здесь использованы также следующие обозначения: $\mathbf{v}$ – скорость газа относительно тела (индексы r и θ указывают соответственно на радиальную и тангенциальную составляющие), η – динамическая вязкость, ρ – плотность газа, C_m – коэффициент вязкого скольжения, T_i и T_0 – температура внутри и в центре сферы соответственно.

Сформулируем граничные условия для определения температуры в задаче Лапласа. Нормальная составляющая потока тепла $\mathbf{q}$ на границе непрерывна:

$$q_r = q_{ir} \quad \text{или} \quad \partial T/\partial r = \xi\partial T_i/\partial r, \quad \xi = \kappa_i/\kappa \tag{1.3}$$

(κ – теплопроводность газа, κ_i – теплопроводность конденсированной фазы).

Для температуры имеем (по существу, это в уточненном виде соотношение Смолуховского [6])

$$T - T_i = \mathrm{Kn}\frac{R}{\kappa}C_t\frac{(\mathbf{q}+\mathbf{q}_i)_r}{2} \tag{1.4}$$

C_t – коэффициент температурного скачка.

Приведем также выражение для тепловых напряжений в газе, которое нам понадобится при дальнейших расчетах. Его удобно записать в форме

$$\sigma_{r\theta}^{(T)} = \frac{3}{r}\frac{\eta^2}{\rho T_0}\left[\frac{1}{r} - \frac{\partial}{\partial r}\right]\frac{\partial T}{\partial\theta} \tag{1.5}$$

2. Распределение скорости и температуры. Выражения для составляющих скорости газа в окрестности тела и для силы, с которой газ действует на тело, запишем в приближении Стокса в стандартной форме

$$\upsilon_r = \upsilon_0\left[1 - 2a\frac{R}{r} + 2b\left(\frac{R}{r}\right)^3\right]\cos\theta, \quad \upsilon_\theta = -\upsilon_0\left[1 - a\frac{R}{r} - b\left(\frac{R}{r}\right)^3\right]\sin\theta$$

$$\mathbf{F} = 8\pi\eta Ra\mathbf{v}_0$$

где $\mathbf{v}_0$ – скорость набегающего потока газа на бесконечности. В равновесии с учетом граничного условия (1.1) имеем для постоянных интегрирования: $a = 0$, $b = -1/2$. Распределения температуры внутри и вне тела запишем в форме ($\mathrm{grad}\,T$ – заданный постоянный градиент температуры вдали от тела)

$$T_i = T_0 + (\mathbf{A}\mathbf{r}), \quad T = T_0 + (\mathrm{grad}\,T\mathbf{r}) + (\mathbf{B}\mathbf{r})\left(\frac{R}{r}\right)^3 \tag{2.1}$$

Из условий (1.3), (1.4) имеем систему двух линейных уравнений относительно постоянных интегрирования **A** и **B**, решая которую, получим

$$\mathbf{A} = \frac{3}{2}\frac{1}{1+\xi/2}\mathrm{grad}\,T, \quad \mathbf{B} = \frac{1}{2}\frac{1-\xi}{1+\xi/2}\mathrm{grad}\,T \tag{2.2}$$

Наконец, из выражения (1.5) следует

$$\sigma_{r\theta}^{(T)} = -\frac{9}{2R}\frac{\eta^2}{\rho T_0}\frac{1-\xi}{1+\xi/2}\sin\theta\,\mathrm{grad}\,T$$

3. Скорость термофореза. Теперь нетрудно вычислить входящие в равенство (1.2) величины. В результате, принимая во внимание, что равновесная скорость тела (скорость термофореза) равна (с обратным знаком) равновесному значению $\mathbf{v}_0$, имеем

$$\mathbf{v}_{TR} = -\frac{\eta}{\rho T_0}k_{\mathrm{TS}}\frac{\mathrm{grad}\,T}{1+\xi/2}\left\{1 + \xi\mathrm{Kn}\left[\frac{1}{2}C_t + \frac{3}{k_{\mathrm{TS}}}\left(\frac{1}{2}C_t - C_m\right)\right]\right\} \tag{3.1}$$

Напомним, что в связи с условием малости числа Кнудсена был отброшен ряд слагаемых, в том числе и в конечном выражении (3.1). Следует, однако, подчеркнуть, что может иметь место ситуация, когда теплопроводность тела настолько велика, что даже при малых числах Кнудсена комбинация $\xi\mathrm{Kn}$ значительно превышает единицу (такой случай реализуется, например, для металлических тел). Поэтому слагаемые, содержащие такое произведение, сохранены. Если теплопроводность тела не слишком велика по сравнению с теплопроводностью газа, то второе слагаемое в фигурных скобках выражения (3.1) также мало по сравнению с единицей и может быть отброшено. В результате приходим к уточненной (в части коэффициента теплового скольжения) формуле Эпштейна

$$\mathbf{v}_{TR}^{E} = -\frac{\eta}{\rho T_0}k_{\mathrm{TS}}\frac{\mathrm{grad}\,T}{1+\xi/2} \tag{3.2}$$

С другой стороны, в случае высокой теплопроводности тела выражение (3.1) принимает вид:

$$\mathbf{v}_{TR} = -\frac{\eta}{\rho T_0}k_{\mathrm{TS}}\mathrm{grad}\,T\,\mathrm{Kn}\left[C_t + \frac{3}{k_{\mathrm{TS}}}(C_t - 2C_m)\right] \tag{3.3}$$

Сделаем численную оценку рассмотренного эффекта. Для этого необходимо вычислить значения входящих в выражение (3.3) кинетических коэффициентов. Воспользуемся следующими соотношениями [3, 4]:

$$C_m(\varepsilon) = a/\varepsilon + b, \quad C_t(\alpha) = c/\alpha + d, \quad k_{\mathrm{TS}} = 0.75 + (g + h\varepsilon)\varepsilon$$

Здесь α и ε – коэффициенты, характеризующие соответственно аккомодацию энергии и импульса при взаимодействии газовых молекул с поверхностью конденсированной фазы. Постоянные a, b, c, d, g, h – числа, рассчитанные для различных моделей межмолекулярного взаимодействия (см. обзоры [3, 4]).

Для оценки величины скорости термофореза высокотеплопроводных тел удобно использовать отношение

$$\Delta = \frac{\mathbf{v}_{\mathrm{TR}}}{\mathbf{v}^{E}_{TR}} = \frac{1}{2}\xi\,\mathrm{Kn}\left[C_t + \frac{3}{k_{TS}}(C_t - 2C_m)\right] \tag{3.4}$$

Рассмотрим два предельных случая. Для диффузного взаимодействия (коэффициенты α и ε порядка единицы)

$$\Delta \cong M\xi\,\mathrm{Kn} \tag{3.5}$$

т.е. скорость термофореза тел с высокой теплопроводностью может значительно превысить ее эпштейновское значение. Для зеркального взаимодействия (коэффициенты α и ε достаточно малы)

$$\Delta \cong \xi\,\mathrm{Kn}\left(\frac{m}{\alpha} - \frac{n}{\varepsilon}\right) \tag{3.6}$$

т.е. отличие скорости термофореза от эпштейновского значения может быть сколь угодно велико, причем в обе стороны; она может даже поменять знак. Здесь M, m, n – некоторые числа порядка единицы.

4. Обсуждение результатов. Существенное и принципиальное отличие приведенных граничных условий от эпштейновских заключается в учете наряду с максвелловским тепловым скольжением слагаемых, обусловленных наличием радиального потока тепла через поверхность раздела фаз. В явном виде последний представлен в граничном условии для температуры (1.4). В неявной форме поток тепла содержится во всех трех слагаемых граничного условия для тангенциальной составляющей скорости газа на поверхности тела: в выражении для тепловых напряжений, также введенном еще Максвеллом, в уточненном выражении для теплового скольжения и в новом, третьем, слагаемом. При этом важно отметить не просто наличие радиального потока тепла, а его неоднородность вдоль поверхности тела (т.е. отличие от нуля тангенциальной производной теплового потока).

Таким образом, в то время как классический (эпштейновский) термофорез обусловлен максвелловским тепловым скольжением, пропорциональным первой производной от температуры, термофорез высокотеплопроводных тел определяется механизмом, обязанным своим происхождением ее второй производной. Представляется удачным термин, введенный Соне [7], назвавшим этот эффект скольжением второго порядка.

Как следует из соотношений (3.2) и (3.3), скорость термофореза при малых значениях теплопроводности тела резко падает с ростом последней, а при больших – перестает от нее зависеть.

Уместно подчеркнуть, что вопреки распространенному в литературе утверждению классический (эпштейновский) термофорез не зависит от числа Кнудсена $\mathrm{Kn} = \lambda/R$ (точнее, зависит в слабой степени как малая поправка к основному выражению, см. формулу (3.1)), в то время как скорость термофореза высокотеплопроводных тел пропорциональна Kn. На первый взгляд, это должно указывать на малость рассматриваемого эффекта. Однако множитель $\xi = \kappa_i/\kappa$ в выражении (3.5) с лихвой компенсирует это уменьшение. Действительно, для аэрозолей поваренной соли и ртути в воздухе при $\mathrm{Kn} = 0.1$ измеренные значения превышают рассчитанные по формуле Эпштейна (3.2) в несколько десятков раз, однако вполне согласуются с соотношением (3.5). То же можно сказать об остальных измерениях, проведенных с аэрозолями различной природы, результаты которых находятся в разительном противоречии с предсказаниями классической теории. (Оставляем в стороне интерполяционные соотношения, призванные удовлетворить чисто прикладные потребности, но далекие от убедительных научных обоснований.)

Особый интерес представляет формула (3.6), из которой следует, что скорость термофореза высокотеплопроводных тел может принимать любое, сколь угодно большое или малое значение и может быть даже отрицательной. Все сводится в данном случае к использованию в расчетах тех или иных значений коэффициентов аккомодации газовых молекул при их столкновении с поверхностью тела. Так, например, если аккомодация импульса молекул достаточно слабая, такая, что выполняется неравенство $\varepsilon < \alpha n/m$, то скорость термофореза становится отрицательной. О возможности существования отрицательного термофореза уже сообщалось в ряде публикаций (см., например, [8–11]). Экспериментальные результаты авторы [12] интерпретируют как реальную демонстрацию отрицательного термофореза. Заметим, что для получения по-настоящему надежных результатов расчета скорости термофореза высокотеплопроводных тел необходимо располагать достоверными данными о характере аккомодации газовых молекул на поверхности конденсированной фазы.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Maxwell J.C.* On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature // Phil. Trans. Roy. Soc. London. Ser. A. 1879. V. 170. Pt 1. P. 231–258.
2. *Epstein P.S.* Zur Theorie des Radiometers // Z. Phys.1929. Bd. 54. H. 7/8. S. 537–563.
3. *Bakanov S.P.* Thermophoresis in gases at small Knudsen numbers // Aerosol Sci. Technol. 1991. V. 15. № 2. P. 77–92.
4. *Баканов С.П.* Термофорез в газах при малых числах Кнудсена // Успехи физ. наук. 1992. Т. 162. № 9. С. 133–152.
5. *Баканов С.П., Ролдугин В.И.* Граничные задачи кинетической теории газов и необратимая термодинамика // ПММ. 1977. Т. 41. Вып. 4. С. 651–659.
6. *Smoluchowski M.* Ueber den Temperatursprung bei Waermeleitung in Gasen // Sitzber. Akad. Wiss. Wien. 1898. Bd. 107. S. 304–329.
7. *Sone Y.* Flow induced by a thermal stress in a rarefied gas // Phys. Fluids. 1972. V. 15. № 8. P. 1418–1423.
8. *Vestner H., Kubel M., Waldmann L.* Higher-order hydrodynamics and boundary conditions application to the thermal force // Nuovo Cimento. Ser. B.1975. V. 25. № 1. P. 405–412.
9. *Sone Y., Aoki K.* Negative thermophoresis – thermal stress slip flow around a spherical particle in a rarefied gas // Rarefied Gas Dynamics. New York: AIAA. 1981. P. 489–503. (Progr. Astronaut. and Aeronaut. V. 74. Pt 1.)
10. *Баканов С.П., Ролдугин В.И.* О двух методах построения теории термофореза крупных аэрозольных частиц // Коллоид. ж. 1977. Т. 39. № 6. С. 1027–1038.
11. *Горелов С.Л.* Термофорез и фотофорез в разреженном газе // Изв. АН СССР. МЖГ. 1976. № 5. С. 178–182.
12. *Сутугин А.Г., Петрянов-Соколов И.В.* К вопросу о существовании отрицательного термофореза // Коллоид. ж. 1984. Т. 46. № 1. С. 160–162.

Веймар (Германия)
e-mail: bakanow@gmx.de

Поступила в редакцию
30.X.2002