УДК 533.6.0118:541.182.2/3

© 2004 г. С. П. Баканов

ДИНАМИКА МАЛОЙ КАПЛИ В ТЕРМОДИФФУЗИОННОЙ КАМЕРЕ

Приводится решение задачи о движении капли, размеры которой малы по сравнению с длиной свободного пробега молекул окружающего каплю газа, в полях температур и концентраций. Используется предложенный ранее подход [1, 2], дополненный учетом фазового перехода на поверхности капли.

До настоящего времени задача о движении аэрозольных капель в термодиффузионной камере под действием термодиффузиофореза и силы тяжести с учетом фазовых переходов на поверхности капли решалась в рамках режимов либо сплошной среды [3, 4], либо свободномолекулярного течения [5]. Модель [3, 4] дала качественно лучшее согласие с экспериментом [5] по сравнению с более ранним подходом [1, 2, 6]. Некоторое количественное расхождение авторы отнесли к несовершенствам модели и определенным упрощениям, принятым при проведении расчетов. В частности, не учитывалось, что вследствие конденсационного роста капли происходит переход от одного режима к другому. Иными словами, модель сплошной среды, примененная в [3, 4], неадекватно описывала динамику капли на начальном этапе ее эволюции от момента зарождения до достижения ею размера, когда число Кнудсена становится сравнимым с единицей. Логичным представляется дополнить модель отдельным рассмотрением начального этапа и последующим сшиванием решения с результатом [3, 4]. В предлагаемой работе при рассмотрении движения капли на начальном этапе представляется более удобным в методическом отношении использовать не "dusty gas" model, а провести прямой расчет импульса, передаваемого капле молекулами газа [2].

1. Постановка задачи. Исследование динамики малой капли в термодиффузионной камере в принципе требует такого же подхода, как и рассмотренный ранее [3, 4] случай большой капли. Уравнение движения сохраняет прежний вид (всюду далее, если не оговорено иное, суммирование ведется по индексу j)

$$\frac{d(m\boldsymbol{\upsilon})}{dt} - \boldsymbol{\upsilon}_{St}\frac{\sum n_j m_j}{n_1 m_1}\frac{dm}{dt} = \mathbf{F} - m\mathbf{g}$$

n_j, m_j – плотность и масса молекул сорта j, $\boldsymbol{\upsilon}$ – скорость капли в лабораторной системе, $\boldsymbol{\upsilon}_{St}$ – скорость стефановского потока газовой смеси. Меняются, однако, выражения для входящих в него скорости изменения массы m капли и действующей на нее силы F. Рассмотрим последовательно обе эти характеристики.

2. Изменение массы и радиуса *R* капли в процессе фазового перехода. Вычислим вначале баланс числа частиц, испытывающих фазовый переход на поверхности капли. Роль молекул нейтрального газа-носителя можно при этом не учитывать, так как они не принимают прямого участия в изменении размера капли (хотя играют определенную роль в балансе тепла, что косвенным образом сказывается на скорости роста). Воспользуемся известным газокинетическим выражением для числа газовых молекул, соударяющихся с поверхностью капли,

$$N_j^{(i)} = n_j\langle\boldsymbol{\upsilon}_j(T_i)\rangle\pi R^2 \qquad (2.1)$$

Индекс $j = 1$ соответствует пару, $j = 2$ – инертному газу (воздуху), $\langle \boldsymbol{v}_j(T_i)\rangle = \sqrt{8kT/(\pi m_j)}$ – средняя скорость молекул сорта j, k – постоянная Больцмана, T_i – температура газа. Аналогично записывается и число испаряющихся с поверхности капли газовых молекул с заменой плотности пара в окружающем газе плотностью n_{1s} насыщенного пара при температуре капли T_e.

Для числа отраженных молекул инертного газа имеем

$$N_2^{(e)} = n_2\langle \upsilon_2(T_e)\rangle \pi R^2 \tag{2.2}$$

Плотность насыщенного пара связана с его давлением p_{1s} соотношением

$$n_{1s}(T_e) = p_{1s}(T_e)/(kT_e) \tag{2.3}$$

Кроме температуры давление p_{1s} зависит еще и от радиуса кривизны поверхности капли

$$p_{1s}(T_e) = p_{1s}^{(0)}(T_e) + \alpha(T_e)/R \tag{2.4}$$

$p_{1s}^{(0)}(T_e)$ – давление насыщенного пара над плоской поверхностью, $\alpha(T_e)$ – коэффициент поверхностного (межфазного) натяжения.

Принимая во внимание малый размер капли, будем полагать температуру одинаковой по всему объему капли. Тогда имеем уравнение для изменения массы капли

$$\frac{dm}{dt} = m_1(N_1^{(i)} - N_1^{(e)}) = \frac{8R^2}{\langle \upsilon_1(T_i)\rangle}\left\{p_1(T_i) - p_{1s}(T_e)\frac{\sqrt{T_i}}{\sqrt{T_e}}\right\} \tag{2.5}$$

Отсюда находится также уравнение для изменения радиуса капли

$$\frac{dR}{dt} = \frac{2}{\pi\rho_e\langle \upsilon_1(T_i)\rangle}\left\{p_1(T_i) - p_{1s}(T_i)\frac{\sqrt{T_i}}{\sqrt{T_e}}\right\} \tag{2.6}$$

ρ_e – плотность капли.

3. Расчет квазиравновесной температуры капли. Для нахождения температуры капли вычислим баланс тепла на капле за счет соударения с ней молекул окружающего газа. Воспользуемся известным газокинетическим выражением для потока энергии на поверхность капли

$$W_1^{(i)}(T_i) = 2kT_iN_1^{(i)}(T_i) \tag{3.1}$$

Аналогичный вид имеет выражение для энергии, передаваемой капле нейтральными молекулами (при замене индекса 1 на индекс 2). Сюда следует добавить энергию, которая выделяется в результате фазового перехода пара на поверхности капли. В результате для потока энергии на каплю имеем

$$\sum W_j^{(i)}(T_i) + m_1N_1^{(i)}(T_i)L \tag{3.2}$$

Соответственно для оттока энергии при испарении (отражении) газовых молекул с (от) поверхности капли имеем выражение, отличающееся от (3.2) заменой индекса i на e. Здесь принято условие полной аккомодации, т.е. температура испаренных (отраженных) молекул предполагается равной температуре капли. Зависимостью удельной теплоты фазового превращения L от температуры пренебрегаем.

Уравнение баланса тепла при учете уравнения (2.5) принимает, таким образом, вид

$$L\frac{dm}{dt} + \sum[W_j^{(i)}(T_i) - W_j^{(e)}(T_e)] = 0 \tag{3.3}$$

или после подстановки указанных выше выражений

$$L\frac{8R^2}{\langle \upsilon_1(T_i)\rangle}\left[p_1(T_i) - p_{1s}(T_e)\frac{\sqrt{T_i}}{\sqrt{T_e}}\right] + 2kT_i[N_1^{(i)}(T_i) + N_2^{(i)}(T_i)]$$

$$-2kT_e[N_1^{(e)}(T_e) + N_2^{(e)}(T_e)] = 0 \tag{3.4}$$

Система уравнений (2.6), (3.4) при учете выражения (2.4) определяет изменение размера и квазиравновесной температуры капли в процессе фазового превращения при заданной температуре газа T_i. Система без труда решается численными методами.

4. Расчет силы, действующей на каплю. По-прежнему считаем температуру капли одинаковой по всему объему. В этом случае испарение летучего компонента, как и отражение нелетучего (при полной аккомодации), происходит равномерно со всей поверхности капли. Это, в свою очередь, означает, что интегральный импульс отдачи отраженных и испаренных молекул равен нулю. Поэтому при расчете силы, действующей на каплю со стороны газа, следует учитывать лишь импульс ударяющих о ее поверхность молекул.

Газокинетический расчет [7] дает для импульса, который передают капле ударяющиеся о ее поверхность газовые молекулы в единицу времени, выражение

$$\mathbf{F} = \sum n_j m_j \langle \upsilon_j\rangle^2\left(\frac{1}{3}\mathbf{X}_j - \mathbf{Z}_j\right)\pi\sqrt{\pi}R^2 \tag{4.1}$$

Здесь

$$\mathbf{X}_j = \frac{4}{\sqrt{\pi}\langle \upsilon_j\rangle}\left[\mathbf{u} + (-1)^j\frac{n_2 m_2}{n_j m_j}\boldsymbol{\upsilon}_{St}\right] + \frac{5}{2}\mathbf{Z}_i, \quad \mathbf{Z}_j = d_j n \operatorname{grad} n_{10} + a_j \operatorname{grad}\ln T$$

$$\boldsymbol{\upsilon}_{St} = -\frac{n_1 m_1}{\sum n_j m_j}\frac{n^2}{n_1 n_2}D_{12}(\operatorname{grad} n_{10} + k_T \operatorname{grad}\ln T), \quad n = \sum n_j, \quad n_{10} = \frac{n_1}{n}$$

$\mathbf{u}$ – скорость центра масс газовой смеси относительно капли, k_T – коэффициент термодиффузии смеси, D_{12} – коэффициент диффузии.

5. Вычисление параметров d_j и a_j. При вычислении параметров d_j и a_j будем придерживаться изложенной ранее схемы, а также принятых ранее обозначений [8]. В соответствии с этим ниже будем обозначать параметры d_j и a_j, относящиеся ко второму компоненту газовой смеси, через d_{-1} и a_{-1}. Искомые параметры определяются из решения двух независимых систем уравнений

$$\sum_{s=-1}^{s=+1} a_s a_{rs} = \alpha_r, \quad \sum_{s=-1}^{s=+1} d_s a_{rs} = \delta_r; \quad r = -1, 0, +1 \tag{5.1}$$

Правые части этих уравнений равны нулю, за исключением

$$\alpha_1 = -\frac{15\sqrt{\pi}}{8n_2}\langle \upsilon_1(T_i)\rangle, \quad \alpha_{-1} = -\frac{15\sqrt{\pi}}{8n_1}\langle \upsilon_2(T_i)\rangle, \quad \delta_0 = \frac{3\sqrt{2kT_i}}{2n_1 n_2} \tag{5.2}$$

Коэффициенты a_{rs} систем (5.1) определяются с помощью следующих соотношений:

$$a_{00} = \frac{m_0 kT}{E}, \quad a_{01} = -5(C-1)\sqrt{m_0}\frac{M_2 kT}{2\sqrt{M_1}E}, \quad a_{0-1} = 5(C-1)\sqrt{m_0}\frac{M_1 kT}{2\sqrt{M_2}E}$$

$$a_{1-1} = -\sqrt{M_1 M_2}\frac{kT}{E}\left(\frac{11}{4} - B - 2A\right)$$

$$a_{11} = \frac{5kT}{M_1 E}\left\{\frac{1}{4}(6M_1^2 + 5M_2^2) - M_2^2 B + 2M_1 M_2 A\right\} + \frac{5kTn_1}{2\mu_1 n_2} \tag{5.3}$$

$$a_{-1-1} = \frac{5kT}{M_2 E}\left\{\frac{1}{4}(6M_2^2 + 5M_1^2) - M_1^2 B + 2M_1 M_2 A\right\} + \frac{5kTn_2}{2\mu_2 n_1}$$

$$m_0 = \sum m_j, \quad M_j = \frac{m_j}{m_0}, \quad E = \frac{2}{3}nm_0 D_{12}$$

(μ_j – вязкость j-го компонента газа).

Эти выражения применимы к любому типу сферически симметричных молекул, обладающих энергией лишь поступательного движения. Для жестких упругих сферических молекул коэффициенты A, B, C выражаются особенно просто: $A = 2/5$, $B = 3/5$, $C = 6/5$.

6. Заключение. Полученные выражения для силы, действующей на каплю (4.1), и для скорости изменения ее массы (2.5) следует подставлять в уравнение движения капли. Расчет (в общем случае численный) для конкретных условий (давления, температуры и состава газовой смеси, свойств аэрозольного зародыша), проведенный на начальном этапе эволюции капли, и последующее сшивание с результатом [3, 4] устранит, по мнению автора, остающееся на сегодняшний день некоторое количественное расхождение с результатами измерений.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Баканов С.П., Дерягин Б.В.* О теории термопреципитации высокодисперсных аэрозольных систем // Коллоид. ж. 1959. Т. 21. № 4. С. 377–384.
2. *Дерягин Б.В., Баканов С.П.* Теория движения малых аэрозольных частиц в поле диффузии // Докл. АН СССР. 1957. Т. 117. № 6. С. 959–962.
3. *Баканов С.П., Ждимал В., Зарипов Ш.Х., Смолик И.* Движение аэрозольной капли в термодиффузионной камере // ПММ. 2002. Т. 66. Вып. 1. С. 95–101.
4. *Bakanov S.P., Smolik J., Zaripov Sh.Kh., Ždimal V.* Continuum regime motion of a growing droplet in opposing thermo-diffusiophoretic and gravitational fields of a thermal diffusion cloud chamber // J. Aerosol Sci. 2001. V. 32. № 3. P. 341–350.
5. *Ždimal V., Triska B., Smolik J.* Experiments on thermodiffusiophoresis of droplets in gaseous mixtures // Colloid and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 1996. V. 106. № 2/3. P. 119–125.
6. *Viehland L.A., Mason E.A.* Phoresis of spherical particles in multicomponent gas mixtures // J. Aerosol Sci. 1977. V. 8. № 6. P. 381–385.
7. *Bakanov S.P., Derjaguin B.V.* The motion of a small particle in a non-uniform gas mixture // Discuss. Faraday Soc. 1960. № 3. P. 130–138.
8. *Chapman S., Cowling T.G.* The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases. Cambridge: Univ. Press. 1952. = *Чемпен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. М.: Изд-во иностр. лит., 1960. 510 с.

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

Поступила в редакцию
30.X.2002