

ISSN 0367-1631

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ
ОДЕССКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. И. И. МЕЧНИКОВА

Физика аэродисперсных систем

ВЫПУСК 38

МЕЖВЕДОМСТВЕННЫЙ НАУЧНЫЙ СБОРНИК

Основан в 1969 г.

Одесса
“Астропринт”
2001

УДК 541.182.2/3:541.126:536.24+66.015.23:533.6

Рассмотрены вопросы испарения, конденсации и коагуляции в водном аэрозоле, а также кинетика горения твердых и порошкообразных горючих. Приведены результаты исследований по тепло- и массообмену в дисперсных системах. Освещены проблемы активного воздействия на метеорологические явления.

Для физиков, химиков, метеорологов и инженеров.

Розглянуто питання випаровування, конденсації та коагуляції у водяному аерозолі, а також кінетика горіння твердих і порошкоподібних палив. Наведено результати досліджень з тепло- і масообміну в дисперсних системах. Висвітлено проблеми активної дії на метеорологічні явища.

Для фізиків, хіміків, метеорологів і інженерів.

Редакционная коллегия:

д-р физ.-мат. наук, проф.	В. В. Калинин	(гл. ред.);
д-р физ.-мат. наук, проф.	М. Н. Чесноков	(зам. гл. ред.);
д-р физ.-мат. наук, проф.	С. К. Асланов	(зам. гл. ред.);
д-р физ.-мат. наук, проф.	А. Н. Золотко	(зам. гл. ред.);
д-р физ.-мат. наук, проф.	Н. Х. Копыт	(зам. гл. ред.);
д-р физ.-мат. наук, проф.	С. М. Контуш	
д-р физ.-мат. наук, проф.	Ю. П. Корчевой;	
д-р физ.-мат. наук, проф.	А. В. Затовский;	
д-р физ.-мат. наук, проф.	В. Г. Шевчук;	
профессор, Польша	Анджей Гавдзик;	
канд. физ.-мат. наук, доц.	Г. Н. Липатов;	
канд. физ.-мат. наук, доц.	С. В. Маргашук;	
канд. физ.-мат. наук	Я. И. Вовчук	(секретарь);
канд. физ.-мат. наук	С. Г. Орловская	(отв. секретарь)

Адрес редакционной коллегии:

65026, Одесса, ул. Пастера, 27, университет, кафедра теплофизики,
тел. 23-12-03, 23-62-27.

Редакция при Одесском национальном университете
им. И. И. Мечникова.

За содействие в издании очередного 38-го сборника "Физика аэродисперсных систем" редакционная коллегия сборника ФАС выражает глубокую признательность ректору Одесского национального университета им. И. И. Мечникова академику Смынтыне Валентину Андреевичу и Генеральному директору научно-технического центра энерготехнологий НАН Украины (г. Киев) академику Корчевому Юрию Петровичу.

© Одесский национальный университет
им. И. И. Мечникова, 2001

ОГЛАВЛЕНИЕ

ФИЗИКА АЭРОЗОЛЕЙ

- Лушников А. А., Загайнов В. А., Нужный В. М.*
Расчет скорости испарения капель воды и сопоставление с экспериментом 7
- Стручаев А. И., Копыт Н. Х.*
Роль подавления турбулентных пульсаций в уменьшении потерь переносимой примеси из ядра вихревого кольца 18
- Бойченко С. В., Швець О. В., Бойченко О. В.*
Дослідження десорбції сорбентів різної природи під час випаровування вуглеводневого палива 28
- Лялин А. Л.*
Метод граничной сферы в теории фотоэмиссионной зарядки сферической седиментирующей аэрозольной частицы 36
- Бойко Ю. И., Копыт Н. Х.*
Связь кинематических условий движения и диссипации импульса трением в ползущих течениях. 45
- Обвищева Л. А.*
Определение эффективных коэффициентов взаимодействия молекул и атомов хлора с полупроводниковыми оксидами металлов методом электропроводности 52
- Орловская С. Г., Калинчак В. В., Калинчак А. И.*
Высокотемпературный теплообмен в аэрозвеси частиц . . . 61

ФИЗИКА ГОРЕНИЯ

- Яровой Т. А., Вовчук Я. И., Золотко А. Н., Полетаев Н. И*
Воспламенение, горение и потухание частиц высокозольных углей. Часть II. Горение одиночной частицы высокозольного угля 71

<i>Скогарев В. Г., Флорко А. В.</i> Факельное стационарное горение жидкого многокомпонентного углеводородного топлива	82
<i>Драган Г. С.</i> Влияние обработки частиц твердого топлива водными растворами калийсодержащих соединений на кинетику их воспламенения и горения	90
<i>Шевчук В. Г., Бойчук Л. В., Иванов С. Ю.</i> Естественно-конвективная неустойчивость в горящих пылях	99
<i>Трофименко М. Ю., Чесноков М. Н., Смагленко Т. Ф.</i> Измерение излучательной способности оптически плотных пламен твердых смесевых топливных систем	106
<i>Головки В. В., Копейка А. К.</i> Влияние инертных добавок на критические условия воспламенения газозвеси частиц магния	111
<i>Рябчук Л. И., Чесноков М. Н.</i> Воспламенение и потухание таблетки торфа при лазерном возбуждении химических реакций на поверхности	118
<i>Корнилов В. Н., Кондратьев Е. Н.</i> Горение одиночных углеродных частиц в акустически пульсирующем потоке	127
<i>Захарченко В. Л., Кондратьев Е. Н., Жиганюк И. В.</i> Влияние воды как инертной добавки на структуру ламинарного диффузионного факела метана	142
<i>Семенов К. И.</i> Особенности остывания седиментирующих в воздухе высоко- температурных металлических микрочастиц	151

ТЕПЛОМАССОБМЕН

<i>Калинчак В. В., Орловская С. Г., Гулеватая О. Н.</i> Высокотемпературный тепломассообмен нагреваемой лазерным излучением углеродной частицы с учетом стефановского течения на ее поверхности	158
--	-----

<i>Игнатенко В. М., Штинарева И. М., Ауров В. В.</i>	
Стохастическая неустойчивость и диффузионная ионизация высоковозбужденных атомных систем в электромагнитном поле. Модели клеточных автоматов	171
<i>Флорко И. А., Полетаев Н. И., Флорко А. В.</i>	
Теплообмен излучением в горящих дисперсных системах	178
<i>Коваль С. В., Кускова Н. И.</i>	
Теплофизические характеристики жидких металлов	189
<i>Поповский А. Ю., Алтоиз Б. А., Пыжов Е. В.</i>	
Учет аппаратной функции в задачах исследования неоднородных прослоек оптическими методами	197
<i>Амбросов С. В.</i>	
Моделирование оптимальной схемы опторазрядного разделения газов	207
<i>Мочалов А. А., Коваль С. В.</i>	
Математическая модель кристаллизации сплава в буферной области слитка	212

ГАЗОДИНАМИКА

<i>Асланов С. К.</i>	
Решение задачи Рэлея о неустойчивости тонких струй для стадии их распада	220
<i>Затовский А. В., Левин М. В., Лисы В.</i>	
Кинетика разбавленных полимеров с учетом вязкого последствия	228
<i>Гетманец В. Ф., Заславский В. М., Федчук А. П., Барняк Е. М.</i>	
Режимы течения жидкой двуокиси углерода в капилляре при фазовых переходах	237
<i>Кирилук А. В., Затовский А. В.</i>	
О влиянии однородного электрического поля на спектр мессбауэровского поглощения броуновскими частицами с осевой симметрией	246

Ческая Т. Ю.
Вращательное броуновское движение пористой гидратированной частицы в жидкости 253

Альтман И. С.
Об асимметрии потоков газообразной окиси при горении одиночной магниевой частицы 262

ЭЛЕКТРОФИЗИКА

Коваль Л. А., Флорко А. В.
Оптические и электрические свойства бора при температурах горения 266

Куклина И. В., Козловская В. П.
Расчет интенсивности свечения атомов щелочных металлов в водородно-кислородном пламени в присутствии магнитного поля 273

Витавецкая Л. А., Малиновская С. В.
Особенности излучения лазерной плазмы ионов Th и U 278

Чернякова Ю. Г., Шумлянский И. И., Препелица Г. П.
Особенности сателлитной структуры линий излучения плазмы железа в малоиндуктивной вакуумной искре 282

В. І. Маренков
Пасивний електростатичний зонд у запиленій плазмі 286

УДК 551.575.36(421)

А. А. Лушников¹, В. А. Загайнов¹, В. М. Нужный²

¹*ГНЦ НИФХИ им. Л.Я. Карпова, Воронцово поле, 10, 103064 Москва, Россия.*

²*Государственный университет им. Т.Шевченко, просп. ак. Глушкова,
Киев, Украина*

Расчет скорости испарения капель воды и сопоставление с экспериментом

Предложен новый подход в теории испарения-конденсации. Это подход может быть использован для применения при широком изменении условий столкновения между частицами и молекулами пара — в широком диапазоне чисел Кнудсена.

Введение

В настоящее время испарения частиц представляет собой традиционную проблему в теории дисперсных систем. Этой проблеме посвящено множество работ за более чем столетнюю историю, тем не менее, поток работ на эту тему не иссякает. Это объясняется незавершенностью создания теории.

Наибольшие сложности соответствуют промежуточным числам Кнудсена ($Kn = \frac{l}{a}$, l — длина свободного пробега, a — радиус частицы). К решению проблемы можно подойти с двух сторон: (i) полуэмпирически — совместить свободномолекулярный режим столкновения частиц с молекулами пара ($Kn \gg 1$) с непрерывным режимом ($Kn \ll 1$); (ii) теоретически — решить уравнение Больцмана и найти функцию распределения для системы частица — испаряющиеся молекулы при произвольных Kn . К первым работам на эту тему можно отнести статью Максвелла [1]. Можно утверждать, что наибольшего успеха на первом направлении достигли Фукс и Суругин [2], судя по цитированию их работ [2] и [3]. Второму направлению также посвящено множество работ, к наиболее значительным из которых относятся работы Девисона [4], Сахни [5], Лойялки [6] и т.д. Значительно упростили проблему решения уравнения Больцмана Бхатнагар, Гросс и Крук [7]. Они линеаризовали уравнение Больцмана и привели к виду, в котором можно найти его решение сравнительно несложными методами. Этот метод использован в

настоящей работе. В этой же работе представлены экспериментальные данные по испарению капель воды при различных давлениях, соответствующих различным режимам столкновения. При этом предполагалось, что (i) температура частицы остается неизменной, (ii) и равна температуре окружающего газа, т.е. испарение медленное и стационарное. В течение эксперимента температура контролировалась, оставаясь постоянной. Подгонка теоретических результатов под экспериментальные данные производилась с помощью одного параметра — вероятность прилипания.

Ниже приведены основы построения теоретической модели, и исследована ее способность предсказать экспериментальные измерения.

2. Теория

Общие положения

Рассмотрим частицу радиуса a , помещенную в окружающую атмосферу, включающую инертный газ, концентрация которого n_g , и конденсирующиеся пары, концентрация которых n . Молекулы пара сталкиваются с частицей. Часть молекул, сталкиваясь с частицей, захватывается этой поверхностью, другая часть после столкновения возвращается в газовую среду. Чтобы описать этот процесс роста или испарения частицы, запишем уравнение:

$$\partial_r r = V_m j(r), \quad (1)$$

здесь $V_m = \frac{M}{\rho}$ — объем молекулы, M — масса молекулы, ρ — плотность вещества частицы, $j(r)$ — поток молекул пара на поверхность частицы.

Это уравнение может быть записано в форме:

$$\int_{r_0}^r \frac{dr'}{j(r')} = V_m \Delta t, \quad (2)$$

здесь r — конечный радиус частицы, Δt — время роста или испарения частицы (в зависимости от знака $j(r)$). Основная проблема сводится к расчету $j(r)$. Чтобы решить эту проблему, необходимо решить уравнение Больцмана, найти функцию распределения, а затем найти поток, проинтегрировав по $v dv$ (v — скорость молекулы). Прделаем эту процедуру. Само по себе уравнение Больцмана достаточно сложное, поэтому имеет смысл воспользоваться упрощенной его формой — БГК приближением:

$$\mu \partial_r f + \frac{1-\mu^2}{r} \partial_\mu f = \frac{1}{l} \left(\frac{1}{2} n(r) - f \right), \quad (3)$$

здесь $\mu = \cos \theta$; θ — угол между нормалью к поверхности частицы и направлением движения частицы. Пусть длина свободного пробега будет единицей длины. Тогда ур.(3) может быть переписано в виде:

$$\mu \partial_r f + \frac{1-\mu^2}{r} \partial_\mu f = \frac{1}{2} n(r) - f. \quad (3.1)$$

Чтобы найти решение уравнения (3.1), разобьем функцию распределения:

$$f(\mu, r) = f_+(\mu, r) + f_-(\mu, r), \quad (4)$$

где $f_+(\mu, r)$ — функция распределения молекул, летящих на поверхность частицы — $(\bar{v}\bar{n}) < 0$, $f_-(\mu, r)$ — молекул, летящих от частицы — $(\bar{v}\bar{n}) > 0$.

Интегралы функции распределения $f(\mu, r)$:

$$n(r) = \int_0^1 (f_+(\mu, r) + f_-(\mu, r)) d\mu; \quad j(r) = \int_0^1 (\mu f_+(\mu, r) - f_-(\mu, r)) d\mu, \quad (5)$$

где $n(r)$ — концентрация молекул пара, $j(r)$ — поток молекул, функция, которую следует подставить в уравнение (2).

Функции $f_+(\mu, r)$ и $f_-(\mu, r)$ связаны между собой граничными условиями:

$$f_-(\mu, r = a) = \Phi(f_+(\mu, r = a)). \quad (6)$$

Более подробно форма зависимости $\Phi(f_+(\mu, r = a))$ будет обсуждена позднее. Наиболее простой случай этой зависимости:

$$f_-(\mu, r = a) = (1 - \beta) f_+(\mu, r = a), \quad (7)$$

где β — вероятность прилипания молекулы при столкновении с частицей.

Решение уравнения (3.1) было найдено в виде:

$$f_+(\mu, r) = \frac{1}{2} e^{r\mu} \int_r^\infty e^{-\sqrt{r'^2 - r^2(1-\mu^2)}} \frac{r' n(r') dr'}{\sqrt{r'^2 - r^2(1-\mu^2)}}. \quad (8)$$

Чтобы найти $j(r)$ для уравнения (2), надо знать $n(r)$, которое необходимо для уравнения (8).

$n(r)$ может быть представлено в форме:

$$n(r) = n_\infty - (n_\infty - n_a) \frac{a}{r} \Psi(r), \quad (9)$$

здесь n_∞ — $n(r)$ когда $r \rightarrow \infty$, n_a — $n(r=a)$, где a — радиус частицы; $\Psi(r)$ — функция, которую еще надо определить, $\Psi(a)=1$. Эта функция может быть представлена как:

$$\Psi(r) = (1 - \phi)\phi + \phi, \quad (10)$$

где $\phi(a) = 1$ и становится 0, когда $r \gg 1$; $\Psi(r \rightarrow \infty) = \phi$.

Чтобы рассчитать $j(r)$, подставим ур. (10) в ур. (9) и затем используем в ур. (5). В этом случае $j(a)$ и $n(a)$ принимают форму:

$$n_a = n_\infty \left(1 - \frac{\beta}{2}\right) - \left(1 - \frac{\beta}{2}\right) \delta ((1 - \phi)r_0 - \phi s_0); \quad (11)$$

$$j(a) = \frac{\beta n_\infty}{4} - \frac{\beta \delta}{2} ((1 - \phi)r_1 - \phi s_1),$$

здесь $\delta = n_\infty - n_a$ и были введены функции:

$$r_v = a \int_0^1 \mu^v d\mu \int_0^\infty \frac{\phi(\sqrt{x^2 + 2ax\mu + a^2}) e^{-x} dx}{\sqrt{x^2 + 2ax\mu + a^2}}; \quad (12)$$

$$s_v = a \int_0^1 \mu^v d\mu \int_0^\infty \frac{e^{-x} dx}{\sqrt{x^2 + 2ax\mu + a^2}}; \quad (13)$$

Эти уравнения должны быть дополнены уравнением сохранения:

$$\frac{\partial r^2 j(r)}{\partial r} = 0, \quad (14)$$

что приводит к $(r^2 j(r)) = a^2 j(a)$ или

$$j(a) = \frac{D\delta\phi}{a}. \quad (15)$$

Уравнения (11), (12), и (16) создают замкнутую систему уравнений, которую следует решать каждый раз, когда следует найти $j(a)$.

Функция $\phi(r)$ неизвестна, но понятно, что она связывает функцию $n(r)$ вблизи поверхности и вдалеке от поверхности. Она должна быть монотонной и гладкой, поэтому ее можно выбрать в форме:

$$\phi(r) = \frac{a}{r} e^{-\gamma(r-a)}. \quad (16)$$

Величина $\frac{1}{\gamma}$ определяет, насколько большие расстояния разделяют $n(a)$ и n_∞ .

Граничные условия

Теперь выберем граничные условия в самом общем виде. Эти условия связывают $f_+(\mu, r)$ и $f_-(\mu, r)$ на поверхности частицы. Они могут быть записаны в виде:

$$f_-(\mu, a) = (1 - \beta) \int_0^1 R(\mu, \mu') f_+(\mu', a) d\mu' + \frac{1}{2} \beta n_e, \quad (17)$$

здесь n_e — равновесная концентрация конденсирующихся (испаряющихся) молекул $R(\mu, \mu')$ — ядро столкновения.

Рассмотрим наиболее простой случай, когда $\gamma \rightarrow \infty$, т.е. когда на поверхности частицы возникает скачок концентраций (резкое изменение) на поверхности частицы. При этом можно рассмотреть два предельных случая: (i) зеркальное отражение $R(\mu, \mu') = \delta(\mu, \mu')$ и (ii) диффузное рассеяние $R(\mu, \mu') = 1$. Ниже приведены расчеты для обоих случаев:

i. Для зеркального отражения: $R(\mu, \mu') = \delta(\mu, \mu')$; $\gamma \rightarrow \infty$;

$$j(a) = \frac{j_0}{1 + \frac{\beta a s_1}{2D}}; \quad j_0 = \frac{\beta}{4} (n_\infty - n_e) \quad (18)$$

ii. Для диффузного отражения: $R(\mu, \mu') = 1$; $\gamma \rightarrow \infty$;

$$j(a) = \frac{j_0}{1 + \frac{a(s_1 - \frac{1-\beta}{2}s_0)}{2D}}; \quad j_0 = \frac{\beta}{4} (n_\infty - n_e) \quad (19)$$

Эти результаты для скорости испарения в различных режимах столкновения были сопоставлены с измерениями по испарению сферической капли в диффузионном и около диффузионном режимах испарения.

Ниже приведены результаты этого сопоставления.

3. Экспериментальный метод

Испаряемая капля была помещена в герметичную камеру, объем которой составлял несколько литров. В этой камере температура и давление газа-носителя (Ar и He) контролировались. Температура самой капли измерялась термопарой, на которой она подвешивалась. В течение всего эксперимента температура, как окружающего газа, так и испаряемой капли оставалась постоянной. Весь процесс измерения управлялся и контролировался при помощи компьютера. Размер частицы контролировался оптическими методами. Одновременно производилось создание банка данных и первичная обработка результатов. Схема эксперимента приведена на рисунке 1.

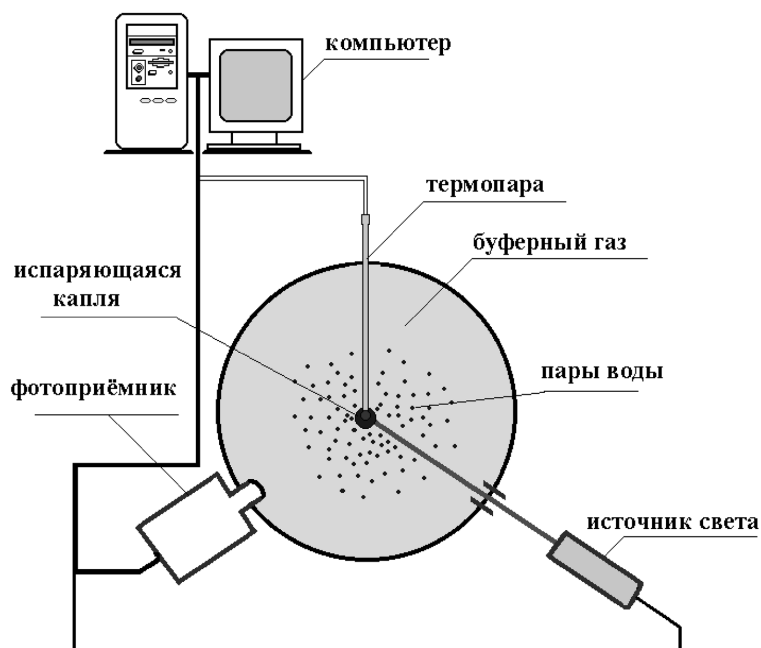


Рис. 1. Схема экспериментальной установки

4. Результаты сравнения экспериментальных данных с теоретическими расчетами

Сопоставления теоретических расчетов с экспериментальными измерениями можно проиллюстрировать рисунками (рис.2 — рис.5). Из этих рисунков видно, что экспериментальные и расчетные кривые наиболее хорошо совпадают при вероятности прилипания $\beta \approx 0.31 - 0.36$. Этот результат

не зависит от вида газа-носителя ($\frac{m_{Ar}}{m_{He}} \approx 10$) и от его давления.

Следует отметить, что предлагаемая теория имеет некоторые ограничения, которые обусловлены приближениями, используемыми при получении результата, а также при сравнении теоретических расчетов с экспериментом.

(i) В нашем случае мы использовали наиболее грубое приближение предлагаемой теории, когда $\gamma \rightarrow \infty$. Это было сделано из тех соображений, что в этом случае получается явное выражение для скорости испарения из уравнений (18–19).

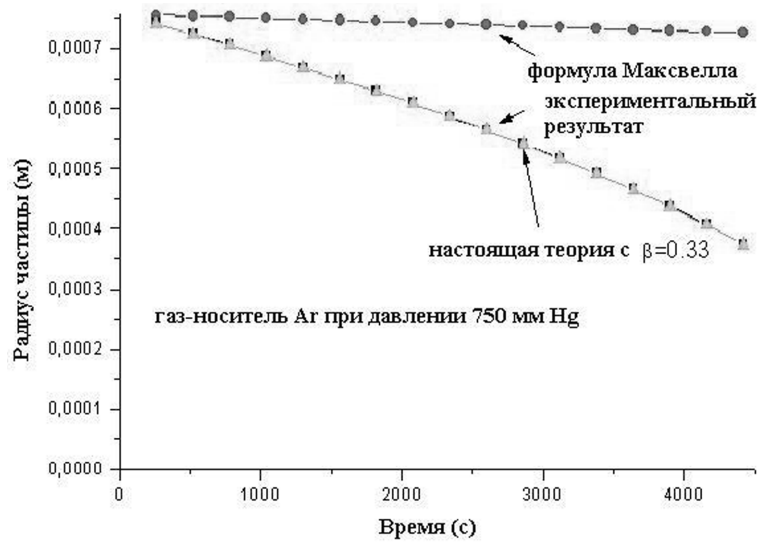


Рис. 2. Зависимость размера капли воды от времени при испарении.
Газ-носитель — Ag, давление — 750 мм Hg

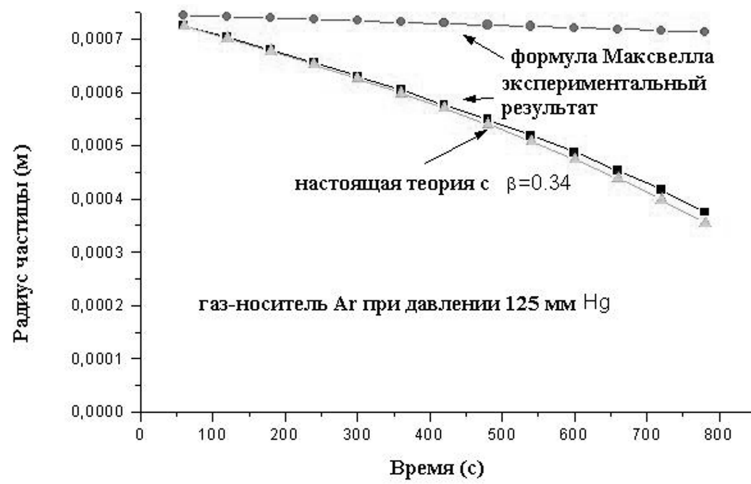


Рис. 3. Зависимость размеров капли воды от времени при испарении.
Газ-носитель — Ag, давление — 125 мм Hg

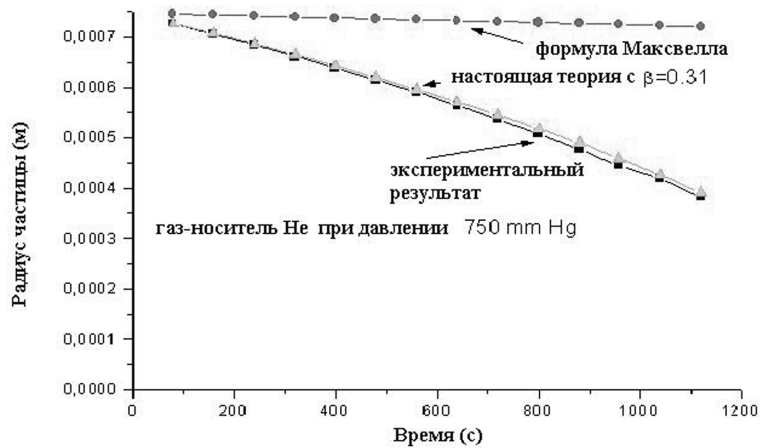


Рис. 4. Зависимость размеров капли воды от времени при испарении.
Газ-носитель — He, давление — 750 мм Hg

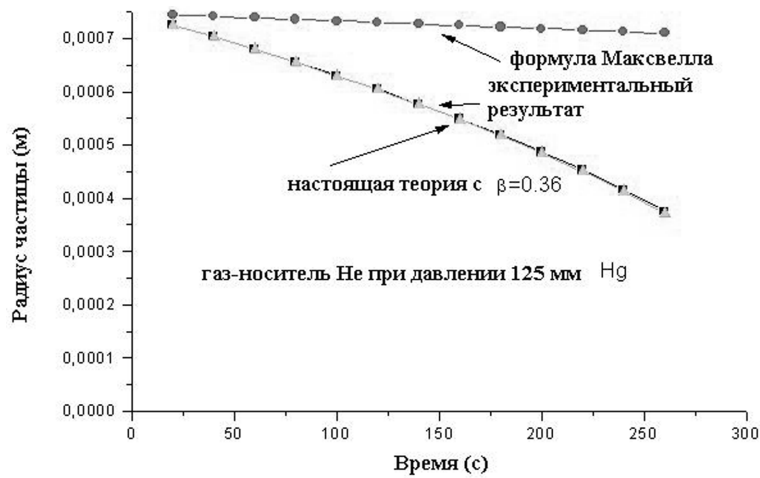


Рис. 5. Зависимость размеров капли воды от времени при испарении.
Газ-носитель — He, давление — 125 мм Hg

(ii) Граничные условия в форме ур. (17) предполагает, что вероятность прилипания β не зависит от угла падения на поверхность частицы, т.е. возникает некоторое усреднение по всем углам, и определяется некоторое среднее β .

(iii) БГК приближение применимо тогда, когда концентрация паров (n) много меньше, чем концентрация буферного газа (n_g) т.е. когда ($n \ll n_g$).

(iv) В реальной ситуации температура поверхности частицы несколько ниже, чем температура окружающего газа, поскольку испаряющиеся молекулы уносят с собой энергию связи, что ведет к понижению температуры поверхностных молекул. Из-за этого равновесная концентрация пара в окрестности поверхности несколько ниже той, которая предполагается при изотермическом испарении. Чтобы оценить эту разницу температур, необходимо решить уравнение теплового баланса [8]:

$$j(a)\Delta H_v = k\partial_r T(a) + k_p\partial_r T_p(a), \quad (20)$$

здесь T , T_p — это температуры окружающей атмосферы и частицы соответственно, ΔH_v — молярная теплота испарения, k , k_p — коэффициенты теплопроводности окружающего воздуха и частицы соответственно.

Решение уравнения (20) позволяет сделать оценку:

$$T_s - T_\infty = \frac{\Delta H_v D_g}{k} (n_\infty - n_a). \quad (21)$$

Когда скорость испарения невелика, как в нашем случае, разница ($n_a - n_v$) становится пренебрежимо малой, и поправку в уравнение (18) можно не вводить.

Когда скорость испарения становится большой, уравнения (20) и (17) должны решаться одновременно.

Несмотря на ограничения, которые накладываются на уравнения (18-19), расчетные формулы хорошо работают для представленных экспериментальных данных в широком диапазоне условия (газ-носитель, давления).

В заключение можно сделать следующие выводы:

1. Предложен новый подход в теории испарения-конденсации. Этот метод основан на решении уравнения Больцмана, при этом для математического упрощения используется БГК приближение. Этот подход может быть использован для применения при широком изменении условий столкновения между частицами и молекулами пара — в широком диапазоне чисел Кнудсена (свободномолекулярный режим, переходный, диффузионный режим столкновения).

2. Теоретические расчеты были сопоставлены с испарением жидких капель в непрерывном и около непрерывном режимах. Теория хорошо описывает экспериментальные измерения, когда вероятность прилипания молекул пара к частицам составляет $v=0.31-0.36$. При этом в расчетах использовалось наиболее грубое приближение.

3. Как было показано, настоящая теория обуславливает применение интерполяционной формулы [2]; а также в предельных случаях совпадает с ранее полученными результатами [6], [10] и т.д.

Благодарности. Авторы выражают признательность за поддержку Международному научно-техническому центру, проект № 521 и 1078.

Литература

1. *Maxwell J.C.* In Encyclopedia Britnica. — 1877. — Vol.2. — p.82.
2. *Fuchs N.A. and Sutugin A.G.* High dispersed aerosols, in Topics in Current Aerosol Research (Part 2) / ed. by G.M. Hidy and J.R., 1971.
3. *Fuchs N.A.* Mechanics of Aerosols, Pergamon Press, 1964.
4. *Davison B.* Proc. phys. Soc. Lond. — 1951. — **64**, 98.
5. *Sahni D.C.* The effect of a black sphere on the flux distribution in an infinite moderator // J. Nuclear Energy, parts A/B. — 1966. — **20**. — P. 915–920.
6. *Loyalka S.K.* J. Chem. Phys.}. — 1973. — **58**, 354, (1).
7. *Bhatnagar P.L., Gross E.P., and Krook M.* A model for collision processes in gases. 1. Small amplitude processes in charge and neutral one-component systems // Phys.Rev. — 1954. — **94**. — 511–525.
8. *Seinfeld J.H. and Pandis S.N.* Atmospheric chemistry and physics, Jhon Wiley & Sons, ink. — 1998.
9. *Cipolla J.W., Lang H., Loyalka S.K.* Kinetic theory of condensation and evaporation. // J. Chem. Phys. — 1974. — **61**, 1, 69–77.
10. *Chang, X. and Davis E.J.* Iterfacial conditions and evaporation rate of a liquid droplet // J. Colloid Interface Sci. — 1974. — **47**, 65–76.

О. О. Лушніков, В. А. Загайнов, В. М. Нұзний
**Розрахунок швидкості випаровування краплин води
і порівняння з експериментом**

АНОТАЦІЯ

Запропоновано новий підхід до теорії випаровування — конденсації. Цей підхід може бути використано для застосування при широкій зміні умов зіткнення між частинами і молекулами пару — при широкому діапазоні чисел Кнудсена

Lushnikov O.O., Zagaynov V.A., Nuzniy V.M.
**Water droplets evaporation rate calculation and making a comparison
with experimental data**

SUMMARY

A new approach has been proposed to evaporation — condensation theory. This approach may be used for a large range of Knudsen number.

А. И. Стручаев, Н. Х. Копыт

Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова, г. Одесса

Роль подавления турбулентных пульсаций в уменьшении потерь переносимой примеси из ядра вихревого кольца

На основании критического анализа и обработки проведенных ранее экспериментов по переносу “пассивной” примеси (аэрозоля или красящего вещества) вихревыми кольцами (ВК) в области ламинарного, переходного и турбулентного режима их движения сделана попытка объяснить различие в потерях из ВК подавлением турбулентных пульсаций скорости в ядрах турбулизованных вихрей. Замечена особенность переноса примеси в области переходного режима — перестройка внутреннего течения в ядре ВК, переводящая это ядро из квазиламинарного (“толстого”) в более компактное квазитурбулентное и сопровождающаяся интенсификацией потерь на этом этапе.

Введение

Научный и практический интерес к исследованию турбулентных течений при наличии тепло- и массообмена связан с проблемой интенсификации теплообменных процессов во многих отраслях промышленного производства, особенно в энергетике и химической технологии.

При этом характерной чертой широкого класса турбулентных потоков является наличие нестационарного организованного движения крупномасштабных образований со слабой пульсацией, когда из-за неустойчивости основного потока возникают весьма устойчивые и типичные стохастические структуры: жгуты, кольца, спирали и т. д. Принято считать, что в осесимметричной струе процесс генерации вихревых структур вызван возбуждением слоя сдвига вблизи сопла и появлением на участке $2 \leq z \leq 12$ крупномасштабных волн неустойчивости струйного столба. Существование в этой области предпочтительной моды у осесимметричных волн неустойчивости приводит к реализации в физическом пространстве из множества возможных геометрических конфигураций лишь круговых вихрей — тороидальных вихревых колец.

Упорядоченные крупномасштабные вихревые структуры являются характерной чертой свободного сдвигового турбулентного течения и вносят основной вклад в крупномасштабный турбулентный перенос, причем, вызываемое ими искажение границы турбулизованного поля способствует осуществлению переноса турбулентной жидкости также и поперек потока [1]. При этом крупномасштабные вихревые структуры могут существенно вли-

ять на процессы переноса количества движения и могут служить средством управления течением и (тепло)массообменом в потоке.

К тому же, движение упорядоченных крупномасштабных структур формирует, в основном, динамические, кинематические и энергетические характеристики течения в целом. Обратное же влияние мелкомасштабной турбулентности (и молекулярной диффузии) на эти характеристики крупномасштабного потока для турбулентных течений, по-видимому, незначительно, т.е. эти эффекты разных порядков, а сама природа процесса передачи энергии “по каскаду” является односторонней.

Вот почему феномен вихревого течения в форме вихревого кольца является привлекательным объектом исследования крупномасштабных организованных структур с концентрированной завихренностью в турбулентных течениях. Его изучение во многих экспериментальных и теоретических исследованиях зачастую ограничивается определением лишь кинематических характеристик [2] или внутренней структуры [3] вихря при формировании и движении в однородных и стратифицированных средах. Наряду с этим сведения о массопереносе при движении вихревых колец весьма скудны, хотя физические предпосылки, вытекающие из их структуры, весьма обнадеживающи в плане таких исследований.

Общие представления и анализ

Исследование структуры вихревого кольца позволяет обнаружить характерную особенность турбулентных течений, заложенную в одной из общепринятых концепций их исследования — “расщепление” на области с крупно- и мелкомасштабной структурой. Более того, крупномасштабная турбулентность, характеризующаяся наличием значительных составляющих пульсационной скорости, с одной стороны интенсифицирует процессы тепло- и массообмена в турбулентных потоках, а с другой стороны — временно подавляет мелкомасштабную турбулентность с ее универсальной структурой, локализуя ее в зонах вихревых образований. Такое подавление процессов, определяемых мелкомасштабной турбулентностью (и молекулярной вязкостью) в области вязкого интервала, позволяет использовать вихревые кольца в качестве транспортного объема для переноса примеси на значительное расстояние с заранее предусмотренным распределением потерь по траектории движения в зависимости от режима следования колец [4]. При этом, как и раньше [5], принято считать, что вихревое кольцо представляет собой замкнутый крупномасштабный вихрь, переносящий существенно безвихревую жидкость. Эта жидкость заполняет определенную область, окружающую “ядро” вихря, и носит название “атмосферы”.

Немногочисленные эксперименты по массопереносу [6, 7, 8] показывают, что потери вещества (“примеси”) из атмосферы в гидродинамический след движущегося вихревого кольца связаны со сложными динамическими процессами диффузии завихренности и последующей конвекцией ее из об-

ласти концентрации (“атмосфера”, “ядро”), неустойчивостью вихрей и генерацией мелкомасштабной турбулентности, усиливающей диффузию.

По мере движения вихревого кольца на участке формирования, срыв завихренности в области погранслоя и ее диффузия в гидродинамический след происходит весьма интенсивно, образуя характерный “хвост”. Вне области погранслоя диффузия завихренности пренебрежимо мала, поэтому, аэрозольная примесь, не попавшая в ядро при формировании, или выброшенная из него мелкомасштабными турбулентными пульсациями, некоторое время сопровождает вихревое кольцо, постепенно теряясь в след.

В ярко выраженной тороидальной области с концентрированной завихренностью, называемой “ядром” вихревого кольца, находящаяся там примесь сохраняется практически до полной остановки ВК.

Различия скорости диффузии вещества из “атмосферы”, где турбулентность способствует срыву завихренности и уносу ее в гидродинамический след, и из “ядра” вполне объяснимы возможным подавлением турбулентности в ядре вихря, обнаруженным сравнительно недавно [4, 5, 6].

Модель переноса пассивной аэрозольной примеси турбулентными вихревыми кольцами, основанная на многочисленных экспериментальных фактах, использует предположение об независимости от пространственных координат изменяющихся во времени скалярных коэффициентов переноса: турбулентной вязкости ν_t и турбулентной диффузии D_t . В то же время в ряде экспериментов, в частности с высокотурбулентными ($Re \geq 10^4$) вихревыми кольцами [], в области ядра вихря обнаружено существенное расхождение с упомянутой моделью: проявляется анизотропия турбулентных коэффициентов переноса — в радиальном направлении они значительно меньше, чем в осевом, а в самом ядре турбулентные пульсации подавлены настолько, что течение в нем “ламинаризуется” (наблюдаемый эффект ламинарных ядер в турбулентных вихревых кольцах. [8]).

Причина такого расхождения кроется в предположении об “однородности” турбулентности по всему объему вихря, в то время как эксперименты указывают на резкое снижение турбулентного переноса примеси из ядра вихревого кольца при сохранении интенсивного турбулентного переноса в его “атмосфере”.

К аналогичным выводам пришли авторы работ [1, 9, 10, 11], позволяющих прояснить природу возникновения анизотропии коэффициентов турбулентного переноса.

Онуфриев и Христианович [9], а затем и Владимиров [10], рассмотрели влияние вихревой закрутки потока на его статистические характеристики на основе полуэмпирических уравнений, описывающих поведение поля средней скорости, вторых моментов в приближении “локального баланса” с использованием замыкающих соотношений Прандтля, Ротта и Колмогорова. Ими показано, что в завихренном потоке “коэффициенты переноса” являются следствием не только диффузионного процесса, но и взаимодей-

ствия пульсаций скорости с пульсациями центробежного и кориолисова ускорения.

Взаимодействие полей пульсаций скорости и пульсаций ускорений, вызванных вращением газа в ядре вихря приводит к эффекту анизотропии коэффициентов переноса: по радиальному направлению от центра ядра вихря все диффузионные турбулентные потоки (тепла, примеси и др.) подавляются под воздействием вихря скорости. В то время как для окружного и тангенциального направления изменения турбулентной структуры вращающегося потока практически не происходит.

Если рассмотреть уравнение для энергии турбулентных пульсаций в цилиндрической системе координат, то его можно представить в виде:

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial t} + \langle v_r v_\phi \rangle \left(\frac{\partial V}{\partial r} - \frac{V}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \langle v_r E \rangle = - \frac{\langle E \rangle}{r}, \quad (1)$$

где $\langle \dots \rangle$ — знак операции осреднения.

Как показали Онуфриев и Христианович [], в ядре кольцевого вихря, где $V = \Omega \cdot r$, наличие центральной силы подавляет порождение энергии турбулентного движения, что приводит к условиям:

$$\langle v_r^2 \rangle + \langle v_\phi^2 \rangle + \langle v_z^2 \rangle = \frac{2 \langle E \rangle}{3}; \quad \langle v_r \rangle = \langle v_z \rangle = 0;$$

$$\langle c' v_z \rangle = \frac{t \langle v_r^2 \rangle \cdot \partial \langle c \rangle / \partial r}{a};$$

$$\langle c' v_r \rangle = \frac{t \langle v_z^2 \rangle \cdot \partial \langle c \rangle / \partial z}{b};$$

В уравнении переноса для энергии пульсационного движения (1)

$$\langle v_r v_\phi \rangle \left(\frac{\partial V}{\partial r} - \frac{V}{r} \right) = 0.$$

Вне ядра $V/r = \Omega r_0^2 / r$ быстро убывает, и на достаточном расстоянии остаются обычные соотношения турбулентного переноса.

Таким образом, в ядре вихревого кольца ($r < r_0$) подавляется порождение турбулентного движения. Одновременно с этим возникает сильная анизотропия турбулентного переноса. Это является следствием того, что величина потока $\langle c' v_\phi \rangle \neq 0$. Коэффициент “турбулентной диффузии” в осевом направлении может быть значительно большим, чем в радиальном. Это, по-видимому, одна из причин длительного существования вихревых колец, движущихся в турбулентном режиме.

Методика эксперимента

Исследование поведения примеси при переносе её вихревыми кольцами проводили как в газовой (воздух) так и в жидкой среде (вода, водные растворы неорганических солей, ряд органических соединений — этанол, бензол, диэтиловый эфир и др.). Вихревые кольца динамической или конвективной природы, используемые как транспортные объемы, создавали генераторами мембранного (поршневого) или конвективного типа по методикам, детально описанным ранее [2]. В качестве переносимой в воздухе примеси использовали аэрозоли различного происхождения (дымы термической возгонки $NaCl$ и NaN_3 со средним размером частиц $\langle d_1 \rangle = 4,56 \text{ мкм}$ и $\langle d_2 \rangle = 3,15 \text{ мкм}$, распылы трансформаторного масла средним размером $1,38 \text{ мкм} \dots 2,05 \text{ мкм}$), а в воде — растворы хлористого олова (IV) известной концентрации или растворы некоторых неорганических веществ, для которых хорошо отработана методика их количественного определения.

Гидродинамический режим движения определяли по начальному числу Рейнольдса, построенному по характеристикам движения и геометрическим размерам сформировавшегося вихревого кольца в момент выхода на участок автомодельности: $Re_0 = v^1 U_0 D_0$ (U_0 — начальная скорость, m/c ; D_0 — его начальный диаметр, m ; v^1 — кинематическая вязкость среды, m^2/c).

Для оценки эффективности переноса “пассивной” примеси вихревыми кольцами использовали традиционную методику, состоящую в измерении массы аэрозоля m_0 в кольце в момент его выхода на режим автомодельного движения и массы m_i , доставляемой кольцом в некоторую точку траектории. При этом коэффициент “транспортной” эффективности $\eta(m)$ при известной функции распределения $f(r)$ частиц примеси по размерам с учетом полидисперсности переносимого аэрозоля можно выразить как

$$\eta(m) = \frac{m_i}{m_0} = \delta(r) \frac{\int_0^\infty r_i^3 f(r_i) dr_i}{\int_0^\infty r_0^3 f(r_0) dr_0} \cong \delta(r) \frac{\sum_{r_{min}}^{r_{max}} r_i^3 f(r_i) dr_i}{\int_{r_{min}}^{r_{max}} r_0^3 f(r_0) dr_0}, \quad \delta(r) = \left(\frac{\langle r_0 \rangle}{\langle r_i \rangle} \right)^3.$$

Используя для оценки потерь примеси уравнение турбулентной диффузии, было получено [8], что для кольца, движущегося в турбулентном режиме, количество примеси, остающейся в нём, можно описать формулой

$$m_i = m_0 \exp\{-b\lambda(t)\},$$

где: $b = 5,35 \times 10^{-2}$; $\lambda(t) = L(t)/D_0$; $L(t)$ — перемещение вихревого кольца, m .

Результаты и обсуждение

Если оценивать эффективность переноса с точки зрения потерь ее из движущегося за счет процессов диффузии, то следует иметь ввиду следующее. Ядро вихревого кольца окружено примесью, не попавшей в него при формировании, но сохраняющейся на некотором этапе его движения. По мере перемещения ВК примесь, которая содержится как в его “атмосфере”, так и окружающая ядро, теряется в сопровождающий след. Эти потери снижают коэффициент “транспортной” эффективности, а их интенсивность при этом, как показывает эксперимент, определяется, в основном, гидродинамическим режимом движения, т.е. числом Рейнольдса вихревого кольца.

При этом следует отметить, что различия условий массопереноса (потери) возникают на начальном этапе движения ($0 < L(t)/D_0 < 10$), когда устанавливается структура ядра и атмосферы ВК и определяют характер этих процессов в дальнейшем.

Анализ экспериментов по переносу “пассивного” аэрозоля и красящей примеси вихревыми кольцами позволил выявить некоторые характерные особенности: в исследованном диапазоне чисел Рейнольдса, т.е. при $8,85 \times 10^2 < Re_0 < 8,35 \times 10^4$, различимы области, характеризующиеся отличающимися условиями массопереноса.

На нижней границе этого диапазона ($8,85 \times 10^2 < Re_0 < 1,85 \times 10^3$) турбулентного режима движения или еще не достигнуто, или он не является достаточно выраженным, поэтому здесь процессы переноса определяются молекулярной вязкостью и диффузией.

На верхней же границе исследованного диапазона (начиная с чисел Рейнольдса $Re_0 > 4,0 \times 10^4$) турбулентный режим движения вихревого кольца можно считать достигнутым в том плане, что турбулентная диффузия в процессе массоотдачи от его поверхности становится преобладающей. Роль различной степени турбулизации “атмосферы” ВК на стадии формирования и, особенно, после выхода на режим автомодельного движения в процессах переноса становится понятна — потери из атмосферы ВК увеличиваются с ростом числа Рейнольдса. Другими словами — турбулентные ВК более интенсивно теряют примесь на начальном участке, а оставшуюся затем прочнее удерживают (теряют значительно слабее) на большем участке движения, чем ВК с меньшим значением чисел Рейнольдса, что хорошо видно из Рис. 1.

Несколько иначе выглядит ситуация в области переходных режимов движения ВК ($2,00 \times 10^3 < Re_0 < 2,55 \times 10^3$). Здесь развитой турбулентности в “атмосфере” вихревого кольца в полном смысле еще не достигается, поэтому турбулентная диффузия, хотя и преобладает над молекулярной, но все же в меньшей степени, чем это наблюдается при $Re_0 < 4,0 \times 10^4$. Особое место занимает течение в ядре ВК при этом режиме движения. Здесь крупномасштабная турбулентность, начинающаяся нарастать в “атмосфере” вихря, вырождается в мелкомасштабную за счет передачи энергии от энергосодержащих вихрей вязким. Это приводит к существенному изменению коэффициентов

турбулентного переноса — в “атмосфере” вихря, а точнее в направлении от “твердотельно” вращающегося ядра к границе кольца они возрастают, а в самом ядре происходит “ламинаризация” течения.

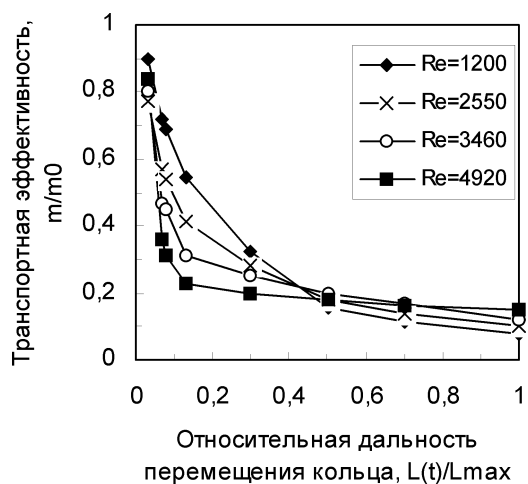


Рис.1. Зависимость транспортной эффективности ВК от режима движения

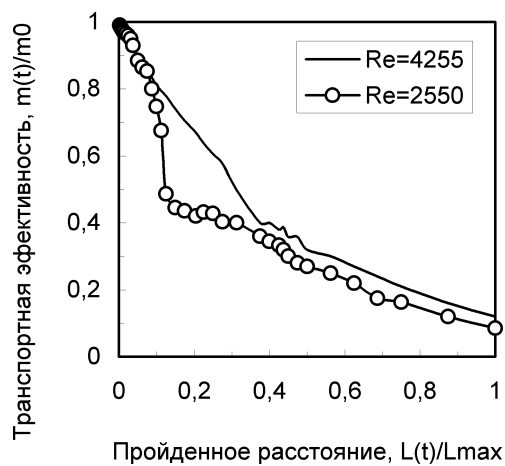


Рис.2. Изменение транспортной эффективности ВК в переходном режиме

На Рис.2 отчетливо видно, что на начальном участке переходного режима происходит резкое изменение интенсивности потерь примеси; затем интенсивности потерь восстанавливается до величин в режиме турбулентного движения. Это является подтверждением предложенного механизма, т.к. после потерь примеси из турбулизующейся “атмосферы”, ламинарное ядро не генерирует завихренность и не выбрасывает ее в атмосферу, а за тем в след — в нем процессы переноса определяется молекулярной диффузией.

Одним из механизмов, приводящих к изменению массоотдачи, является возрастание вектора скорости на границе погранслоя, которое вызвано вращением поверхности (“твердотельного” ядра). Это приводит к возрастанию касательных напряжений за счет увеличения коэффициентов турбулентного обмена.

Перенос энергии в область малых масштабов вихрей, можно рассматривать как процесс дробления больших вихрей на вихри меньшего размера или как растяжение вихревых трубок (уменьшение их диаметра). В результате такого переноса происходящая в вязком интервале диссипация энергии ведет к потере скорости вихревого кольца и явно наблюдаемого уменьшения диаметра вихревого кольца, особенно ярко выраженного на участке остановки вихря.

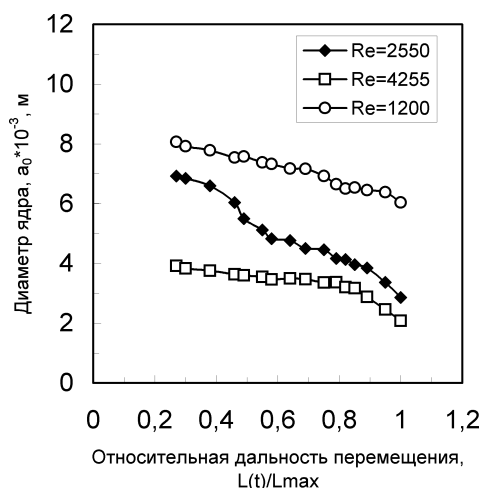


Рис.3. Изменение размера ядра ВК в зависимости от режима движения

Выводы и заключение. Таким образом, наличие завихренности приводит к перестройке характеристик турбулентного потока. Возникающие массовые центробежные и кориолисовы силы могут оказывать значительное (существенное) влияние на турбулентную структуру течения, приводя как к интенсификации, так и к подавлению турбулентного обмена.

Полученные результаты хорошо согласуются с исследованиями массопереноса движущимся вихревым кольцом в воздухе [1, 2] и жидкостях [3].

Использование некоторых соображений, основанных на исследовании локальной изотропной турбулентности, применительно к слабой сдвиговой турбулентности, конечно же весьма условно, и должно вестись с большой осторожностью и оговорками, даже в том случае, когда использование подобных соображений дает хорошее согласование с получаемыми результатами.

Литература

1. Онуфриев А.Т., Христианович С.А. Об особенностях турбулентного движения в вихревом кольце // Докл. АН СССР, 1976. — Т.229, № 1. — С. 42–44.
2. Владимиров В.А., Луговцов Б.А., Тарасов В.Ф. Подавление турбулентности в ядрах локализованных вихрей // ПМТФ, 1980, №. — С. 69–76.
3. Johari H. Chemically reactive turbulent vortex ring. // Phys. Fluids, 1995. — Vol.7, №9. — Pp. 2420–2427.
4. Кутателадзе С.С., Волчков Э.П., Терехов В.И. Аэродинамика и тепло-массообмен в ограниченных вихревых потоках. — Новосибирск: ИТФ СО АН СССР, 1987. — 282 с.
5. 1600005, МКИЗ Н 05 Г 3/00. Способ аэродинамической нейтрализации зарядов статического электричества / А.И. Стручаев, С.М. Контуш, Н.Х. Копыт // Открыт., изобр., пром. образцы, товарн. знаки. — 1990. — № 38.
6. Стручаев А.И., Контуш С.М., Копыт Н.Х. Доставка заряженного аэрозоля вихревыми кольцами для нейтрализации статического электричества // Физ. и техн. монодисперс. систем. — М.: Моск. энергетич. ин-т, 1991. — С. 87 — 88.
7. Стручаев А.И., Копыт Н.Х., Бойко Ю.И. Эффективность переноса дисперсной примеси вихревыми кольцами // Гидродинамич. проблемы технологич. процессов. — М.: Наука, 1989. — С. 126–134.
8. Стручаев А.И., Копыт Н.Х., Бойко Ю.И. Влияние режима на перенос аэрозоля вихревыми кольцами // Физ. и техн. монодисперс. систем. — М., 1991. — С. 50 — 52.
9. Sullivan J.P., Widnall S.E., Ezekiel S. Study of vortex rings using a laser Doppler velocimeter // A.I.A.A. Journal. — 1973. — Vol. 11, No.10. — P. 1384–1389.
10. Тарасов В.Ф., Якушев В.И. Экспериментальное исследование переноса примеси турбулентным вихревым кольцом // Ж. прикл. мех. и техн. физ. — 1974. — №1. — С. 130 — 136.
11. Копыт Н.Х., Стручаев А.И., Краснощеков Ю.И., Рогов Н.К., Шамшев К.Н. Горение больших объемов диспергированных топлив и эволюция их продуктов в свободной атмосфере // Физика горения и взрыва. — 1989. — №3. — С. 21 — 28.

О. І. Стручаєв, М. Х. Копит

Роль придушення турбулентних пульсацій у зменшенні витрат з ядра вихрового кільця при перенесенні їм домішок

АНОТАЦІЯ

На основі критичного аналізу та обробки проведених раніше експериментів з перенесення “пасивних” домішок (аерозолу або фарбуючої речовини) вихровими кільцями (ВК) в області ламінарного, перехідного і турбулентного режимів їх руху зроблено спробу обґрунтувати розбіжність у втратах з ВК придушенням турбулентних пульсацій швидкості в ядрах турбулізованих вихорів. Помічено особливість переносу домішок в області перехідного режиму — перебудова внутрішньої течії в ядрі ВК, яка переводить це ядро з квазіламінарного (“товстого”) до більш компактного квазітурбулентного і супроводжується інтенсифікацією втрат на цьому етапі.

Stroutchayev A. I., Kopyt N. Kh.

A role of suppression of turbulent pulsation in reduction of a losses carrying impurity from a core of vortex ring

SUMMARY

On the basis of critical analysis and processing the experimental data obtained earlier on transportation of a “passive” impurity (aerosol or coloring substance) by the vortex rings (VR) in laminar, transitive and turbulent mode of their movement it has been made an attempt to explain distinction in losses from VR by speed turbulent pulsation suppression in a core of a turbulent vortex. The impurity transportation peculiarity has been noticed in the field of a transitive mode — reorganization of internal current in a VR-core, which transformed this core from quasi-laminar (“thick”) form into more compact quasi-turbulent one and was accompanied by intensification of losses at this stage.

С. В. Бойченко, О. В. Швець, О. В. Бойченко

Київський міжнародний університет цивільної авіації, м. Київ

Селективна та розподільна здатність сорбентів різної природи до парів вуглеводневих палив

Описано дослідження адсорбції парів різних видів палив на сорбентах різної природи. Метою цих досліджень є підбір найбільш оптимального сорбента для реалізації в технології запобігання втратам палива від випаровування під час зберігання.

Виходячи з результатів, отриманих у ході дослідження, потрібно зазначити, що при підборі сорбентів для поглинання паливних парів в промислових умовах можна чекати прийнятних результатів при дослідженні середньо- і дрібнопористих сілікагелей, цеоліта NaX, а також деяких сортів вугілля, що промислово виробляється. Найбільшою сорбційною ємністю характеризуються: цеоліт NaX, KAU, BPL і СКТ. Найбільшу швидкість сорбції виявляє аерогель.

Відомо, що в умовах зберігання, технологічних перекачок, транспортування за рахунок властивості випаровуватись вуглеводневе паливо безповоротно втрачається.

При цьому, по-перше, погіршується екологічна ситуація в навколишньому середовищі; по-друге, втрачається цінна вуглеводнева сировина.

Дана стаття присвячена дослідженням адсорбції парів різних видів палив на сорбентах різної природи. Метою цих досліджень є підбір найбільш оптимального сорбента для реалізації в технології запобігання втратам палива від випаровування під час зберігання. Об'єктами дослідження є випаровуваність нафтових палив різного вуглеводневого складу та кінетика адсорбції їх парів. Предметами такого дослідження стало паливо нафтового походження різного вуглеводневого складу, яке служить джерелом енергії для двигунів транспортних засобів: автомобільний бензин марки А-76 за ГОСТ 2084, авіаційний бензин за ТУ 38.5901481-96, паливо для реактивних двигунів за ГСТУ 320.00149943.007-97 (таблиця 1) та сорбенти різної природи.

Цій проблемі присвячено багато науково-технічних публікацій, але сучасний стан проблеми свідчить про нагальну необхідність її вирішення.

До першої групи увійшли природний клиноптилоліт та синтетичні цеоліти NaA, CaA і NaX. До другої групи були підібрані сілікагелі: дрібнопористий КСМГ, середньопористі КСС-4 і КСС-3 та крупнопористий КСК. До третьої групи сорбентів, що досліджувались, увійшли як марки імпортного,

так і вітчизняного вугілля, що випускаються промислово, а також спеціально розроблені сорти кулькового вугілля та аерогель.

Таблиця 1

Фізико-хімічні показники випаровуваності палив, що досліджувались

Показник	Паливо		
	автомобільний бензин	авіаційний бензин	авіаційний гас
Фракційний склад:			
• початок кипіння, °С;	41,5	45	150
• 10 % викіпання, °С;	53,5	75	162
• 50% викіпання, °С;	87	109	183
• 90% викіпання, °С;	159	150	208
• кінець кипіння, °С.	191	183	218
Густина при 20°С, кг/м ³	732	746	787
Тиск насичених парів при 38 °С, кПа	62,0	39,1	2,4
Поверхневий натяг, мН/м	23,4	24,4	25,9
Індекс випаровування (ІВ=10P _s +7V ₇₀) згідно EN 228:1993	1076,5	443	24

Таблиця 2

Характеристики сорбентів, що досліджувались

Тип	Марка	Сумарний об'єм пор, куб.см/г	Питома поверхня, кв. м/г	Середній радіус пор, Å
Силікагелі	КСМГ	0,37	570	13
	КСС-4	0,76	650	23,4
	КСС-3	0,925	522	35,4
	КСК	0,76-0,93	250-270	61-75
Вугільні сорбенти	СКТ	0,83	620	---
	АГ-3	0,83	282	12
	АР-В	0,52	---	---
	ВРЛ	0,95	700	---
	Аерогель	0,34	170	---
	ФФ	0,88	957	30-70
Цеоліти	Клиноптилоліт	0	25	3,8
	NaA	0	3	4
	CaA	0,18	800	5
	NaX	0,24	1100	7,4

Дослідження кінетики сорбції палив проводили при тиску насичених парів та кімнатній температурі на заздалегідь пропечених (210°С — для силікагелів та вугілля і 400°С — для цеолітів) сорбентах в закритих ексикаторах протягом 164 годин (бензини А-76 та високооктановий) та 378 годин (авіаційний гас та бензини для вугілля КАУ, СУА і аерогеля).

Як видно з таблиці 3 та рисунків 1,2,3 кінетика сорбції та гранична сорбція бензинів і палива для реактивних двигунів для різних сорбентів сильно відрізняються. Взагалі, найменше летючим, як і очікувалося, є паливо для реактивних двигунів — навіть дуже сильні сорбенти протягом тривалого часу сорбують його не більше як 10% мас. Більш летючий автомобільний бензин марки А-76 створює тиск насичених парів достатнім для того, щоб за відносно короткий час найбільш сильні сорбенти поглинули його 35-60% мас. І, нарешті, тиск насичених парів високооктанового бензину приводить до значень граничного насичення окремих сорбентів 40-75% мас.

У межах одного адсорбата також спостерігаються значні відмінності. Зокрема, для бензину А-76 з числа цеолітів швидко і досить багато адсорбує NaX (біля 20% або 200 мг бензину на 1 г цеоліта). Інші цеоліти виявляють значно меншу поглинаючу здатність, а клиноптилоліт практично не поглинає.

З групи сілікагелей найбільшу сорбційну здатність виявляють середньопористі сілікагелі КСС-3 та КСС-4, значення граничної сорбційної ємності для них досягають 25-30%. Сілікагель КСМГ сорбує бензин швидше, але граничне значення сорбції для нього нижче. КСК ж виявляє значно меншу активність.

З групи вугілля за їх сорбційною ємністю можна виділити три підгрупи. Перша складається з двох сортів спеціального кулькового вугілля СУА і С-ТНВ. Вони показують дуже високу швидкість сорбції, а граничне значення сорбції палив для них досягає 40-60%. Друга підгрупа складається з ряду промислового та спеціального вугілля: ВРЛ, СКТ, АР-В, АГ-3, КАУ. Вони виявляють досить високі швидкість та граничну величину сорбції (значення останньої — в межах 22-32%) і на відміну від першої групи є досить доступними та недорогими (за винятком КАУ). До третьої підгрупи відносяться три вугільних сорбента: ФФ, антрацитний і аерогель (не активований), які виявляють відносно низькі швидкість і граничну величину сорбції, до 10% мас. У випадку авіаційного бензину описана тенденція також зберігається, але граничні значення сорбції збільшуються на 3-10%, а для середньопористих сілікагелей КСС-4 і КСС-3 значення граничної сорбції досягає 50% мас.

Для реактивного палива, через низький тиск насиченої пари, кількість адсорбованих парів набагато менша, ніж у бензинів. Особливо потрібно відзначити, що кінетичні криві для більшості сорбентів не виходять на насичення, тобто гранична сорбція не досягається навіть за 378 годин.

Виходячи з результатів, отриманих у ході дослідження, потрібно зазначити, що при підборі сорбентів для поглинання паливних парів в промислових умовах можна чекати прийнятних результатів при дослідженні середньо- і дрібнопористих сілікагелей, цеоліта NaX, а також деяких сортів вугілля, що промислово виробляється. Найбільшою сорбційною ємністю характеризуються: цеоліт NaX, КАУ, ВРЛ і СКТ. Найбільшу ж швидкість сорбції виявляє аерогель.

На підставі такого висновку можна стверджувати, що використання сорбентів може стати високоефективним способом вловлювання парів цінної вуглеводневої сировини.

Таблиця 3

Кінетика адсорбції палив різними сорбентами в умовах екскаторного методу (мг/г сорбента)

Сорбент	Паливо																			
	автомобільний бензин						авіаційний бензин						авіаційний гас							
	17 год /16год	41 год /47год	65 год /120 г.	89 год /168 г.	164 г. /378 г.	17 год /16год	41 год /47год	65 год /120 г.	89 год /168 г.	164 г. /378 г.	17 год /16год	41 год /47год	65 год /120 г.	89 год /168 г.	164 г. /378 г.	16 год год	47 год год	120 год год	168 год год	378 год год
Клиногг.	11,0	17,5	19,0	19,4	22,0	4,9	16,4	19,4	25,2	34,7	4,9	16,4	19,4	25,2	34,7	3,5	6,3	12,8	15,5	23,6
NaA	19,2	23,9	24,9	31,9	34,5	14,5	28,1	31,9	39,0	48,1	7,7	10,6	18,9	22,3	30,1	7,9	10,9	19,6	23,5	34,5
CaA	84,3	93,4	94,3	99,1	102	29,8	89,4	94,6	91,0	105	7,9	10,9	19,6	23,5	34,5	9,7	20,1	42,7	57,6	95,0
NaX	143	154	162	172	188	139	170	188	190	197	17,3	36,4	50,6	67,9	95,0	3,9	17,3	36,4	50,6	67,9
КСМГ	142	179	188	194	205	65,8	210	222	229	234	3,9	17,3	36,4	50,6	67,9	3,6	11,9	29,6	34,2	43,3
КСС-4	124	193	216	229	286	34,9	320	411	435	503	3,6	11,9	29,6	34,2	43,3	3,8	12,4	24,5	32,2	42,9
КСС-3	109	175	196	208	256	41,2	277	355	388	480	3,8	12,4	24,5	32,2	42,9	3,0	9,1	13,5	16,0	20,4
КСК	35,4	52,6	57,8	65,1	72,1	15,8	76,3	93,6	96,8	118	3,0	9,1	13,5	16,0	20,4	2,3	13,5	36,2	59,3	94,6
С-ТНВ	350	372	381	390	400	390	494	565	587	625	2,8	6,8	22,9	33,3	57,0	2,8	6,8	22,9	33,3	57,0
СКТ	236	250	257	261	271	175	268	286	297	309	2,8	6,8	22,9	33,3	57,0	2,8	6,8	22,9	33,3	57,0
АГ-3	209	225	235	242	249	190	272	294	300	316	6,9	11,3	31,4	45,4	70,1	6,9	11,3	31,4	45,4	70,1
Ф/Ф	31,9	41,5	44,9	51,1	54,7	29,0	50,4	51,9	63,6	72,6	3,4	4,2	9,8	11,1	12,5	3,4	4,2	9,8	11,1	12,5
АР-В	180	201	210	212	222	163	228	241	249	253	1,9	9,7	13,3	36,0	64,3	1,9	9,7	13,3	36,0	64,3
ВРЛ	251	268	272	280	288	176	309	325	330	346	1,6	5,9	23,2	33,1	57,4	1,6	5,9	23,2	33,1	57,4
Антрацит	66,4	74,5	79,1	81,3	83,5	67,2	87,5	90,0	91,0	93,5	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
КАУ	269	288	303	312	321	304	322	332	338	341	2,2	10,8	29,8	41,1	64,0	2,2	10,8	29,8	41,1	64,0
СУА	529	569	601	612	640	552	608	675	699	746	2,1	10,8	31,0	41,9	74,1	2,1	10,8	31,0	41,9	74,1
Аерогель	66,4	74,5	79,1	81,3	83,5	67,2	87,5	90,0	91,0	93,5	23,6	36,8	37,0	40,6	41,0	23,6	36,8	37,0	40,6	41,0

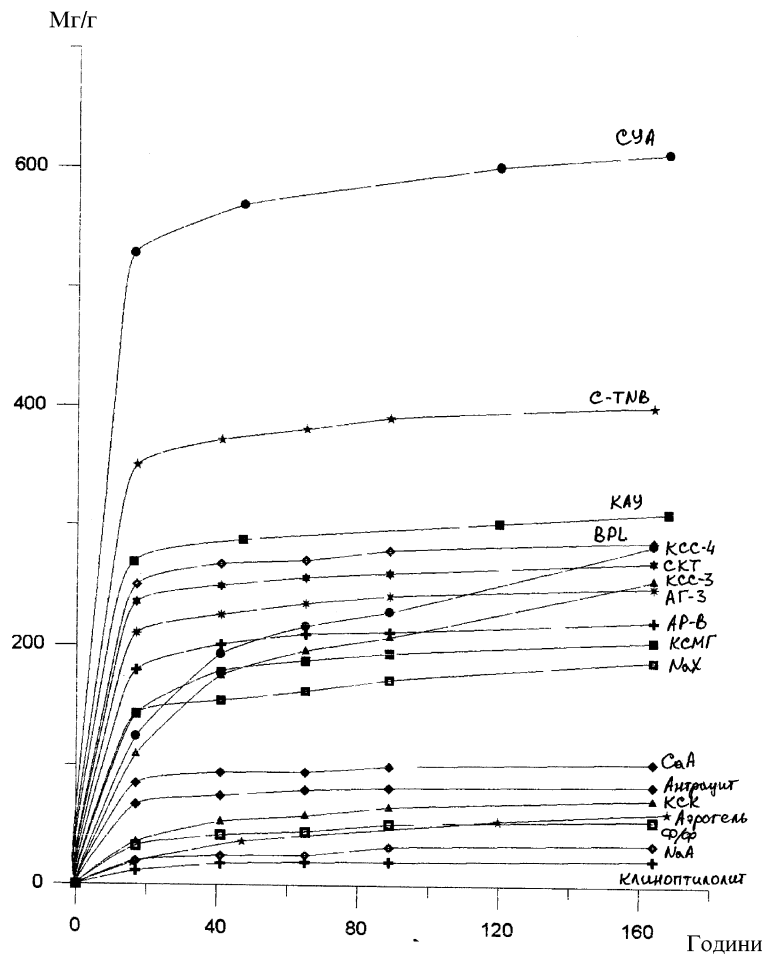


Рис. 1. Кінетика адсорбції парів автомобільного бензина марки А-76

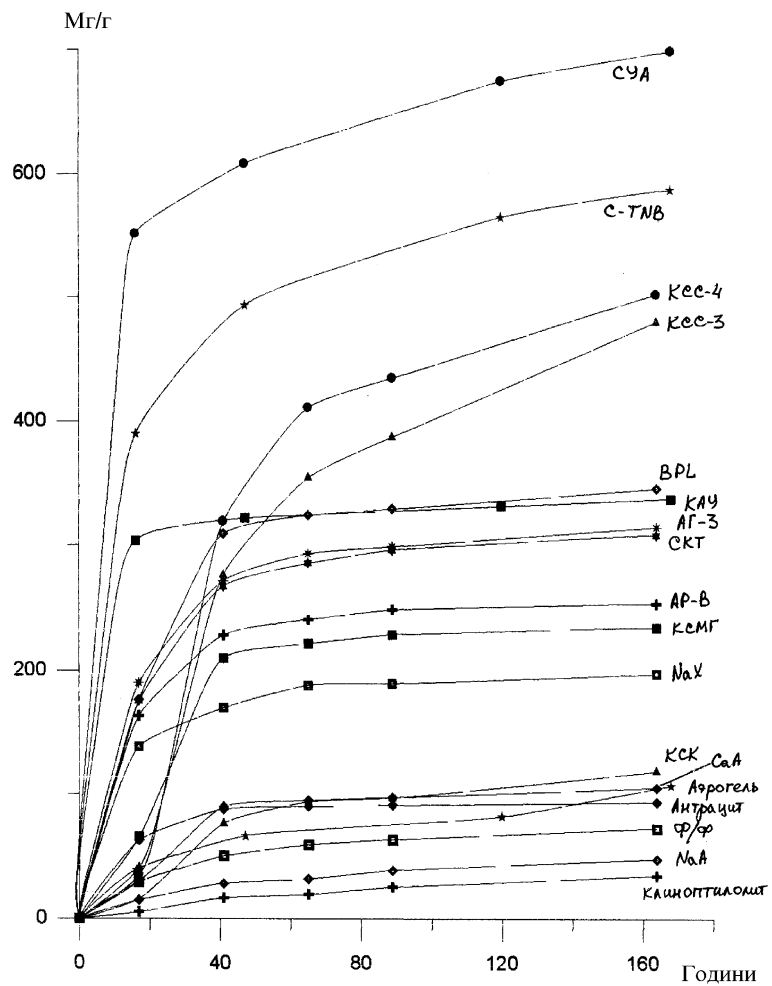


Рис. 2. Кінетика адсорбції парів авіаційного бензина

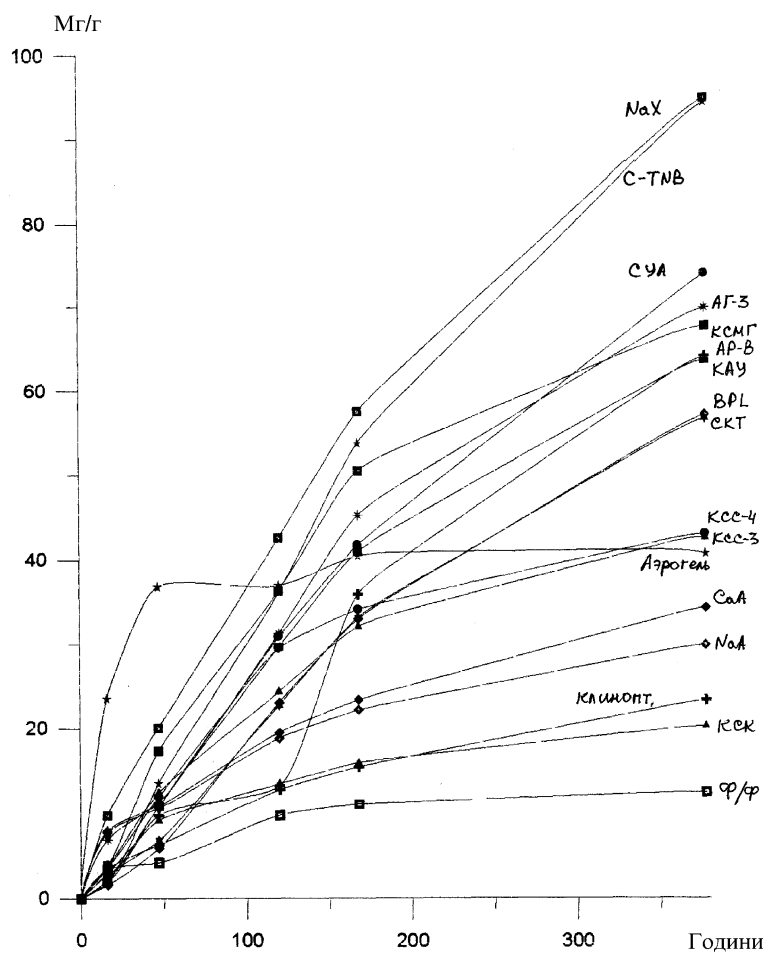


Рис.3. Кінетика адсорбції парів авіаційного газу

Література:

1. Брунауер С. Адсорбция газов и паров. Т. 1. — М.: Издательство иностранной литературы, 1948. — 781 с.
2. Серпионова Е.Н. Промышленная адсорбция газов и паров. — М.: ВШ, 1969. — 419 с.

С. В. Бойченко, А. В. Швец, А. В. Бойченко

Селективная и распределительная способность сорбентов различной природы к парам углеродных топлив

АННОТАЦИЯ

Описано исследования адсорбции паров разных видов топлива на сорбентах разной природы. Целью этих исследований является подбор наиболее оптимального сорбента для реализации в технологии предотвращения потер топлива от испарения при хранении.

Исходя из результатов, полученных в ходе исследования, необходимо подчеркнуть, что при подборе сорбентов для поглощения топливных паров в промышленных условиях можно ожидать приемлемых результатов при исследовании средне- и мелкопористых силикагелей, цеолита NaX, а также некоторых сортов угля, которые промышленно вырабатываются. Наибольшей сорбционной емкостью характеризуются: цеолит NaX, KAY, BPL и CKT. Максимальную скорость сорбции проявляет аэрогель.

Boychenko S.V., Shvets A.V., Boychenko A.V..

Selective and distributive capacity of different adsorbents in respect of fuel vapors

SUMMARY

The results of investigation of different fuel vapors adsorption on adsorbents of different nature have been described. The study has been aimed at search of optimal sorbent for technological reduction of fuel losses due to evaporation during storage.

The results obtained have allowed giving some recommendations for choice of sorbent for fuel vapour adsorption in industrial conditions. It is possible to expect acceptable outcomes from investigation of medium and small porous silica gels, NaX, and some commercial coals. Zeolites NaX, KAY, BPL and CKT have been characterized by greatest adsorption capacity. Aerogel have displayed a highest adsorption rate.

Л. А. Лялин, ст.научн.сотр.

Одесский национальный университет им.И. И. Мечникова

Метод граничной сферы в теории фотоэмиссионной зарядки сферической седиментирующей аэрозольной частицы

Представлена модель процесса фотоэмиссионной зарядки сферической седиментирующей аэрозольной частицы, предполагающая разделение воздушного пространства, окружающего частицу на кинетическую и диффузионную зоны. Получено решение уравнения фотоэмиссионной зарядки частицы в области ее положительного и отрицательного заряда. Это решение представляет собой зависимость фотоэмиссионного тока с частицы от величины ее заряда. Проведено сравнение расчетных и экспериментальных результатов и получено их удовлетворительное качественное соответствие.

Исследование взаимодействия ультрафиолетового излучения с аэрозольными частицами весьма актуально. В частности идея фотоэмиссионной зарядки частиц используется в конструкции сенсора аэрозолей для исследования выбросов частиц в процессах горения [1].

При описании процесса фотоэмиссионной зарядки сферической седиментирующей частицы воспользуемся известным из литературы [2] методом граничной сферы. Окружим частицу граничной сферой, находящейся от ее

поверхности на расстоянии равном $l = \frac{l_k + l_e}{2}$, где l_k и l_e — соответственно длины свободного пробега отрицательного иона кислорода O_2^- и электрона, м.

Соответствующие параметры связаны между собой как $l_e = 4\sqrt{2}l_k$ [3]. При нормальных условиях $l_k = 6 \cdot 10^{-8}$ м [4]. Пространство, ограниченное поверхностью частицы и граничной сферой, в дальнейшем будем называть кинетической зоной. Будем предполагать, что внутри кинетической зоны электроны и ионы движутся без взаимных столкновений, сталкиваясь лишь с граничной сферой и поверхностью частицы. Это приводит к тому, что часть потока заряда, испускаемого частицей, возвращается на ее поверхность, а часть выходит за граничную сферу, участвуя в диффузионном переносе заряда. Приравнивая потоки заряда на граничной сфере, можно получить уравнение зарядки частицы в явном виде.

Рассмотрим уравнение фотоэмиссионной потери заряда частицей в области ее начального отрицательного заряда. При попадании на поверхность

частицы (капли) потока квантов излучения $\pi r^2 \Phi_0$, из нее выбивается поток заряда электронов I_0 , А

$$I_0 = \pi r^2 \Phi_0 \gamma e, \quad (1)$$

где r — радиус частицы, м; Φ_0 — интенсивность излучения, $1/\text{м}^2\text{с}$; γ — квантовый выход; e — заряд электрона, Кл. Все, испускаемые поверхностью частицы электроны, отталкиваются ее кулоновским полем и достигают граничной сферы. Часть электронов сталкивается с молекулами кислорода и образует отрицательные ионы O_2^- , так как энергия сродства к электрону E_A , Дж, у молекулы кислорода положительна и процесс прилипания электрона к ней энергетически выгоден [5]. Некоторое количество ионов кислорода возвращается на поверхность частицы, отдавая ей электроны, потому что работа выхода электрона с поверхности частицы больше энергии сродства к электрону молекулы кислорода [5]. Другие ионы кислорода выходят за пределы граничной сферы, участвуя в диффузионном переносе заряда.

Электроны, столкнувшиеся с молекулами азота, ионов не образуют, а претерпевают упругие взаимодействия [5]. После этого часть рассеянного потока электронов может вернуться на поверхность частицы и захватиться ею. Другая его часть выходит за пределы граничной сферы, участвует в образовании ионов кислорода O_2^- и, в конечном счете, в диффузионном переносе заряда. При увеличении отрицательно заряда частицы вероятность возврата ионов O_2^- и электронов на частицу уменьшается и фотоэмиссионный ток с ее поверхности может достигнуть состояния насыщения.

Явление фотоэмиссии с поверхности сферической частицы целесообразно охарактеризовать коэффициентом отражения фотоэлектронов от граничной сферы, который определим, как отношение потока электронов, рассеянных на молекулах азота и вернувшихся на поверхность частицы I^* , А, к величине фототока насыщения [6]

$$K(Q) = \frac{I^*}{I_0}. \quad (2)$$

Коэффициент $K(Q)$ является функцией величины отрицательного заряда частицы Q , Кл.

Важным параметром, связанным с $K(Q)$, является угол α_0 , Рад, который образует вектор скорости электрона, отскочившего внутрь граничной сферы, с поверхностью сферы. Электроны, векторы скоростей которых образуют с поверхностью граничной сферы углы больше α_0 , возвращаются на частицу. Электроны, отскочившие под меньшими углами, возвращаются к граничной сфере и могут участвовать в многократных столкновениях с ее поверхностью. По-видимому, величина угла α_0 связана с высотой потенциального барьера внутри кинетической зоны $\Pi(Q)$, Дж, который должен

преодолеть электрон, отраженный от граничной сферы, для того, чтобы вернуться на поверхность частицы. Барьер этот обусловлен суперпозицией кулоновского поля отталкивания, действующего на электрон со стороны отрицательно заряженной частицы и поля притяжения зеркальных сил на малых расстояниях от электрона до поверхности частицы [7].

Высота потенциального барьера определяется выражением [8]

$$\Pi(Q) = \frac{el}{4\pi r^2 \epsilon_0} \left(Q^{\frac{1}{2}} - \frac{re^{\frac{1}{2}}}{2l} \right)^2, \quad (3)$$

где ϵ_0 — электрическая постоянная, Ф/м.

Для отрицательного заряда сферической частицы, величина которого удовлетворяет неравенству $\frac{er^2}{4l^2} \geq Q \geq 0$, и для ее положительного заряда, электрическое поле, действующее на электрон внутри кинетической зоны, будет полем притяжения и потенциальный барьер отсутствует.

Угол α_0 найдем, используя уравнение Эйнштейна и применяя закон сохранения энергии к движению электрона внутри кинетической зоны сферической частицы [8]

$$\text{Sin}\alpha_0 = \frac{\Pi[(Q)]^{\frac{1}{2}}}{[(h\gamma - A_s) + \Pi(Q)]^{\frac{1}{2}}}, \quad (4)$$

где h — постоянная Планка, Дж·с; γ — частота излучения, с⁻¹, A_s — работа выхода, Дж.

Вероятность столкновения фотоэлектронов, испускаемых поверхностью частицы, с молекулами азота на граничной сфере определена в работе [9] в предположении, что воздух на 77% по массе состоит из азота и на 23% из кислорода.

Коэффициент отражения фотоэлектронов от граничной сферы найден с учетом многократности столкновений фотоэлектронов, испускаемых поверхностью частицы, с граничной сферой [8]

$$K(Q) = \frac{\sigma(1 - \text{Sin}\alpha_0)}{1 - \sigma \cdot \text{Sin}\alpha_0}, \quad (5)$$

где σ — половина вероятности столкновения электрона с молекулой азота

[8]. Для отрицательно заряда частицы, величина которого $\frac{er^2}{4l^2} \geq Q \geq 0$, и для ее положительного заряда $\text{Sin}\alpha_0 = 0$ и $K(Q) = \sigma$.

Поток ионов кислорода от граничной сферы к поверхности частицы най-

ден в предположении существования внутри кинетической зоны потенциального барьера [8,10], определяемого выражением (3)

$$I_k = \pi(r+l)^2 n_k [\bar{V}_k - \psi(Q)]e. \quad (6)$$

Здесь n_k — концентрация ионов кислорода на граничной сфере, m^{-3} :

$\bar{V}_k = \left(\frac{8kt}{\pi m_k} \right)^{\frac{1}{2}}$ — средняя абсолютная скорость иона кислорода; k — постоянная Больцмана, Дж/К; T — температура окружающей среды, К; m_k — масса иона кислорода O_2^- , кг; $\psi(Q)$ — функция величины отрицательного заряда частицы, м/с, найденная в работе [8]

$$\psi(Q) = \frac{el}{(2m_k kt)^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{3}{2}} \epsilon_0 r^2} \left(Q^{\frac{1}{2}} - \frac{re^{\frac{1}{2}}}{2l} \right)^2. \quad (7)$$

Для отрицательного заряда частицы, величина которого удовлетворяет неравенству $0 \leq Q \leq \frac{er^2}{4l^2}$, а также для положительно заряженной частицы, тормозящее действие электрического поля внутри граничной сферы отсутствует, $\psi(Q)=0$. Полагая в (6) $I_k=0$ и решая уравнение относительно Q , найдем предельный отрицательный заряд Q , Кл, при котором поток ионов кислорода к поверхности частицы прекращается

$$Q = \left[\frac{re^{\frac{1}{2}}}{2l} + 2 \left(\frac{\pi k T \epsilon_0 r^2}{el} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^2. \quad (8)$$

За пределами граничной сферы происходит фоторазрушение ионов O_2^- , так как $h\nu > EA$. Схема этого процесса имеет вид $O_2^- + h\nu = O_2 + e$ [11].

При описании процесса зарядки сферической седиментирующей частицы будем пользоваться квазистационарным приближением, справедливость которого доказана в работе [12]. Поток заряда I , А, от отрицательно заряженной частицы за пределом ее граничной сферы запишем как

$$I = 4\pi R^2 E_{une} - 4\pi R^2 f(Re, Sc) D \frac{dn}{dR} e. \quad (9)$$

Первый член в правой части (9) представляет собой дрейфовый перенос

заряда в электростатическом поле частицы, второй член — диффузионный перенос заряда. В уравнении (9) приняты следующие обозначения: R — радиальная координата за пределом граничной сферы, м; $E = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 R^2}$ — напряженность электростатического поля вокруг частицы, В/м; u — подвижность электронов, м²/Вс; n — концентрация электронов, 1/м³; D — коэффициент диффузии электронов, м²/с. Значения u и D определены в работе [11], $f(Re, Sc)$ — ветровой множитель, учитывающий влияние движения среды на скорость диффузионного переноса заряда. В нашем случае ветровой множитель определяется формулой Фреслинга, справедливой в широком интервале чисел Рейнольдса [13]

$$f(Re, Sc) = 1 + B Re^{\frac{1}{2}} Sc^{\frac{1}{3}}, \quad (10)$$

где $B=0,34$; $Re = \frac{2Vr}{v_g}$ — число Рейнольдса, V — скорость седиментации частицы; v_g — кинематическая вязкость воздуха, м²/с; $Sc = \frac{v_g}{D}$ — число Шмидта. Скорость седиментации частицы определялась в результате численного решения уравнения седиментации в предположении, что сила сопротивления движению капли в воздухе описывается формулой Клячко [11]

$$\frac{4}{3} \pi r^3 \rho g = 6\pi\eta_g r V \left[1 + 0,265 \left(\frac{Vr}{v_g} \right)^{\frac{2}{3}} \right], \quad (11)$$

где η_g — динамическая вязкость воздуха, кг/м·с; ρ — плотность вещества частицы (капли) кг/м³; g — ускорение свободного падения м/с².

Уравнение (9) дополняется условием непрерывности потока заряда через граничную сферу

$$I = I_0 - K(Q)I_0 - \pi(r+l)^2 n_k [\bar{V}_k - \psi(Q)]e \quad (12)$$

и граничным условием на бесконечности: при $R \rightarrow \infty$; $n \rightarrow 0$.

Решение уравнения (9) имеет вид

$$I = \frac{Qu [1 - K(Q)] I_0}{\pi r^2 [\bar{V}_k - \psi(Q)] \epsilon_0 \cdot \left\{ 1 - \exp \left[- \frac{Qu}{4\pi D f(Re, Sc) \epsilon_0 r} \right] \right\}} + Qu. \quad (13)$$

При возрастании величины отрицательного заряда частицы $K(Q) \rightarrow 0$. Для

отрицательного заряда частицы, величина которого больше значения, определяемого формулой (8), $\bar{V}_k - \psi(Q) = 0$.

Таким образом, при возрастании отрицательного заряда частицы ток с частицы I стремится к своему предельному значению I_0 , определяемому формулой (1). Расчеты, проводимые с использованием выражения (13), показывают, что для капель растворов красителей трифенилметанового ряда $r = 140$ мкм, с которыми проводились экспериментальные исследования [12], при $Q = 5 \cdot 10^{-12}$ Кл– 10^{-11} Кл I меньше I_0 всего на несколько процентов и процесс выходит на насыщение.

Поток заряда от поверхности положительно заряженной частицы за граничной сферой описывается уравнением аналогичным (9) с той лишь разницей, что член, учитывающий дрейф электронов, имеет знак минус

$$I = -4\pi R^2 E u n e - 4\pi R^2 f(\text{Re}, Sc) D \frac{dn}{dr} e. \quad (14)$$

Интегрирование уравнения (14) проводилось с учетом условия непрерывности потока заряда через граничную сферу

$$I = (1 - \sigma) I_0 - \pi(r+l)^2 n_k \bar{V}_k e \quad (15)$$

и граничным условием на бесконечности: при $R \rightarrow \infty$, $n \rightarrow 0$.

Полученное решение имеет следующий вид:

$$I = \frac{(1 - \sigma) I_0 Q u}{\pi r^2 \bar{V}_k \epsilon_0 \left\{ \exp \left[\frac{Q u}{4\pi D f(\text{Re}, Sc) r \epsilon_0} \right] - 1 \right\} + Q u}. \quad (16)$$

Выражения (13) и (16) представляют собой зависимости фотоэмиссионного тока с частицы при ее соответственно отрицательном и положительном заряде. Получены эти зависимости при условии, соответствующем эксперименту $r \gg l$.

Выражение для фотоэмиссионного тока с нейтральной частицы можно получить из (13) или (16) как предельное значение при $Q \rightarrow 0$

$$I = \frac{4 D f(\text{Re}, Sc) (1 - \sigma) I_0}{r \bar{V}_k + 4 D f(\text{Re}, Sc)}. \quad (17)$$

На рис.1 представлены экспериментальные зависимости фотоэмиссионного изменения заряда ΔQ , Кл за время нахождения капли в зоне засветки от величины начального заряда Q_n , Кл для водных растворов красителей трифенилметанового ряда.

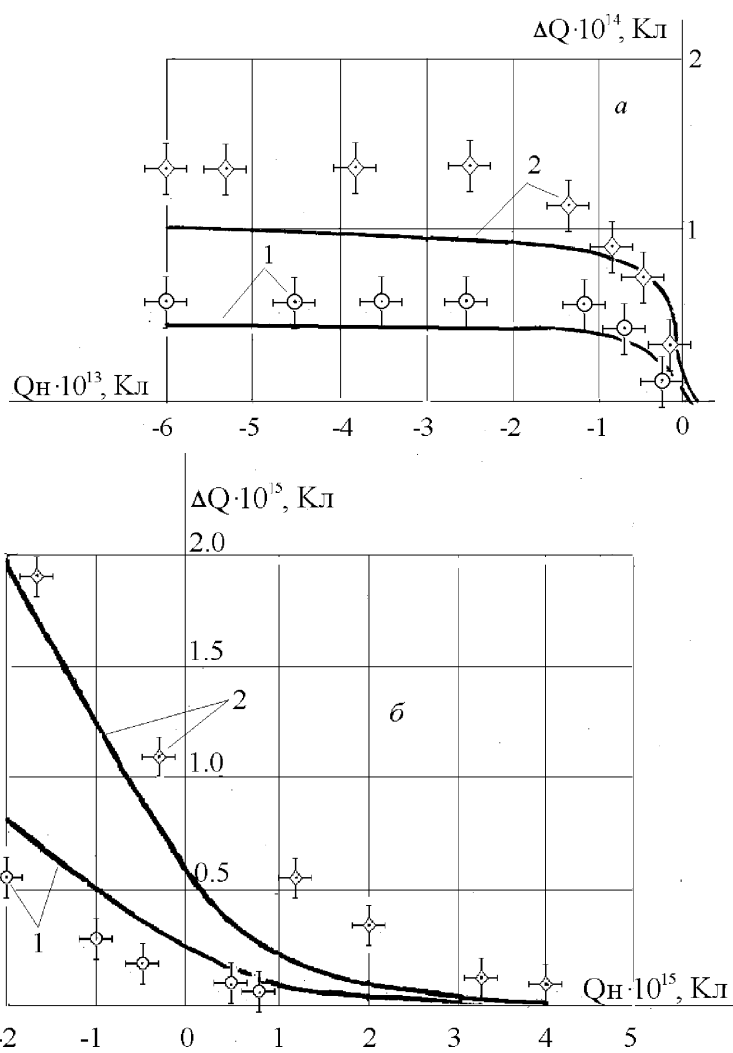


Рис.1. Экспериментальные зависимости фотоэмиссионного изменения заряда ΔQ от начального заряда Q_n на капле с $r = 140$ мкм: *a* — в области отрицательного заряда; *б* - в области положительного заряда для капель водных растворов красителей с массовой концентрацией 0.5%: 1 — \circ — эритрозин, 2 — \diamond — радомин бж. Сплошные кривые — соответствующие расчетные зависимости

1 — эритрозин; 2 — родамин бж с работой выхода соответственно равной 5,84 эВ и 5,63 эВ и квантовым выходом $3,38 \cdot 10^{-7}$ и $7,67 \cdot 10^{-7}$. Длина волны падающего излучения составляла 210 нм. Ширина полосы пропускания 10 нм. Радиус капли $r = 140$ мкм. Длина зоны засветок $2 \cdot 10^{-2}$ м, скорость седиментации капли в зоне засветки 1,1 м/с. Интенсивность падающего излучения $\Phi_0 = 1,05 \cdot 10^{20} \text{ с}^{-1} \text{ м}^{-2}$. Блок схема экспериментальной установки представлена в работе [12]. На этих же рисунках приведены соответствующие расчетные результаты, полученные с использованием выражений (13) и (16).

Общим для сравниваемых зависимостей является отставание расчетных результатов от данных эксперимента в области отрицательного заряда частицы. По-видимому, это можно объяснить условным выбором ширины кинетической зоны, который может внести систематическую ошибку в расчеты, а также тем, что имеет место некоторое несоответствие между расчетной схемой и условиями эксперимента. Оно состоит в том, что рассмотренная задача имеет сферическую симметрию, а в экспериментальной установке осциллирующие капли освещались потоком УФ-излучения с одной стороны.

Литература

1. Rosatzin M., Burtcher H. Improved aerosol-photoemission sensor for detection particulate emission from combustions // *Aerosol Sci.* 1988. V.19, N5, P.633-637.
2. Смирнов В.И. Скорость коагуляционного и конденсационного роста частиц аэрозолей // *Труды ЦАО.* 1969. Вып 92. С.8-105
3. Капцов Н.А. Электрические явления в газах и вакууме. М.-Л.: Гостехиздат, 1950. 833 с.
4. Кикоин И.К., Кикоин А.К. Молекулярная физика. М.: Физматгиз, 1963. 500 с.
5. Мак-Даниэль. Процессы столкновений в ионизированных газах. Пер. с англ. М.: Мир, 1967. 831 с.
6. Суслов А.В., Лялин Л.А., Позигун С.А. Определение коэффициента взаимодействия фотоэлектронов с газовой средой // *Актуальные вопросы физики аэродисперсных систем: Тез.докл. на XIV конф. 29 сентября — 2 октября 1986.* Одесса. 1986. Т 1. С.66.
7. Шимони К. Физическая электроника: Пер. с нем. М.: Энергия, 1977. 607 с.
8. Лялин Л.А. Фотоэмиссионная зарядка сферических осциллирующих аэрозольных частиц под воздействием ультрафиолетового излучения: Дис. на соиск. уч. ст. кандидата физ.-мат. наук. Одесса, 1994.
9. Лялин Л.А., Суслов А.В. Влияние газовой среды на фотоэмиссию электронов с аэрозольной частицы, несущей отрицательный заряд // *Труды Моск. энерг. ин-та.* 1987. № 149. С.115-121.
10. A.V.Suslov, L.A.Lyalin. Employing the boundary sphere method in modelling photoelectronic emission from a spherical aerosol particle surface // *J.aerosol Sci.* — 2000. — V.31. suppl..1. — P. 861-862.

11. Лялин Л.А., Суслов А.В. Фотоэмиссия жидких аэрозольных частиц // Труды Моск. энерг. ин-та. 1988. № 185. С.63-69.
12. Лялин Л.А., Суслов А.В. Фотоэмиссионная зарядка монодисперсных аэрозольных частиц при атмосферном давлении // Инженерно-физический журнал. 1991. Т.60. № 4. С. 603-610.
13. Фукс Н.А. Испарение и рост капель в газообразной среде. М.: АН СССР, 1958. 89 с.

Лялин Л. А.

Методи граничної сфери в теорії фотоемісійної зарядки сферичної седиментуючої аерозольної частинки

АНОТАЦІЯ

Подана модель процесу фотоемісійної зарядки сферичної седиментуючої аерозольної частинки, що припускає розділ повітряного простору, який оточує частинку на кінетичну і дифузійну зони. Одержано рішення рівняння фотоемісійної зарядки частинки в ділянці її позитивного та негативного заряду. Це рішення уявляє з себе залежність фотоемісійного струму частинки від величини її заряду. Проведено порівняння розрахункових та експериментальних результатів і отримано їх задовільна якісна відповідність.

L. A. Lyalin

Methods of boundary sphere in theory of photoemission charging of spherical sedimenting aerosol particle

SUMMARY

Boundary layer method of photoemission charging of a spherical sedimentating aerosol particle is presented which means division of air space surrounding the particle into kinetic and diffusion zones. Solution of the equation of particle photoemission charging in the field of its negative and positive charge is obtained. This solution presents dependence of photoemission current versus particle charge values. Calculated and experimental results are compared. Satisfactory agreement between them is obtained.

Ю. И. Бойко, Н. Х. Копыт

Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова

Связь кинематических условий движения и диссипации импульса трением в ползущих течениях

Через подходы подобия прослеживается связь кинематических и динамических представлений для ползущих течений.

Особенности развития динамического возмущения в среде зависят от механизма переноса импульса. Уже для установления максвелловской функции распределения по скоростям для молекул в газе известно выражение для коэффициента переноса — кинематической вязкости ν

$$\nu \sim c\lambda$$

показывает, что важны и структурные представления среды (здесь — длина свободного пробега молекул λ), и понятие характерной скорости процесса в ней (здесь — скорость теплового движения молекул c). В обобщенной форме это учитывается через число Предводителя Pd [1]

$$Pd \sim KnSr.$$

Роль числа Кнудсена $Kn = \lambda/L$, где L — характерный размер области макроперемещений среды, исследована достаточно подробно, при всей проблемности установления λ для жидкого и твердого состояния [2,3]. Что касается числа Струхала Sr , в этом аспекте используемого как число Маха M

$$Sr = V\tau/L \rightarrow M = V/a,$$

где V — скорость макроперемещений среды, $a = L/\tau$ — характерная скорость развития возмущений в ней (в газе $a \sim c$), определяемая через характерное время τ такого развития, то здесь зачастую ограничиваются качественными соображениями. Например, констатируется, что если $L/V = \tau \ll \tau$, т.е. $Sr \rightarrow \infty$, то жидкость ведет себя как твердое тело [2].

Рассмотрим другую асимптотику движений среды, когда $Sr \rightarrow 0$. Если она реализуется через $V \rightarrow 0$, а нестационарность задачи не значима, то это эквивалентно условию по числу Рейнольдса $Re = LV/\nu \rightarrow 0$ — режиму ползущих течений. Уравнение переноса импульса в этом случае обычно записывается как асимптотика Стокса [4]

$$-1/\rho \nabla p + \nu \nabla^2 v = 0 \quad (1)$$

стационарного уравнения Навье-Стокса

$$(\nu \nabla) v = -1/\rho \nabla p + \nu \nabla^2 v, \quad (2)$$

где ρ — плотность среды с полем скоростей v и давлений p . Такой подход согласуется с упомянутыми представлениями А.С. Предводителя [1], поскольку в его уравнении переноса импульса уравнение Навье-Стокса является асимптотикой $Pd \rightarrow 0$.

Решение уравнения (1) для внутренней задачи гидродинамики представимо в виде [5]

$$\zeta = \text{const}/Re . \quad (3)$$

Здесь $Re = wL/\nu$, $\zeta = 2Eu \equiv 2/Ru = (\Delta p L/l)/(\rho w^2/2)$.

Число Рейнольдса Re вводится через характерный размер поперечного сечения канала (области движения для внутренней задачи) L и осредненную установившуюся скорость движения в нем w . Осреднение выполняется по находящемуся полю скоростей в таком сечении (т.е. предполагается, что L , а стало быть и w , не зависят от продольного размера l). Коэффициент сопротивления ζ движению среды в канале вводится через отношение получающегося падения давления на безразмерном продольном масштабе L/l к скоростному напору такого потока, т.е. пропорционально числу Эйлера $Eu = \Delta p/\rho w^2$ (или, что то же, обратно пропорционально числу Руарка $Ru \equiv 1/Eu$).

Обычно построение решения (3) начинают с рассмотрения уравнения (2), приводя его к виду (1) дополнительным предположением о том, что линии тока параллельны оси канала, а следовательно, по крайней мере локально, и образующей поверхности, ограничивающей область движения. Такое кинематическое допущение, эквивалентное динамическому условию пренебрежения силами инерции, согласуется с тем, что граничные условия для уравнения движения несжимаемой жидкости являются кинематическими [6]. Более того, его математическая значимость такова, что на уровне конечных разностей, как масштабов переменных, уравнение (1) непосредственно сводится к выражению (3), записываемому через числа подобия, как соотношение этих масштабов

$$Ru = \text{const}Re \quad \text{или} \quad La \equiv Ru/Re = \text{const} . \quad (4)$$

Можно сказать, что на определенном уровне осреднения описания, уравнение (1), как частный случай уравнения движения, отражает ситуацию, когда кинематическая заданность движения подобием траекторий (поскольку задача стационарна, линии тока с ними совпадают) требует подобия сил, участвующих в процессе. Последнее как раз и выражается соотношением (4), по физическому смыслу используемых чисел подобия исключающему из представления процесса движения силы инерции и в динамике сводящему его к количественной пропорциональности возникающих сил трения приложенным силам давления. Таким образом, мы имеем дело с взаимной обусловленностью прямой и обратной задач механики — проявление “кинематической” автомодельности (локальнопоступательного типа кинематики движе-

ния, ведущего к уменьшению числа координат в описании) связано с “динамической” автомодельностью (уменьшением числа сил в описании процесса) движения.

Чтобы непосредственно работать с кинематическим представлением рассматриваемой задачи, применим оператор вихря к уравнению (1), что приведет его к виду

$$\nabla^2 [\nabla v] = 0. \quad (5)$$

Существенно, что в области выполнения уравнения (5) уравнения движения вязкой несжимаемой жидкости Навье-Стокса и идеальной несжимаемой жидкости Эйлера совпадают

$$[\nabla[v[\nabla v]]] = 0. \quad (6)$$

Более того, такая задача определения поля скоростей аналогична задачам об описании сильного прогиба равномерно нагруженной плоской мембраны и определения деформации кручения стержня [3]. Что касается последней, то она, как и один из видов движения идеальной жидкости, кинематически относится к винтовому движению, когда $v \parallel [\nabla v]$. Это один из типов траекторноподобных движений, приводящий уравнение (6) к тождеству. Задача же о деформации мембраны, при сведении ее к решению уравнения Лапласа, как и рассматриваемая внутренняя задача гидродинамики, кинематически отражают такой тип траекторноподобного движения, как поступательное, условием $[\nabla v] = 0$ удовлетворяющее тождественно не только (6), но и (5), объединяя в этом смысле уравнение неразрывности и уравнение переноса импульса. Заметим, что динамическим условием сведения задачи о перемещениях двумерной поверхности (мембраны) к решению уравнения Лапласа будет сохранение отношения силы, приложенной к единице поверхности, к силе, отнесенной к единице длины ее края. Поэтому, если первую силу понимать как равномерно движущую одну часть тела по другой (уравновешиваемую силой трения F), а вторую — как реакцию поверхности, по которой происходит это поступательное движение (уравновешиваемую силой нормального давления N), то задачу о сильном изгибе мембраны можно толковать как модель элементарного процесса, система которых описывается законом сухого трения (Амонтона) [7]

$$F = fN,$$

где $f = \text{const}$, как коэффициент сухого трения, и обеспечивает сохранение упомянутого отношения. Трактовка закона Амонтона через деформацию системы микронеоднородностей предложена и в [7], однако там механизм деформации элементарной неоднородности полагается другим.

Решения (3), (4) также можно рассматривать как описывающие элементарный процесс, система которых представляет явление фильтрационного движения жидкости через пористую среду, выражаемое через закон Дарси [5]

$$v_m = (k_\phi / \mu)(\Delta p / l),$$

где v_m — средняя линейная скорость движения жидкости, $\mu = \nu\rho$ — ее динамическая вязкость, k_ϕ — проницаемость пористой среды. Этот закон по существу представляет опытный результат пространственного осреднения движений вязкой жидкости по случайно ориентированным и разнообразным по геометрической форме порам фильтрующей среды.

И закон Дарси и закон Амонтона тесно связаны с кинематикой поступательного движения в элементарных процессах, которые они обобщают, позволяющей включать в механику движения силы вязкости как трение скольжения. Такой вид поверхностных сил диссипативного характера, возникающий при относительном движении соприкасающихся тел, как раз и отличается тем, что силы трения скольжения направлены по касательным к соприкасающимся поверхностям, тогда как их силы реакции перпендикулярны к ним. Соответственно и описание этого фактора достаточно простое — поле скорости вообще не зависит от характеристики вязкости, а в соотношении сил она отражается безразмерным постоянным коэффициентом. Такое рассмотрение позволяет считать осцилляцию (во времени t) массы m по прямой координате x с трением [8]

$$m \, d^2x/dt^2 = R = R_1 + R_2 = -kx - \alpha \, dx/dt$$

механическим аналогом поступательного движения в сплошной среде, когда асимптотике $Sr \rightarrow \infty$ отвечает закон Гука ($R=R_1=-kx$, k — множитель, отражающий линейную связь между тензором напряжений и тензором деформаций) — среда по отношению к возмущениям ведет себя как твердое тело, а асимптотике $Sr \rightarrow 0$ — закон Стокса ($R=R_2=-\alpha \, dx/dt$, α — множитель, отражающий линейную связь между тензором напряжений и тензором скорости деформаций), как достаточно общий закон для медленных движений, сопровождающихся диссипативными процессами [9].

С другой стороны, даже рассмотрение элементарного процесса может потребовать использования такой кинематики течения, которая не совместима с приближением Стокса. Скажем, оно остается возможным и для внешней задачи гидродинамики при рассмотрении обтекания шара, однако не позволяет удовлетворять граничным условиям при поперечном обтекании цилиндра, при том, что, вообще говоря, осесимметричная задача гидродинамики более сложна, нежели плоская [10]. В известной мере это связано с также весьма общей проблемой сопоставления и устойчивости течений для внешней и внутренней задач гидродинамики. То, что возмущающее влияние цилиндра на обтекающую среду значимее, чем у шара, можно подтвердить рядом качественных результатов, в том числе и выходящих за пределы режимов ползущих течений. Так, при ускоренном движении цилиндра в идеальной жидкости его присоединенная масса (являющаяся мерой сил инерции) в два раза превосходит соответствующую характеристику для шара [11], скорость на поверхности в миделевом сечении в два раза превосходит скорость невозмущенного потока, тогда как для шара — в 1,5 раза [5]; форми-

рование пограничного слоя при поперечном обтекании цилиндра также происходит быстрее [12] (турбулизация погранслоя на шаре начинается при меньших числах Re , нежели для поперечного обтекания цилиндра [5], однако эта ситуация уже выходит за пределы гидродинамического осреднения). Поэтому общая для внешней задачи проблема совместного удовлетворения граничных условий на границе области генерации динамического возмущения (на поверхности обтекаемого тела) и на бесконечном удалении от нее для цилиндра является более сложной. Указанный эффект нельзя свести лишь к тому, что задача поперечного обтекания цилиндра рассматривается для его бесконечной протяженности, т.е. как плоская [5], хотя именно это не позволяет рассчитывать силу сопротивления в приближении Стокса. Более детально проблема построения соответствующего решения обусловлена, видимо, тем, что цилиндрическая поверхность имеет качественно различные радиус кривизны и радиус кручения (у сферической они одинаковы) [13], поскольку первый — величина конечная, а второй равен бесконечности. Постановка вариационной задачи для такой поверхности (равно как и для упомянутой выше задачи об изгибе мембраны) с учетом характера действующих поверхностных сил требует привлечения представлений молекулярной динамики, что выходит за рамки данного рассмотрения. Отметим лишь, к уже сказанному, что для свободной цилиндрической поверхности дополнительное давление, вызванное кривизной, вдвое меньше, нежели для сферической [14], т.е. она менее устойчива. Открыть кинематическую возможность развития течения в направлении смены типов устойчивости можно, введя зависимость радиуса кривизны от азимутального угла, т.е. используя в качестве адекватной координатной системы обобщенные цилиндрические координаты. Их базис не является ортогональным [13], что в динамическом аспекте описания позволяет естественным образом ввести такое относительное движение соприкасающихся поверхностей — качение, когда направление силы реакции не обязательно нормально к соприкасающимся поверхностям. Кинематически это соответствует появлению у скорости “частицы” жидкой поверхности, помимо поступательной, еще и вращательной составляющей, что динамически эквивалентно появлению сил инерции. Тем самым автомодельность движения по типу (4), связанная с уравнением (1), нарушается, для описания движения требуется более полное уравнение (2). Поскольку набор определяющих параметров для (2) расширяется — ρ и μ уже должны в него входить раздельно, а не в виде комплекса ν , то это решает проблему построения силы сопротивления и для поперечного обтекания цилиндра. Правда, закон ее пропорциональности невозмущенной (т.е. однородной и поступательной) скорости натекания v_∞ , о пределах общности которого говорилось выше, нарушается. Это проявилось уже в первой результативной попытке нахождения решения уравнения (2) с линеаризованным конвективным членом, т.е. при замене оператора $(v \nabla)$ на $(v_\infty \nabla)$. В этом, так называемом осевом приближении, изменение выражения для силы сопротивления $F_{\text{ш}}$

шара радиуса r обтекающей среде выглядит естественным уточнением ее разложения по числу Re , как по малому параметру — вслед за линейным, появляется квадратичный член [15]

$$F_{\text{ш}} = 6\pi\mu r v_{\infty} \left(1 + \frac{3}{8} \frac{r v_{\infty}}{\nu} \right) \quad (7)$$

Соответствующее приближение для силы сопротивления единицы длины $F_{\text{ц}}$ поперечно обтекаемого цилиндра радиуса r

$$F_{\text{ц}} = \frac{4\pi\mu v_{\infty}}{\frac{1}{2} - C - \ln\left(\frac{r v_{\infty}}{4\nu}\right)},$$

где $C \approx 0,577$ — постоянная Эйлера [4].

Оно качественно отличается от (7) наличием точки перегиба при

$$Re_{\text{кр}} = r v_{\infty} / \nu = 4 \exp(1/2 - C + 2) \cong 27$$

По изложенному выше, это можно истолковать как признак качественного изменения кинематики течения вокруг тела — появление присоединенного вихревого следа. Опыт подтверждает появление такой зоны существенности инерционных сил, причем, действительно, для поперечно обтекаемого цилиндра гораздо раньше, чем для шара [16]. То же, что теоретически смена режимов обтекания должна затягиваться в область примерно на порядок больших чисел Re , нежели дает опыт, связано и с особенностями постановки эксперимента (к примеру, для внутренней задачи общепринятым является $Re_{\text{кр}} \sim 10^3$, однако при специальных условиях смену режимов можно затянуть до $Re_{\text{кр}} \sim 25 \cdot 10^3$) и с известными недостатками самого осееновского приближения [15].

Наконец заметим, что и переход в описании к уравнению (2) сохраняет возможность автомодельных упрощений. Дело в том, что при реализации относительного движения соприкасающихся поверхностей по типу качения соответствующая связь для обтекания цилиндра будет голономной [8], т.е. уменьшающей число независимых координат в описании движения.

Литература

1. Бойко Ю.И., Копыт Н.Х. О структурировании среды и переносе импульса столкновениями в представлениях подобия // Тезисы докладов 19-ой конференции стран СНГ “Дисперсные системы”. Одесса, 2000, С.32.
2. Фишер Й.З. Статистическая теория жидкостей. М.: Физматгиз, 1961. 192с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика сплошных сред. М.: ГИТТЛ, 1954. 795 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 736 с.

5. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1970. 904 с.
6. Гухман А.А. Введение в теорию подобия. М.: Высшая школа, 1973. 296 с.
7. Ландау Л.Д., Ахиезер А.И., Лифшиц Е.М. Курс общей физики. Механика и молекулярная физика. М.: Наука, 1969. 400с.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: Наука, 1988. 216с.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука, 1964. 568 с.
10. Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Проблемы гидродинамики и их математические модели. М.: Наука, 1977. 408 с.
11. Седов Л.И. Механика сплошной среды, т.2. М.: Наука, 1970. 568 с.
12. Лойцянский Л.Г. Ламинарный пограничный слой. М.: Физматгиз, 1962. 480 с.
13. Борисенко А.И., Тарапов И.Е. Векторный анализ и начала тензорного исчисления. М.: Высшая школа, 1963. 262 с.
14. Кикоин И.К., Кикоин А.К. Молекулярная физика. М.: Физматгиз, 1963. 500 с.
15. Волощук В.М., Седунов Ю.С. Процессы коагуляции в дисперсных системах. Л.: Гидрометеиздат, 1975. 320 с.
16. Волощук В.М. Введение в гидродинамику грубодисперсных аэрозолей. Л.: Гидрометеиздат, 1971. 208 с.

Ю. І. Бойко, М. Х. Копит

**Зв'язок кінематичних умов руху і дисипації імпульсу тертям
в повзучих течіях**

АНОТАЦІЯ

Через підходи подібності відслідковується зв'язок кінематичних і динамічних уявлень для повзучих течій.

Boiko Yu. I., Kopyt N. Kh.

**Connection of kinematics conditions of movement and dissipation
of a momentum by friction in creeping flows**

SUMMARY

The connection of kinematics and dynamic representations for creeping flows has been considered by scaling law approach.

Л. А. Обвинцева

*Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л. Я. Карпова,
Москва*

**Определение эффективных коэффициентов
взаимодействия молекул и атомов хлора
с полупроводниковыми оксидами металлов
методом электропроводности**

Рассмотрены возможности метода электропроводности для определения эффективных коэффициентов взаимодействия химически активных молекул и атомов хлора с оксидами металлов на примере модельной поверхности ZnO.

Определены коэффициенты прилипания для заряженной формы адсорбции атомов и молекул хлора на поверхности ZnO при концентрациях атомов и молекул хлора в газовой фазе, сопоставимых с атмосферными. Установлены факторы, определяющие величину указанных коэффициентов: заполнение, время измерения и концентрация адсорбирующихся частиц.

Введение

Реакции атомов и молекул хлора в атмосфере вызывают большой интерес в связи с проблемой разрушения стратосферного озона [1-6, 9, 10]. Константа скорости взаимодействия атома хлора с озоном в газовой фазе имеет одно из самых больших значений среди присутствующих в атмосфере радикалов. Вопрос о роли гетерогенных стадий в хлорном цикле атмосферы Земли относится к малоизученным. Их роль может быть различной: гетерогенный обрыв цепей в хлорном цикле, канал стока молекул и атомов хлора из атмосферы, резервуар для фотохимических гетерогенных и гетерогенно — гомогенных реакций с другими частицами.

Серьезным основанием к всестороннему изучению гетерогенных процессов в атмосфере с участием соединений хлора послужило установление антикорреляционной зависимости между концентрациями озона и монооксида хлора в районе озоновой дыры над Антарктидой [5, 1-3]. Одна из возможных и наиболее принятых в настоящее время гипотез состоит в том, что образование активного в отношении разрушения озонового слоя хлора происходит на поверхности полярных стратосферных облаков [1-6]. Наряду с частичками льда и воды в состав атмосферного аэрозоля входят различные твердые частицы природного и антропогенного происхождения соли, оксиды и др. [7]. Для количественной оценки эффективности взаимодействия малых

газовых составляющих атмосферы с поверхностью твердых аэрозольных частиц вводят разного рода эффективные коэффициенты взаимодействия, в зависимости от характера изучаемого процесса и методов измерения: захвата, аккомодации, прилипания и др. В условиях разреженной атмосферы при низких концентрациях газовых составляющих важную роль могут играть элементарные стадии их взаимодействия с твердыми аэрозольными частицами. Начальной стадией всех гетерогенных реакций является адсорбция. В определенных условиях она бывает лимитирующей и определяющей стадией дальнейшего гетерогенного процесса. Количественной характеристикой скорости адсорбции служит коэффициент прилипания.

Наибольшее значения концентрация молекул хлора в нижней тропосфере достигает в морских регионах: 10^9 — 10^{10} см⁻³ в утренние часы [2]. В стратосфере концентрации молекул и атомов хлора оцениваются значительно ниже: 10^7 — 10^8 см⁻³ и 10^3 — 10^4 см⁻³, соответственно [3]. Исследования при таких низких концентрациях — сложная задача в силу недостаточной чувствительности большинства экспериментальных методов, а экстраполяция данных, полученных для больших концентраций в область малых, в свою очередь, неоднозначна. Чувствительностью, достаточной для изучения систем, состоящих из такого количества частиц, обладает метод электропроводности [8]. Метод электропроводности широко используется в физико-химических исследованиях и в газовом анализе [8-14].

В данном сообщении мы хотели показать возможности метода электропроводности для определения количественных характеристик взаимодействия малых газовых составляющих атмосферы — атомов и молекул хлора с поверхностью твердых сорбентов на примере оксида цинка.

Метод электропроводности

В основе метода лежит изменение электропроводности полупроводниковых оксидов металлов при адсорбции на них частиц газовой фазы [8]. Метод позволяет по изменению электропроводности полупроводниковых сорбентов судить о концентрации, природе адсорбирующихся частиц и механизмах взаимодействия.

Возможности и достоинства метода:

- позволяет проводить измерения в режиме *in situ*,
- характеризуется высоким быстродействием — миллисекунды,
- обладает высокой чувствительностью: 10^3 см⁻³ — для атомарных, 10^7 см⁻³ — для молекулярных частиц.
- размеры гранул поликристаллических образцов, имитирующих твердый атмосферный аэрозоль могут быть подобраны в соответствии с размерами аэрозольных частиц в атмосфере:– нано — и микрометры,
- малые размеры полупроводниковых датчиков — миллиметры,
- доступные стандартные методы измерения и обработки информации.

Поскольку метод электропроводности позволяет напрямую определять характеристики заряженной формы адсорбции, наиболее информативным он представляется для изучения адсорбции химически активных частиц, какими являются молекулы и атомы хлора. Большое сродство к электрону молекул и атомов хлора 1,7 и 3,6 эв, соответственно, позволяет рассматривать заряженную форму хемосорбированного хлора как основную.

Методическая часть

Особенностью данной экспериментальной работы является использование различных способов получения и посадки атомов и молекул хлора: адсорбция молекулярного хлора из объема, из эффузионного молекулярного пучка, атомы хлора в отсутствие (фотолиз AgCl) и в присутствии (пиролиз Cl₂) молекул хлора в газовой фазе. Это позволило охватить широкий диапазон концентраций адсорбирующихся частиц — 12 порядков.

Методика подготовки и проведения экспериментов описана в работах [11-14]. Здесь в виде сводной таблицы приведены условия проведения экспериментов.

Таблица 1

Условия проведения опытов по исследованию хемосорбции молекул и атомов хлора на пленках ZnO. Температура образцов ZnO — 25°C

Частица	Способ получения и посадки	Масштаб времени измерения начальной кинетики	Концентрация, см ⁻³
Cl ₂	адсорбция Cl ₂ из объема	10 ⁻² сек	10 ¹² - 10 ¹⁵
Cl ₂	адсорбция Cl ₂ из объема	Секунды	10 ¹² - 10 ¹⁴
Cl ₂	адсорбция Cl ₂ из молекулярного пучка	Секунды	10 ⁸ - 10 ⁹
Cl – атомы	Эмиссия в газовую фазу при фотолизе AgCl, [13]	Секунды	10 ³ - 10 ⁶
Cl – атомы	Пиролиз Cl ₂ , при давлении P _{Cl₂} = 10 ⁻³ - 10 ⁻⁴ торр [13]	Секунды	10 ⁵ - 10 ¹⁰

Особенности работы с хлором включают в себя учет поглощения на стенках установки, использование кранов в антикоррозионном исполнении, использование ловушек перед насосами для вымораживания хлора. Опыты проводили в вакуумной камере, совмещенной с масс — спектрометром, по периметру которой были расположены исследуемые образцы или в стеклянных реакционных сосудах различных конструкций. Использовали безмасляные и безртутные средства откачки.

Для изучения начальных стадий взаимодействия, неосложненных обратными процессами, было важно проводить измерения в кинетическом режиме. С этой целью были приняты следующие меры:

- К минимуму сведено время заполнения реакционной ячейки молеку-

лярным хлором. Для этого вместо кранов использовали стеклянные мембраны с остеклованными металлическими разбивалками и варьировали объемы реакционной ячейки и системы напуска. При соотношении указанных объемов $\leq 0,05$ время установления давления в ячейке по данным осциллограммы составляло не более $5 \cdot 10^{-2}$ сек.

- Использование свободномолекулярных и атомарных потоков. Транспортное время молекулярного пучка составляет 10^{-4} сек. Еще меньше время пролета атомов хлора от источника AgCl до образца ZnO.

Модельная поверхность

Выбор ZnO в качестве объекта исследования обусловлен тем, что он хорошо изучен в отношении адсорбции многих молекулярных и радикальных частиц [8], хорошо известны его физико-химические свойства, он широко используется как модельная система в теоретических работах, посвященных адсорбции и гетерогенному катализу [8]. Присутствие оксида цинка в атмосфере, наряду с другими оксидами металлов [1,4,7], возможно позволит использовать его как удобную модельную систему и для исследования атмосферных взаимодействий.

Определяемый параметр

Количественная связь между величиной изменения электропроводности при адсорбции и изменением числа носителей заряда, а также интенсивностью потока адсорбирующихся частиц, подробно проанализированы в [8].

Между начальной скоростью изменения электропроводности пленки ($d\sigma / dt$) и интенсивностью потока адсорбирующихся частиц имеет место зависимость:

$$d\sigma / dt = I \gamma e \mu / l^2 (1 - \theta), \quad (1)$$

где I — интенсивность падающего потока частиц, e — заряд электрона — $1.6 \cdot 10^{-19}$ к, μ — подвижность носителей заряда, равная 10 в/см*сек для ZnO, l — расстояние между электродами, равное $0,3$ см, θ — степень заполнения поверхности, γ — коэффициент прилипания для заряженной формы адсорбции. Под коэффициентом прилипания для заряженной формы адсорбции (γ) будем понимать долю частиц из падающего потока, адсорбирующихся в заряженной форме.

Результаты и их обсуждение

В области умеренных температур при адсорбции на чистой поверхности ZnO молекулы и атомы хлора ведут себя как акцепторы электронов: уменьшают электропроводность ZnO — полупроводника n-типа. На рис. 1-3 приведены кинетические кривые изменения электропроводности ZnO в абсолютных единицах изменения электропроводности ($\Delta\sigma$). Рассмотрим особенности наблюдаемой кинетики.

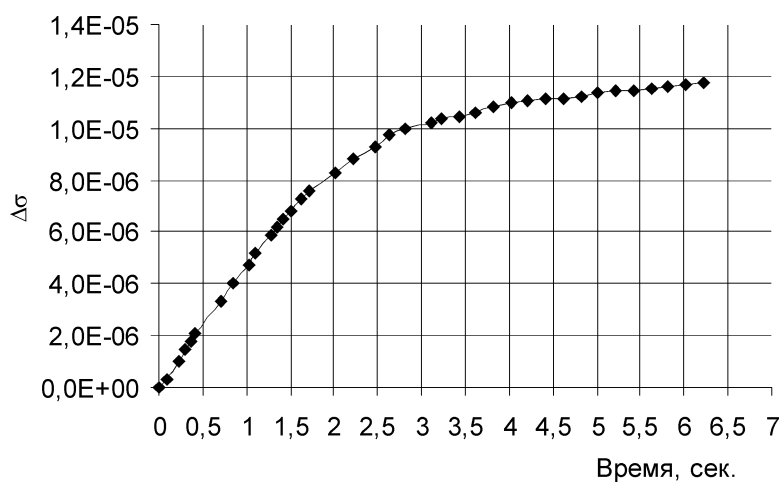


Рис. 1. Кинетика изменения электропроводности ZnO при адсорбции молекул хлора из объема. Температура ZnO: 25°C. Интенсивность потока $5 \cdot 10^{17}$ $\text{см}^{-2}\text{сек}^{-1}$

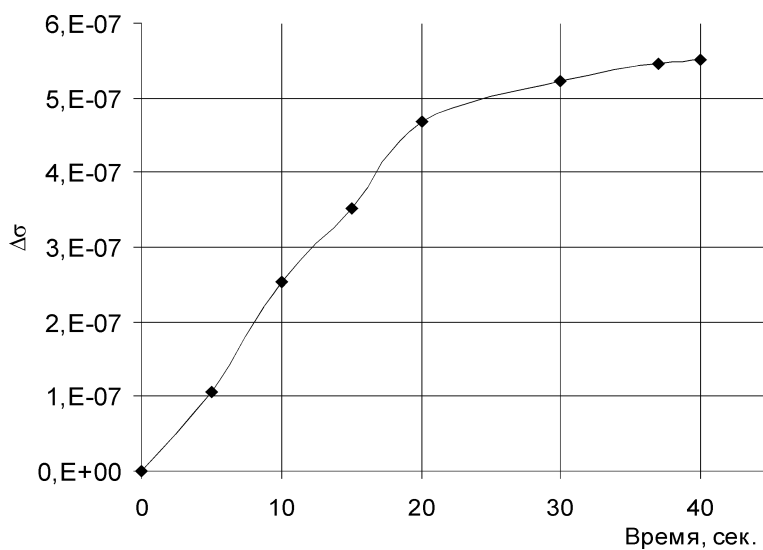


Рис.2. Кинетика изменения электропроводности ZnO при адсорбции хлора из молекулярного пучка. Температура ZnO: 25°C. Интенсивность потока 10^{14} $\text{см}^{-2}\text{сек}^{-1}$

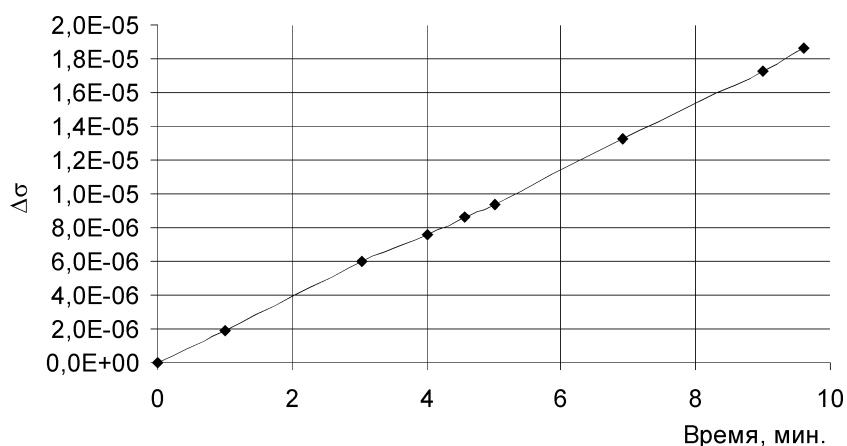


Рис. 3. Кинетика изменения электропроводности при адсорбции атомов хлора на ZnO. Интенсивность потока атомов хлора $5 \cdot 10^9 - 10^{10} \text{ см}^{-2} \cdot \text{сек}^{-1}$. Температура ZnO: 25°C

Адсорбции атомов и молекул хлора на ZnO характеризуется высокой скоростью и большой величиной изменения электропроводности пленок ZnO. Кинетические кривые носят монотонный характер. На всех кинетических кривых имеет место начальный линейный участок изменения электропроводности. Длительность линейного участка возрастает при уменьшении интенсивности потока адсорбирующихся частиц и составляет доли секунды или секунды при адсорбции молекул хлора из объема ($10^{16} - 10^{19} \text{ см}^2$, рис.1), десятки секунд при адсорбции из молекулярного пучка ($10^{12} - 10^{13} \text{ см}^2$, рис.2) и десятки минут при адсорбции атомов хлора ($10^7 - 10^9 \text{ см}^2$, рис.3). Наклон линейного участка зависит от времени измерения: увеличивается при уменьшении масштаба времени измерения, рис.1, таблица 2.

Из измерений начальной скорости изменения электропроводности ($d\sigma/dt$) образцов ZnO были определены значения коэффициентов прилипания для заряженной формы адсорбции (γ) молекул и атомов хлора на ZnO по формуле (2). Значения (γ) приведены в таблице 2. Линейные участки на кинетических кривых свидетельствуют о постоянстве указанного коэффициента для соответствующего интервала заполнения поверхности.

Из анализа рис. 1 — 3 и данных таблицы 2 сделаны следующие выводы и предположения: При адсорбции атомов хлора на ZnO величина γ имеет близкое к максимальному значению: $0,5 - 1$. При этом величина γ в широком диапазоне заполнения мало зависит от степени заполнения поверхности (изменяется на два порядка).

Таблица 2

Значения величины γ и длительность начальных линейных участков кинетической кривой при разных условиях проведения эксперимента

Частица	Масштаб времени измерения начальной кинетики	Концентрация, см ⁻³	Длительность наблюдаемого линейного сигнала	Состояние поверхности	γ
Cl ₂	10 ⁻² сек	10 ¹²	3 секунды	Чистая	3*10⁻⁶
Cl ₂	10 ⁻² сек	10 ¹³	0.6 секунды	Чистая	3*10⁻⁶
Cl ₂ – пучок	Секунды, ≥ 1 сек..	10 ⁸ – 10 ⁹	20 сек.	Чистая	5*10⁻⁴
Cl – атомы	Секунды, ≥ 1 сек.	10 ³ – 10 ⁵	Десятки минут	Чистая	0,5 - 1
Cl – атомы	Секунды, ≥ 1 сек.	10 ⁵ – 10 ⁸	Секунды	Покрытая хлором	5*10⁻²

- Напротив, в случае адсорбции молекул хлора величина γ существенно зависит от степени заполнения поверхности (10 порядков). Низкие начальные заполнения поверхности могут быть получены уменьшением интенсивности адсорбирующегося потока частиц и уменьшением времени измерения. При уменьшении заполнения величина γ стремится к своему максимальному значению, возможно, близкому к единице.

- По-видимому в пределе, при низких концентрациях в газовой фазе, адсорбция атомов хлора и адсорбция молекул хлора по начальному сигналу изменения электропроводности могут оказаться практически неразличимы.

Представленные экспериментальные результаты демонстрируют очевидный из общих соображений факт, что коэффициент прилипания является наблюдаемой величиной, определяемой условиями эксперимента или (и) возможностями измерения.

Эксперименты по хемосорбции атомов и молекул хлора на чистой поверхности оксидов металлов показали, что можно выделить области, соответствующие различным интенсивностям потоков адсорбирующихся частиц, которые характеризуются своими закономерностями адсорбции. Это приводит к существенно различным наблюдаемым количественным характеристикам взаимодействия. Классифицируем эти области с точки зрения представлений об индивидуальной и коллективной адсорбции. Это-область индивидуальной адсорбции, наблюдаемая при адсорбции потоков атомов хлора малой интенсивности ($I_{Cl} - 10^7 - 10^9$ см⁻²), область коллективной адсорбции, наблюдаемая при адсорбции молекул хлора из объема ($I_{Cl_2} - 10^{16} - 10^{18-19}$ см⁻²), промежуточная область — при адсорбции молекул хлора из пучка ($I_{Cl_2} - 10^{12} - 10^{11}$ см⁻²).

Выводы

- Закономерности хемосорбции атомов и молекул хлора различны для различных областей концентраций. Это сильно затрудняет экстраполяцию данных, полученных при определенных условиях.

- Для количественных оценок взаимодействия молекул и атомов хлора с поверхностью твердых сорбентов перспективным представляется метод электропроводности.

- Низкие концентрации атомов и молекул хлора в атмосфере могут рассматриваться как фактор, способствующий их адсорбции на гетерогенных примесях с высокими эффективными коэффициентами взаимодействия.

В прикладном плане данное исследование направлено на разработку полупроводниковых сенсоров атомов и молекул хлора в различных средах [9,10,14].

Работа финансируется МНТЦ — грант № 521.

Литература

1. Дж.Андруз, П.Бримблекумб и др. Введение в химию окружающей среды. Мир, 1999.
2. Гершензон Ю.М., Ермаков А.Н., Пурмаль А.П. Химические реакции свободных радикалов с атмосферными аэрозолями // Химическая физика. 2000. Т.19. №3. С. 3–16.
3. Sanders R.W., Solomon S., et al. // Geophys. Res..1993. V.98. N. D4. P. 7219–7228.
4. Л.С. Ивлев. Гетерогенная химия нижней атмосферы // Физика и химия атмосферных аэрозолей. Вып. 20. 1997. С. 54–80.
5. Ш. Роун. Озоновый кризис. Пятнадцатилетняя эволюция неожиданной глобальной опасности. М.: Мир, 1993. С. 320.
6. Гершензон Ю.М., Звенигородский С.Г., Розенштейн В.Б. Успехи химии. 1990. Т.59. №10. С.1601-1626.
7. Янике Р. // Проблемы распространения глобального аэрозоля // Успехи химии. 1990. Т59. С. 1654 — 1675.
8. Мясников И.А., Сухарев В.Я., Куприянов Л.Ю., Завьялов С.А. Полупроводниковые сенсоры в физико — химических исследованиях. М.: Наука. 1991, с.327.
9. Тимашев С.Ф., Перов С.П., Гутман Э.Е. Проблемы физикохимии озонового слоя Земли. // Журн. Физической химии. 1994. Т. 68.№8. С. 1360 — 1372.
10. Gutman E.E., Perov S.P., Timashev S.F. Biosphere dynamics and chemical sensors. Sensors and Actuators, B 24-25. 1995. 162 — 165; B 23. 1995. 209 — 214.
11. Обвинцева Л.А., Гутман Э.Е., Бакши Ю.М. Хемосорбция молекул и атомов хлора на полупроводниковых оксидах металлов // Труды Международной аэрозольной конференции, посвященной памяти профессора А.Г.Сутугина. Москва. Июнь 2000 г. с.103–119.

12. Обвинцева Л.А., Гутман Э.Е., Бакши Ю.М., Мясников И.А., Гельбштейн А.И. Исследование взаимодействия молекулярного хлора с полупроводниковыми оксидами металлов методом электропроводности // Журн. физ. химии, 1984, т.58, №3, с. 683-687.
13. Обвинцева Л.А., Гутман Э.Е., Бакши Ю.М., Гельбштейн А.И. Влияние хемосорбции атомов хлора на электропроводность полупроводниковых оксидов металлов // Журн. физ. химии, 1988, т.62, №1, с. 105-111; 1988, т.62, №3, с. 685-688.
14. Обвинцева Л.А., Гутман Э.Е., Губанова Д.П. Применение полупроводникового метода для исследования фотохимических реакций с участием хлора и его кислородных соединений // Оптика атмосферы и океана, 11, № 1 (1998).

Л. А. Обвинцева

Визначення ефективних коефіцієнтів взаємодії молекул і атомів хлору з напівпровідниковими оксидами металів за методом електропроводності

АНОТАЦІЯ

Розглянуто можливості методу електропроводності для визначення ефективних коефіцієнтів взаємодії хімічно активних молекул і атомів хлору з оксидами металів на прикладі модельної поверхні ZnO. Визначено коефіцієнти присипання для зарядженої форми адсорбції атомів і молекул на поверхні ZnO при концентраціях атомів і молекул хлору в газовій фазі, які можна зіставити з атмосферними. Встановлено фактори, які визначають величину вказаних коефіцієнтів: заповнення, час вимірювання та концентрація частинок, що адсорбуються.

Obvintseva L. A.

Effective coefficients determination for molecular and atomic chlorine interaction with metal oxides by electro conductivity method

SUMMARY

Electro conductivity method possibilities have been considered with the purpose of effective coefficients determination for molecular and atomic chlorine interaction with metal oxides (ZnO as an example). Adhesion coefficients have been determined in case of charged kind of adsorption and gaseous chlorine concentration comparable with the atmospheric one. It has been established that adhesion coefficients depended mainly upon adsorbing particles concentration, measurement time and surface filling.

С. Г. Орловская¹, В. В. Калинчак¹, А. И. Калинчак²

¹ *Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова*

² *Одесская государственная Академия Холода*

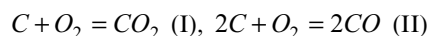
Высокотемпературный тепломассообмен в аэровзвеси частиц

Вскрыты особенности влияния массовой и численной концентраций частиц на время перехода в высокотемпературное состояние. Найдены значения численной концентрации, определяющие устойчивые гистерезисные и критические режимы существования высоко- и низкотемпературных состояний аэровзвесей частиц заданного диаметра.

Разработка энерго- и ресурсосберегающих технологий по применению аэрозольного катализа для переработки вредных продуктов, эффективное сжигание диспергированного твердого топлива в энергетических установках, а также получение оксидов в результате горения газозвеси металлов являются актуальными задачами современности. Решение этих задач непосредственно связано с анализом условий, определяющих устойчивые высокотемпературные режимы тепломассообмена в аэровзвеси частиц в зависимости от их размера и концентрации.

В настоящее время в качестве главного параметра, характеризующего газозвесь, используется массовая концентрация частиц и для случая сжигания диспергированного твердого топлива — коэффициент избытка воздуха [1,2]. Вопрос о влиянии размера частиц при постоянной численной концентрации и численной концентрации при постоянном размере частиц на характеристики высокотемпературного тепломассообмена практически не изучен.

В данной работе изучаются процессы зажигания и потухания, которые определяются диаметром и численной концентрацией частиц в монодисперсной аэровзвеси с учетом теплообмена излучением со стенками реакционной установки. Анализируется влияние массовой концентрации, которая изменяется как за счет размера так и численной концентрации частиц, на период индукции — время выхода на высокотемпературный режим. В качестве объекта исследований взята монодисперсная аэровзесь углеродных частиц, на поверхности которых протекают параллельные химические реакции



Кинетика этих реакций по кислороду описывается законами

$$(W_{O_2})_1 = k_1 \rho_{g,s} C_{O_2,s}, \quad (W_{O_2})_2 = k_2 \rho_{g,s} C_{O_2,s}, \quad (1)$$

$$k_1 = k_{01} \exp(-E_1/(RT)), \quad k_2 = k_{02} \exp(-E_2/(RT)). \quad (2)$$

Скорость химического превращения углерода связана с $(W_{O_2})_1$ и $(W_{O_2})_2$

$$W_C = \frac{M_C}{M_{O_2}} [(W_{O_2})_1 + 2(W_{O_2})_2]. \quad (3)$$

С учетом (1), (3) уравнение для зависимости диаметра углеродной частицы от времени имеет вид

$$-\frac{1}{2} \rho_c \frac{\partial d}{\partial t} = \rho_{g,s} C_{O_2,s} \frac{M_C}{M_{O_2}} (k_1 + 2k_2). \quad (4)$$

В (1)–(4) $(W_{O_2})_1, (W_{O_2})_2$ — скорости химических реакций (I) и (II) по кислороду, кг/м² с; k_1, k_2 — константы скоростей химических реакций, м/с; k_{01}, k_{02} — предэкспоненциальные множители, м/с; E_1, E_2 — энергии активации, Дж/моль; R — универсальная газовая постоянная, Дж/(мольК); $\rho_{g,s}$ — плотность воздуха при температуре частицы, кг/м³; $C_{O_2,s}$ — относительная массовая концентрация кислорода на поверхности частицы; M_C, M_{O_2} — молярные массы углерода и кислорода, кг/моль; ρ_p — плотность частицы, кг/м³; T, d — температура и диаметр частицы, К, м; t — время, с.

Из равенства плотности потока массы кислорода на поверхности частицы и суммарной скорости химической реакции определим поверхностную массовую концентрацию кислорода

$$j_{O_2,s} = \beta \rho_g (C_{O_2,g} - C_{O_2,s}) = (W_{O_2})_1 + (W_{O_2})_2. \quad (5)$$

Используя (1) и (5), получаем

$$\frac{C_{O_2,s}}{C_{O_2,g}} = \left(\frac{\sum_{i=1}^2 k_i \rho_{g,s}}{\beta \rho_g} + 1 \right)^{-1}, \quad \rho_{g,s} = \rho_{g0} \left(\frac{T_0}{T} \right), \quad \beta = \frac{DSh}{d},$$

$$\rho_g = \rho_{g0} \left(\frac{T_0}{T_{g^*}} \right), \quad T_{g^*} = (T + T_g)/2, \quad (6)$$

где β — коэффициент массообмена частицы, м/с; D — коэффициент диффузии, м²/с; Sh — критерий Шервуда; T_g — температура газа, К.

Концентрация кислорода в газовой смеси $C_{O_2,g}$, ее температура T_g определяются из законов сохранения массы кислорода и энергии газа

$$\rho_g \frac{\partial C_{O_2,g}}{\partial t} = -C_N j_{O_2,s} S + F_g j_{O_2,g}, \quad C_{O_2,g}(t=0) = C_{O_2,\infty}; \quad (7)$$

$$j_{O_2,g} = \beta_g \rho_g (C_{O_2,\infty} - C_{O_2,g});$$

$$c_g \rho_g \frac{\partial T_g}{\partial t} = C_N q_c S - F_g q_g, \quad T_g(t=0) = T_{g,\infty} = T_w; \quad (8)$$

$$q_c = \alpha (T - T_g), \quad q_g = \alpha_g (T_g - T_{g,\infty}). \quad (9)$$

Температура частицы T находится из закона сохранения энергии для частицы

$$\frac{1}{F} c_p \frac{\partial T}{\partial t} = q_{ch} - q_c - q_w, \quad T(t=0) = T_b, \quad (10)$$

$$q_{ch} = Q_1 (W_{O_2})_1 + Q_2 (W_{O_2})_2, \quad q_w = \varepsilon \sigma (T^4 - T_w^4). \quad (11)$$

Здесь: $F_g = S_g/V_g$ — удельная поверхность реакционного сосуда или газозвеси в целом, м⁻¹; F — удельная поверхность частицы, м⁻¹; S_g, S — поверхность газозвеси и частицы, м²; V_g — объем реакционного сосуда, м³; $C_N = N/V_g$ — численная концентрация частиц, м⁻³; N — число частиц; c, c_g — удельные теплоемкости частицы и газа, Дж/кг К; Q_1, Q_2 — тепловые эффекты химических реакций (I) и (II), Дж/кг O₂; q_{ch} — плотность химического тепловыделения в результате экзотермических реакций (I) и (II), Вт/м²; q_c — плотность теплового потока на поверхности частицы, характеризующего теплообмен частицы с газом, Вт/м²; q_w — плотность теплового потока на поверхности частицы, определяющая теплообмен излучением частицы и стенок реакционной установки, Вт/м²; ε — коэффициент черноты частицы; T_w — температура стенок реакционной установки; α — коэффициент теплообмена частицы с окружающим ее газом, Вт/(м² К); α_g — коэффициент теплообмена на границе газ-стенка, Вт/(м² К); $j_{O_2,g}$ — плотность массового потока на поверхности газ-стенка или газозвесь-окружающая среда, кг/(м² с).

Исходя из условия стационарности

($\partial C_{O_2,g}/\partial t = 0, \partial T_g/\partial t = 0, \partial T/\partial t = 0$), из (7), (8), (10) получим систему алгебраических уравнений массового и теплового балансов:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_g S C_N \beta (C_{O_2,g} - C_{O_2,s}) = \beta_g \rho_g F_g (C_{O_2,g} - C_{O_2,\infty}) \end{array} \right. \quad (12)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} C_N \alpha S (T - T_g) = \alpha_g F_g (T_g - T_{g,\infty}) \end{array} \right. \quad (13)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} (k_1 Q_1 + k_2 Q_2) \rho_g C_{O_2,s} = \alpha (T - T_g) + \varepsilon \sigma (T^4 - T_{g,\infty}^4) \end{array} \right. \quad (14)$$

Для нахождения эффективных коэффициентов тепло- и массообмена частицы, определяющих устойчивые и критические режимы, решение системы (12)–(14) с учетом (6) представим в виде

$$(k_1 Q_1 + k_2 Q_2) \rho_g C_{O_2,\infty} \left(\frac{k_1 + k_2}{\beta_*} + 1 \right)^{-1} = \alpha_* (T - T_{g,\infty}) + \varepsilon \sigma (T^4 - T_{g,\infty}^4), \quad (15)$$

в котором влияние C_N и d учитывается в эффективных коэффициентах тепло- и массообмена

$$\alpha_* = \alpha \left(1 + \frac{C_N \alpha S}{\alpha_g F_g} \right)^{-1}, \quad \beta_* = \beta \left(1 + \frac{C_N \beta S}{\beta_g F_g} \right)^{-1} \quad (16)$$

Из предположения $Lu=1$ следует, что

$$\alpha_* = c_g \rho_g \beta_* \quad (17)$$

Выражение (16) полностью совпадает с формулой, полученной в работе [3]. Однако в дальнейшем авторы [3] ввели массовую концентрацию C_m вместо C_N , включив в C_m диаметр частицы в кубе. Тем самым они исключили возможность исследования качественных особенностей тепло-массообмена и кинетики химических реакций, связанных с размерами частиц и численной концентрацией.

Решая (15) с учетом (17), получим зависимость эффективных коэффициентов тепло- и массообмена, и, следовательно, диаметра частицы от ее стационарной температуры

$$\frac{\alpha_*}{c_g \rho_g} = \beta_* = \frac{B}{A} \pm \sqrt{\frac{B^2}{A^2} - \frac{C}{A}}, \quad B = \frac{1}{2}(1 - B_1 - B_2), \quad (18)$$

$$B_1 = \frac{c_g \rho_g \left(\sum_{i=1}^2 k_i \right) (T - T_w)}{\left(\sum_{i=1}^2 Q_i k_i \right) \rho_g C_{O_2,\infty}}, \quad B_2 = \frac{\varepsilon \sigma (T^4 - T_w^4)}{\left(\sum_{i=1}^2 Q_i k_i \right) \rho_g C_{O_2,\infty}}, \quad (19)$$

$$A = \frac{c_g \rho_g (T - T_w)}{\left(\sum_{i=1}^2 Q_i k_i \right) \rho_g C_{O_2, \infty}}, \quad C = \frac{\left(\sum_{i=1}^2 k_i \right) \varepsilon \sigma (T^4 - T_w^4)}{\left(\sum_{i=1}^2 Q_i k_i \right) \rho_g C_{O_2, \infty}}. \quad (20)$$

Уравнения (18)–(20) определяют устойчивые и критические режимы тепломассообмена частицы с эффективными коэффициентами α_* и β_* . Критические значения α_* и β_* и соответствующие им температуры частицы находятся из условия

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_*}{\partial T} \Big|_{i,e} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial \beta_*}{\partial T} \Big|_{i,e} = 0 \\ \frac{\partial^2 \alpha_*}{\partial T^2} \Big|_i > 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial^2 \alpha_*}{\partial T^2} \Big|_e < 0 \end{aligned} \quad (21)$$

Параметры вырождения критических условий находятся из уравнения

$$\frac{\partial^2 \alpha_*}{\partial T^2} \Big|_i = \frac{\partial^2 \alpha_*}{\partial T^2} \Big|_e, \quad (22)$$

которое решается совместно с (21) и (15).

Найдем из (16) численную концентрацию частиц при постоянном диаметре, в зависимости от стационарной температуры, которая определяет устойчивые и критические режимы тепломассообмена частиц в условиях газозвеси:

$$C_N = \left[\frac{\alpha}{\alpha_*(T)} - 1 \right] \frac{\alpha_g F_g}{\alpha S}, \quad \alpha = \text{const}, \quad (23)$$

где $\alpha_*(T)$ находится из формул (18)–(20). С учетом

$$\alpha = \frac{\lambda_g Nu}{d}, \quad \alpha_*(T) = \frac{\lambda_g Nu}{d_*(T)}, \quad \alpha_g = \frac{\lambda_g Nu_g}{d_g}$$

уравнение (23) представим в виде

$$C_N = \frac{F_g Nu_g}{2\pi d_g d} \left(\frac{d_*(T)}{d} - 1 \right), \quad d = \text{const}. \quad (24)$$

Для температурной зависимости диаметра частицы при $C_N = \text{const}$ имеем

$$d = 2d_*(T) \left(\sqrt{1 + d_*(T)C_N \frac{8\pi d_g}{Nu_g F_g} + 1} \right)^{-1}. \quad (25)$$

Критерий Nu_g определяется характером движения аэрозвеси относительно окружающей среды.

Проанализируем влияние массовой концентрации на время выхода на высокотемпературный режим монодисперсной газозвеси углеродных частиц, найденное в результате решения системы уравнений (1)–(11) с использованием метода [4] (рис. 1). На рисунке зависимость $t_{ind}(C_m)$ представлена для двух случаев: 1) C_m изменялась посредством увеличения численной концентрации частиц (C_N) при фиксированном их диаметре (кривые 2 и 3); 2) увеличение C_m происходило посредством увеличения диаметра при постоянной C_N (или количестве частиц N) (кривая 1). Наблюдается качественное различие результатов для указанных двух случаев. В первом случае зависимость $t_{ind}(C_m)$ — монотонно убывающая кривая; во втором — имеет точку минимума при некотором значении массовой концентрации.

В области низких массовых концентраций (малых диаметров частиц) слева от точки минимума наблюдается резкое увеличение периода индукции, что связано с увеличением теплопотерь от частиц молекулярно-конвективным путем при уменьшении их диаметра ($q_c = \frac{\lambda_g \cdot Nu}{d}(T - T_g)$).

При некоторой массовой концентрации частиц C_{m1} период индукции стремится к бесконечности. В этом случае значения концентрации, соответственно диаметра и количества частиц в газозвеси являются критическими, ниже которых их воспламенение при данной начальной температуре газа невозможно.

Газозвесь, состоящая из мелких частиц, воспламеняется быстрее, чем газозвесь крупных частиц при тех же массовых концентрациях. Период индукции монодисперсной газозвеси с ростом численной концентрации частиц уменьшается (рис. 1, кривые 2,3). Чем более мелкодисперсная аэрозвесь, тем меньше период индукции при тех же массовых концентрациях топлива (рис. 1, кривая 3). Последнее объясняется следующим.

С ростом численной концентрации увеличиваются поверхности реагирования и теплообмена, в результате чего газозвесь, состоящая из большого числа мелких частиц, нагревает газ больше, чем газозвесь более крупных частиц при той же массовой концентрации, но с меньшей C_N . Т.о. увеличивается уровень температуры газа в объеме газозвеси с более мелкими частицами, что способствует уменьшению времени ее выхода на высокотемпературный режим. Чем больше C_N , тем сильнее прогревается газ на стадии химического разогрева частиц. Следовательно, с ростом C_N t_{ind} будет уменьшаться (рис. 1, кривые 2,3).

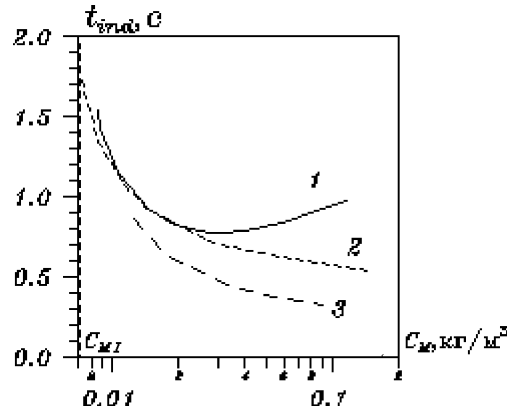


Рис. 1. Зависимость периода индукции частиц аэрозвеси от массовой концентрации. $T_{g\infty} = T_w = 1250K$. 1 — $C_N = 1.9 \cdot 10^7 \text{ м}^{-3}$ ($N=10000$), 2 — $d=100\text{мкм}$, 3 — $d=50 \text{ мкм}$

Увеличение периода индукции после точки минимума (кривая 1) для случая изменения C_m посредством диаметра (C_N -фиксировано) связано с уменьшением плотности теплового потока, нагревающего частицу, с ростом ее размера.

Проанализируем устойчивые и критические режимы тепломассообмена аэрозвеси частиц, используя формулы (24)–(25). На рис.2 представлены расчётные зависимости диаметра частицы (а) — одиночной (кривая 1) и в условиях аэрозвеси ($C_N=10^7 \text{ м}^{-3}$, кривая 2) и численной концентрации частиц (б) от их стационарной температуры.

Экстремумы на кривых $d(T)$ и $C_N(T)$ характеризуют неустойчивые критические режимы — воспламенение (т.И) и потухание (т.Е) [5]. Участок кривых $d(T)$ и $C_N(T)$ до т.И описывает устойчивый низкотемпературный режим — окисление. При достижении диаметром и концентрацией критических значений d_1 и C_{N1} происходит скачкообразный переход в высокотемпературное состояние — воспламенение частицы. Высокотемпературный режим — горение (кривая после т.Е) осуществляется для всех диаметров $d > d_1$ и концентраций $C_N > C_{N1}$ частиц независимо от их начальной температуры. В высокотемпературном режиме размер частицы, в результате горения, уменьшается. При этом ее температура увеличивается и достигает максимального значения (рис.2а, т.М). Возрастающие, в результате уменьшения диаметра, теплотери от частицы приводят к понижению температуры горения и скачкообразному переходу частицы в низкотемпературное состояние при достижении критического диаметра d_E , определяющего её потухание.

Уменьшение численной концентрации частиц заданного диаметра при-

водит к росту температуры горения газозвеси до максимального значения (рис.2б), в результате увеличения коэффициента массообмена, и, следовательно, концентрации окислителя и плотности химического тепловыделения на поверхности частицы. Одновременное возрастание коэффициента теплоотдачи увеличивает тепловой поток от частиц и способствует понижению температуры горения до значения, определяемого t_E , характеризующей минимальное предельное значение концентрации частиц заданного диаметра, для которого возможно существование высокотемпературного режима (кривая 1). Увеличение размера частиц понижает значение критической концентрации, характеризующей воспламенение, и может привести к исчезновению критического режима (t_E), определяющего вынужденное потухание аэрозвеси при уменьшении концентрации частиц в ней до значения C_{NE} (рис.2б, кривая 2). В случае неучета теплотерь излучением максимум на зависимостях $d(T)$ и $C_N(T)$ не наблюдается.

Ветви, соединяющие точки I и E, описывают влияние начальной температуры частицы на критические значения диаметра и численной концентрации, характеризующие воспламенение. Значения начальных критических температур, для которых возможно воспламенение частиц из интервала диаметров $d_E < d < d_I$ и концентраций $C_{NE} < C_N < C_{NI}$ должны быть больше значений, лежащих на кривых $d(T)$ и $C_N(T)$ в интервале $T_I < T < T_E$ для соответствующего диаметра и концентрации частиц. Воспламенение газозвесей диаметрами $d < d_E$ и концентрациями $C_N < C_{NE}$ не происходит ни при каких значениях начальных температур.

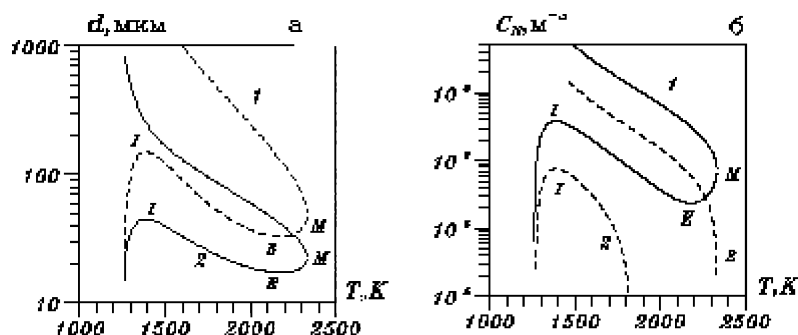


Рис.2. Зависимости диаметра частицы (а) и численной концентрации (б) от стационарной температуры частицы. $T_{g\infty} = T_w = 1250K$. а) 1 — одиночная частица, 2 — аэрозвесь $C_N = 1.9 \cdot 10^7 \text{ м}^{-3}$; б) 1- $d=25\text{мкм}$, 2- $d=50\text{мкм}$.

Из сравнения кривых $d(T)$ для одиночной частицы и частицы в условиях аэрозвеси следует, что критические диаметры, определяющие воспламенение и потухание аэрозвеси меньше, чем для одиночной частицы (рис.2а),

что связано с уменьшением теплового потока от частицы в условиях аэровзвеси в результате уменьшения коэффициента теплообмена.

Таким образом, показано, что изменение массовой концентрации топлива в аэровзвеси посредством диаметра частиц или их численной концентрации приводит к неоднозначному влиянию на период индукции. Определены критические значения диаметров и численных концентраций частиц, характеризующие скачкообразные переходы из низко- в высокотемпературное состояние аэровзвеси и наоборот.

Литература

1. Виленский Т.В., Тучинская О.Е., Тимофеева С.А. Влияние режимных факторов на воспламенение и горение угольной пыли // Повышение эффективности и надежности работы энергоблоков. Сб. научных трудов. М.: МЭИ. 1987, №121. С.32-38.
2. Калинин В.В., Орловская С.Г., Нерубаская А.А. Исследование влияния концентрации и диаметра угольных частиц на характеристики горения в условиях газозвеси // Химическая физика процессов горения и взрыва. XII Симпозиум по горению и взрыву. Черногоровка. 2000. Часть 1. С.66-68.
3. Руманов Э.Н., Хайкин Б.И. Критические условия самовоспламенения совокупности частиц // ФГВ. 1969. Т.5, №1. С.129-137.
4. Калинин В.В., Орловская С.Г., Лаврова А.А. Анализ горения и погасания угольной частицы в потоке воздуха // Повышение эффективности и надежности работы энергоблоков. Сб. научных трудов. М.: МЭИ. 1987, №121. С.88-93.
5. Kalinchak V.V., Orlovskaya S.G., Mandel A.V. The hysteresis of heat and mass exchange and the critical conditions of ignition and extinction of aerosol of carbon particles // Journal of Aerosol Science. Abstracts of the 2000 European aerosol conference. Dublin. 2000. P.791-792.

С. Г. Орловська, В. В. Калінчак, А. І. Калінчак

Високотемпературний тепломасообмін в аерозавису частинок.

АНОТАЦІЯ

З'ясовано особливості впливу масової та чисельної концентрації частинок монодисперсного аерозавису на час переходу до високотемпературного стану. Знайдено значення чисельної концентрації, які визначають стійкі гістерезисні та критичні режими існування високо- і низькотемпературних станів аерозавису частинок заданого діаметра.

Orlovskaya S. G., Kalinchak V. V., Kalinchak A. I.
High heat and mass transfer in aerosol of particles

SUMMARY

Peculiarities of numerical concentration and particles diameter influence in monodispersion aerosol on time of their transition to the high-temperature state have been studied. Particles numerical concentration influence on steady hysteresis and critical regimes existing in the high and low temperature states in aerosol have been found.

УДК 536.46

Т. А. Яровой, Я. И. Вовчук, А. Н. Золотко, Н. И. Полетаев

*Институт горения и нетрадиционных технологий
Одесского национального университета им И.И. Мечникова, г. Одесса.*

Воспламенение, горение и потухание частиц высокозольных углей. Часть II. Горение одиночной частицы высокозольного угля

Разработана нестационарная теоретическая модель воспламенения и горения одиночных частиц зольного угля, учитывающая возможность расплавления золы в процессе воспламенения и горения. Расчет показал, что для легкоплавкой золы время горения угольной частицы растет с увеличением дисперсности зольных включений, а также с уменьшением температуры перехода золы в жидкоплавкое состояние. Плавление золы, обуславливающее резкое возрастание диффузионного сопротивления и связанное с этим падение макроскопической скорости реакции, вызывает появление экстремумов: максимума на зависимости времени горения частицы, отнесенного к времени горения такой же частицы беззолного угля, от размера частицы, и минимума на зависимостях времени горения от концентрации кислорода и средней скорости реагирования от зольности угля.

В условиях увеличения зольности добываемых углей обеспечение достижения максимально высокой степени конверсии углерода является необходимым экономическим условием использования таких углей в промышленных энергетических установках. Причины влияния неорганической составляющей угля на процесс его реагирования, а следовательно, и на полноту сгорания, очевидны а priori. На начальной стадии реагирования угля его минеральные составляющие образуют золу, и дальнейший процесс конверсии углерода в угле во многом зависит от ее физико-химических свойств: пористости, спекаемости, плавкости и т.д. Часть тепла, выделившегося в результате окисления органической компоненты, должна затрачиваться на разогрев золы. Наличие золы приводит также к сокращению реакционной поверхности частицы угля, что снижает полную скорость реагирования. Кроме того, частицы золы, накапливаясь на поверхности, могут вызывать появление дополнительного препятствия для диффузии окислителя к поверхности углерода.

Первые попытки учета влияния золы на скорость диффузии и общую скорость реакции при горении угля были предприняты в работах В.И. Блинова, Л.А. Вулиса, Б.В. Канторовича [1]. Эти авторы в теоретических моделях использовали изотермическое приближение и не рассматривали возможность смены агрегатного состояния золы в процессе реагирования.

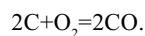
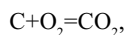
Продолжением исследования воспламенения зольного угля послужила работа [2]. В этой работе были проведены микрокиносъемка процесса воспламенения частиц углей с различной зольностью, тугоплавкой и легкоплавкой золой, а также эксперименты по воспламенению модельных зольных частиц, полученных прессованием порошков активированного угля с инертными добавками — V_2O_5 и Al_2O_3 . Авторы впервые предложили связывать степень плавкости золы не только с абсолютными значениями температуры ее “размягчения”, но и с соотношением этой температуры с уровнями температур воспламенения соответствующей дисперсной системы угольных частиц. В предложенной в [2] теоретической неизотермической модели воспламенения частиц зольного угля было учтено диффузионное сопротивление пленки золы. Сопоставление результатов расчетов по этой модели с экспериментом качественно подтвердило справедливость предположений модели. Вместе с тем, следует указать, что принятое в работе допущение о том, что жидкая зольная пленка покрывает всю поверхность угольной частицы с самого начала процесса ее воспламенения является, по-видимому, излишне жестким. Как следует из приведенных в работе данных, возможность его реализации существует только для углей с зольностью выше $A > 30\%$.

Комплекс экспериментальных работ по изучению воспламенения и горения углей различных месторождений США с зольностью $A < 12.7\%$, выполненный Р. Хартом с сотрудниками с применением современных экспериментальных методов [3-7], подтверждает возможность плавления золы в процессе воспламенения угля — на микрофотографиях поверхности угольных частиц наблюдаются отдельные участки, покрытые расплавленной золой.

Целью настоящей работы является теоретический анализ воспламенения и горения одиночной частицы зольного угля с учетом возможности смены агрегатного состояния золы и начальных размеров зольных включений, а также изменения поверхности частицы угля, занятой в процессе реагирования расплавленной золой.

Модель

Рассмотрим сферическую частицу зольного угля, реагирующую в неподвижной кислородсодержащей среде. Будем полагать, что взаимодействие кислорода с углеродом происходит гетерогенно по схеме параллельных первичных реакций:



Влиянием вторичных реакций на воспламенение и горение частицы угля будем пренебрегать.

Будем использовать также следующие общепринятые предположения: 1) градиент температуры по радиусу частицы угля отсутствует; 2) удельные теплоемкости газа и частицы не зависят от температуры; 3) удельные теплоемкости угля и золы равны.

Кроме того, будем полагать, что частицы золы равномерно распределены по объему частицы угля и представляют собой сферы радиуса r_z , плотность золы ρ_z равна плотности угля ρ_c . Тогда зольность A , т.е. отношение массы золы m_z к массе коксового остатка угольной частицы $m_z + m_c$, равна отношению объема золы, находящейся в рассматриваемой частице угля к ее полному объему.

По мере выгорания углерода на внешней поверхности частицы угля накапливается зола. Для учета такого накопления введем величину z , определяемую как отношение площади, покрытой частицами золы, к полной поверхности угольной частицы. Из геометрических соображений легко показать, что

$$z = \frac{A(r_0^3 - r^3)}{4r^2 r_z},$$

где r_0 и r — начальный и текущий радиусы частички угля, соответственно, r_z — радиус частицы золы.

Толщина слоя золы будет:

$$h = \sqrt[3]{\frac{A}{1-\Omega}(r_0^3 - r^3) + r^3} - r.$$

С учетом этих предположений уравнение теплового баланса частицы угля запишется следующим образом:

$$C_p m \frac{dT}{dt} = 4\pi r^2 (1-A)(k_1 q_1 + k_2 q_2) [a_{O_2}^1 \cdot (1-z) + a_{O_2}^2 \cdot z] \rho_g - \\ - 4\pi \lambda [(1-z)r + z(r+h)](T - T_g) - 4\pi \sigma [\epsilon_c (1-z)r^2 + \epsilon_a z(r+h)^2] (T^4 - T_r^4),$$

где m — масса частицы угля, A — зольность, T — температура частицы угля, T_g — температура окружающей среды, T_r — радиационная температура на бесконечности, r — радиус частицы угля, h — толщина слоя золы, Ω — пористость слоя золы, ρ_g — плотность газа, a_∞ — мольная доля окислителя в окисляющем газе, C_p — удельная теплоемкость угля, k_i — константа скорости химической реакции, E_i — энергия активации, q_i — тепловой эффект, ϵ_c — коэффициент черноты угля, ϵ_a — коэффициент черноты золы, σ — постоянная Стефана-Больцмана, $i=1,2$ — номер химической реакции.

Уравнение выгорания углерода:

$$\frac{dm}{dt} = -4\pi r^2(1-A)(k_1 v_1 + k_2 v_2)[a_{O_2}^1 \cdot (1-z) + a_{O_2}^2 \cdot z] \rho_g,$$

где v_i — стехиометрические коэффициенты

Начальные условия — $t=0$: $T=T_0$, $m=m_0$.

Массовые доли кислорода на свободной от золы поверхности частицы угля $a_{O_2}^1$ и на ее поверхности под слоем золы $a_{O_2}^2$ определялись в предположении квазистационарности процесса диффузии окислителя к поверхности угольной частицы:

$$a_{O_2}^1 = \frac{a_\infty}{(k_1 + k_2) \left[(1-A) \frac{1}{\beta} + \frac{1}{k_1 + k_2} \right]},$$

$$a_{O_2}^2 = \frac{a_\infty}{(k_1 + k_2) \left[(1-A) \left(\frac{1}{\beta} + \frac{1}{\chi} \right) + \frac{1}{k_1 + k_2} \right]},$$

где $\chi = D_Z/h$ — скорость диффузии окислителя через золную оболочку толщиной h , β — коэффициент массообмена, D_Z — коэффициент диффузии окислителя через слой золы. Будем полагать, что величина D_Z не зависит от химического состава золной оболочки и определяется ее агрегатным состоянием:

$D_Z = \Omega D$ для твердой золы;

$D_Z = D^* \exp(-E_Z/RT)$ для расплавленной золы.

D — коэффициент газовой диффузии; D^* , E — соответственно, предэкспонент и энергия активации в температурной зависимости коэффициента диффузии кислорода сквозь жидкую золную пленку.

Следуя [2], будем считать золу тугоплавкой, если температуры, достигаемые в процессе реагирования меньше температуры размягчения золы, и легкоплавкой, если температура частицы угля в процессе ее реагирования превышает температуру размягчения золы. Для угля с тугоплавкой золой модель описывает следующие два возможных варианта протекания процессов воспламенения и горения: а) частички золы, появляющиеся на поверхности угля по мере его выгорания, не накапливаются на ней, т.е. доля реакционной поверхности, занятая золой, в начальный момент времени не изменяется со временем; б) зола накапливается на поверхности частицы угля и образует на ней постоянно увеличивающиеся по площади пористые участки, препятствующие диффузии окислителя.

В случае углей с легкоплавкой золой учитывается возможность формирования очагов расплавленной золы, которые оказывают дополнительное диффузионное сопротивление диффузии окислителя.

В предельном ($A = 0, z = 0$) случае приведенная система уравнений описывает процесс reagирования частицы углерода.

Приведенная система дифференциальных уравнений решалась численно. Значения параметров задавались согласно [2,8,9]: $q_1=2945$ кал/г, $q_2=1634$ кал/г, $k_1=0.363 \cdot 10^6$ см/с, $k_2=0.44 \cdot 10^6$ см/с, $E_1=24150$ кал/моль, $E_2=25600$ кал/моль, $v_1=0.375$, $v_2=0.75$, $v=1.8$, $C_p=0.167$ кал/г·К, $\rho_c=1.5$ г/см³, $\lambda=55 \cdot 10^{-6}(T^*/T_0)^{0.75}$ кал/см·с·К, $D=0.18(T^*/T_0)^{1.75}$ см²/с, $c_g=1.29 \cdot 10^{-3}(T_0/T^*)$ г/см³, $D^*=64$ см²/с, $E_z=48500$ кал/моль, $\epsilon_c=0.78$, $\epsilon_a=0.40$, $\Omega=0.95$.

На первом этапе были исследованы времена горения частиц зольного угля в зависимости от параметров частиц и окружающей среды.

На рис. 1 представлены зависимости характеристического времени горения (t_r/r_0^2) от размера частиц угля при различных предположениях об агрегатном состоянии золы.

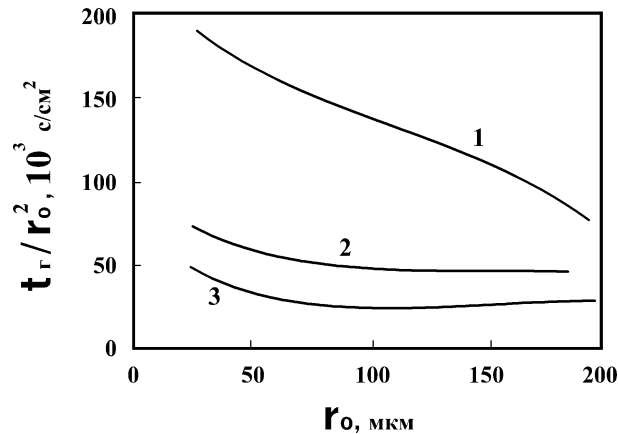


Рис. 1. Зависимость характеристического времени (t_r/r_0^2) от начального размера частицы угля. $T_g=1250$ К, $a_w=0.06$, $r_z=0.5$ мкм, $A=11\%$. 1 — легкоплавкая зола; 2 — тугоплавкая зола накапливается на поверхности частицы угля, 3 — тугоплавкая зола удаляется с поверхности частицы угля

Результаты расчетов для частиц зольного угля размером более 100 мкм с тугоплавкой золой (кривые 2, 3) свидетельствуют о том, что процесс reagирования контролируется газовой диффузией — характеристическое время горения (t_r/r_0^2) практически не изменяется с ростом размера частицы угля. Для меньших частиц увеличение значения t_r/r_0^2 указывает на влияние кинетического фактора. Поведение кривой 1 не позволяет выявить ведущий механизм контроля процесса горения и демонстрирует, что диффузионный барьер жидкого слоя золы сильно уменьшает макроскопическую скорость reagирования для всего диапазона исследованных размеров частиц угля.

Интересно сопоставить времена горения зольного угля с таковыми для беззольного угля. На рис. 2 представлено отношение этих времен как функция начального размера частицы угля.

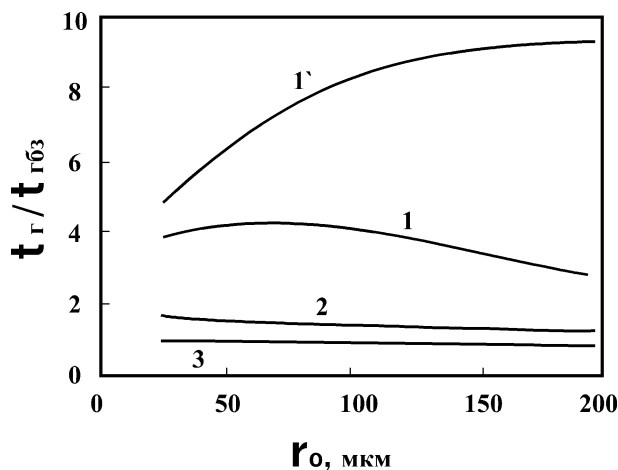


Рис. 2. Зависимость относительного времени горения от начального размера частицы угля. $T_g=1250\text{K}$, $a_\infty=0.06$, $r_z=0.5\text{ мкм}$, $A=11\%$. 1 — легкоплавкая зола; 1' — легкоплавкая зола, $\epsilon_a=0$; 2 — тугоплавкая зола, накапливается на поверхности частицы угля; 3 — тугоплавкая зола удаляется с поверхности частицы угля

Для легкоплавкой золы величина отношения достигает 4-х и имеет экстремум (кривая 1), тогда как для тугоплавкой золы (кривые 2,3) оно близко к 1 и слегка уменьшается с ростом размера частицы угля. Кривая 1', полученная для случая легкоплавкой золы без учета радиационных теплотерь частицей угля, представлена для объяснения вышеуказанного экстремума. Радиационные теплотери препятствуют росту температуры частицы угля выше температуры расплавления золы, что ведет к уменьшению доли реакционной поверхности покрытого слоем жидкой золы для частиц угля с радиусом более 75 мкм и как результат к уменьшению полного времени реагирования.

На рис. 3 представлена зависимость времени горения частицы угля от концентрации кислорода в окружающей среде. Кривые 2 и 3 для тугоплавкой золы отражают типичную для гетерогенного горения картину уменьшения времени горения с ростом концентрации окислителя. С другой стороны аналогичная зависимость для легкоплавкой золы (кривая 1) имеет минимум. Факт увеличения времени горения для концентраций кислорода более 10% объясняется влиянием упомянутого выше механизма корреляции между максимальной температурой частицы угля, достигаемой в процессе реагирования, и величиной

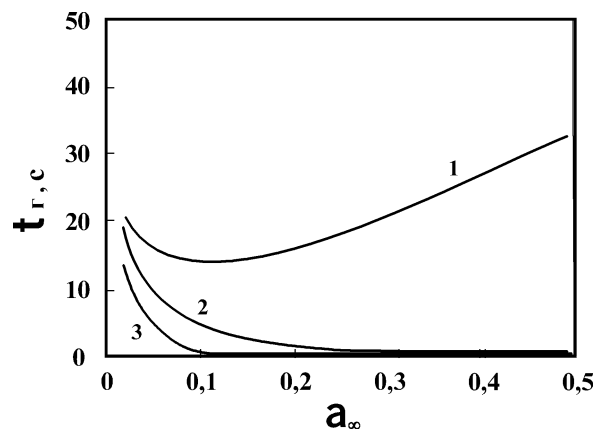


Рис. 3. Зависимость времени горения от массовой доли кислорода температуры перехода золы в жидкофазное состояние. $T_g=1250\text{K}$, $r_0=100\text{мкм}$, $r_z=0.5\text{мкм}$, $A=11\%$, $\epsilon_c=0.78$, $\epsilon_a=0.4$. 1 — легкоплавкая зола; 2 — тугоплавкая зола, накапливается на поверхности частицы угля; 3 — тугоплавкая зола удаляется с поверхности частицы угля

На рис. 4 представлена зависимость времени горения частицы зольного угля в зависимости от температуры размягчения золы. Хорошо видно, что плавление золы существенно затягивает процесс реагирования. Т.к. скорость диффузии окислителя сквозь жидкую пленку золы на порядки ниже скорости диффузии в воздухе, плавление зольной пленки практически исключает определенную долю реакционной поверхности из процесса реагирования. Это в свою очередь существенно увеличивает время полного реагирования угольной частицы.

На рис. 5 приведены зависимости средней скорости реагирования частицы угля Θ , определенной как отношение массы прореагировавшего углерода ко времени его выгорания, от зольности угля. Кривые 1 и 2 соответствуют случаю тугоплавкой золы, которая накапливается на поверхности частицы угля, с размерами частиц золы 0.05 мкм и 1.0 мкм, соответственно. В этом случае зола проявляет себя как тепловой балласт, исключает фиксированную долю поверхности из процесса реагирования и препятствует диффузии окислителя к реакционной поверхности, формируя, по мере выгорания углерода, на поверхности частицы угля твердый зольный каркас. Перечисленные факторы ведут к монотонному падению величины средней скорости выгорания углерода с ростом величины зольности угля. Кривые 1 и 2 совпадают, что свидетельствует о том, что размер частиц тугоплавкой золы практически не влияет на ход процесса.

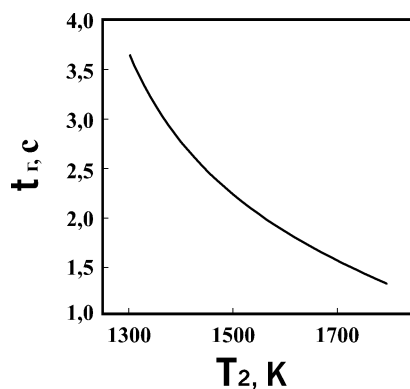


Рис. 4. Зависимость времени горения от температуры размягчения золы.
 $T_g=1250\text{K}$, $a_\infty=0.06$, $r_0=50\text{мкм}$, $r_z=0.5\text{ мкм}$, $A=11\%$, $\epsilon_c=0.78$, $\epsilon_a=0.4$

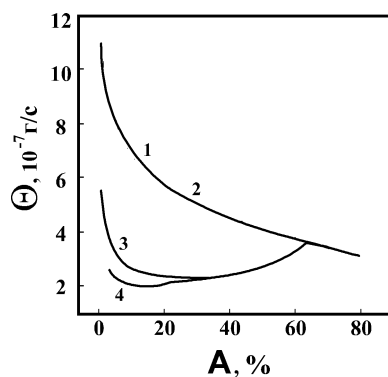


Рис. 5. Зависимость средней скорости горения от величины зольности угля.
 $T_g=1250\text{K}$, $a_\infty=0.06$, $r_0=50\text{ мкм}$, $\epsilon_c=0.78$, $\epsilon_a=0.4$. 1, 2 — тугоплавкая зола накапливается на поверхности частицы угля, $r_z=1.0\text{ мкм}$ и $r_z=0.05\text{ мкм}$, соответственно; 3, 4 — легкоплавкая зола, размер частиц $r_z=1.0\text{ мкм}$ и $r_z=0.05\text{ мкм}$, соответственно.

Кривые 3 и 4 представляют случай легкоплавкой золы с размерами частиц минеральных включений 1.0 мкм и 0.05 мкм, соответственно. Если зола в процессе реагирования переходит в жидкофазное состояние, то возможно появление на поверхности реагирующей частицы угля частично или полностью сплавленного зольного каркаса. Из сравнения поведения кривых 1, 2 и 3, 4 хорошо видно, что этот эффект существенным образом сказывается на процессе реагирования частиц угля с легкоплавкой золой. Минимумы на

кривых 3, 4 соответствуют условиям, когда величины доли поверхности частицы угля, покрытой пленкой плавленной золы, достигают в процессе выгорания максимального значения. Доля реакционной поверхности, закрытой расплавленной золой, т.е. практически исключенной из процесса активного реагирования, определяется уровнем развивающихся в процессе температур, который, в свою очередь зависит от зольности угля. Видно, что при $A > 60\%$, когда температуры, развивающиеся в процессе реагирования, не превышают температуру размягчения золы — в этой области кривые 3 и 4 практически совпадают. В случае легкоплавкой золы размер зольных включений существенным образом сказывается на скорости выгорания. Чем меньше размер частичек зольных включений, тем быстрее они покрывают внешнюю поверхность частицы угля, а при достижении температурой точки размягчения золы — формируют сплавленный зольный каркас.

Представленные выше результаты позволяют заключить, что тугоплавкая зола относительно слабо влияет на динамику реагирования и времена горения частиц зольного угля в сравнении с беззольным. В этом случае золу можно считать лишь тепловым балластом топлива. Качественные изменения механизма реагирования угля появляются даже при относительно небольших значениях зольности, если в процессе реагирования зола плавится. Расплавление золы приводит не только к увеличению времени полного реагирования топлива, но и к появлению качественно новых, с экстремумами, зависимостей времени горения и средней скорости выгорания как функции начального размера частиц угля, массовой доли окислителя и количества зольных включений.

Литература

1. Канторович Б.В. Введение в теорию горения и газификации твердого топлива. — М. Изд. АН СССР, 1958. — 598 с.
2. Киро С.А., Вовчук Я.И., Золотко А.Н., Клячко Л.А. // Воспламенение частиц зольного угля. // — Физика горения и взрыва. 1983. Т.19, №5. С.36-39.
3. Hurt R.H., Davis K.A. // "Near-Extinction and Final Burnout in Coal Combustion" // Twenty-Fifth (International) Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh. 1994.
4. Hurt R.H., Davis K.A., Yang N.Y.C., Headley T.H., Mitchell R.E. // Residual Carbon from Pulverised Coal Fired Boilers 2: Morphology and Physicochemical Properties // Fuel. 1995. v 74, #9. P. 1297-1306.
5. Hurt R.H. Reactivity Distributions and Extinction Phenomena in Coal Char Combustion Energy & Fuels. 1993. #7. P. 721 — 733.
6. Davis K.A., Hurt R.H., Yang N.Y.C., Headley T.J. // Evolution of Char Chemistry, Crystallinity, and Ultrafine Structure during Pulverised-Coal Combustion // Twenty-Fifth (International) Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburg, 1994.

7. Hurt R.H., Mitchell R.E. Twenty-Fourth (International) Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburg, 1992, P. 1243-1250.
8. Виленский Т.В., Хзмалян Д.М. Динамика горения пылевидного топлива. М. Энергия, 1978. — 248 с.
9. Бабий В.И., Куваев В.Ф. Горение угольной пыли и расчет пылеугольного факела. М. Энергоатомиздат, 1986. — 208 с.
10. Яровой Т.А., Золотко А.Н., Полетаев Н.И., Вовчук Я.И. // Воспламенение, горение и потухание частиц высокозольных углей // Физика аэродисперсных систем, 1998. вып.37 — С.82-85.
11. Yarovoy T.A., Zolotko A.N., Poletaev N.I., Vovchuk Ya.I. Ash Influence on Conversion of Spherical Coal Particle Reacting with Ambient Oxidizing Gas. 29-th Intern. ICT Conference, 1998. Karlsruhe. P.203-206.
12. Агроскин А.А. Химия и технология угля. М. Недра, 1969. — 237 с.
13. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплоперенос в химической кинетике. — М. Наука, 1987. — 502 с.

Т. А. Яровой, Я. І. Вовчук, А. Н. Золотко, М. І. Полетаєв

**Займання, горіння і потухання частинок високозольного вугілля.
Частина II. Горіння одиночної частинки високозольного вугілля**

АНОТАЦІЯ

Розроблено нестационарну теоретичну модель займання і горіння одиночних часток зольного вугілля, що враховує можливість розплавлення золи в процесі запалення і горіння. Розрахунок показав, що для легкоплавкої золи час горіння вугільної частинки зростає зі збільшенням дисперсності зольних включень, а також зі зменшенням температури переходу золи в рідкоплавкий стан. Плавлення золи, що обумовлює різке зростання дифузійного опору і зв'язане з цим падіння макроскопічної швидкості реакції, викликає появу екстремумів: максимуму на залежності часу горіння частинки, віднесенного до часу горіння такої ж частинки беззольного вугілля, від розміру частинки; і мінімуму на залежностях часу горіння від концентрації кисню і середньої швидкості реагування від зольності вугілля.

Yarovoy T. A., Vovchuk Ya. I., Zolotko A. N., Poletaev N. I.
Ignition, Combustion and Extinction of Ash-Rich Coal Particles.
Part II. Combustion of Single Coal Particle.

SUMMARY

The problem of ash coal combustion has a special significance in consequence of worsening of extracted coals quality. During burning process ash is capable to cover a surface of coal particle and acts as a diffusion barrier for oxygen (in particular — liquid ash). A model is presented to describe spherical ash coal particle combustion in quiescent oxidizing gas and to reveal the main factors of ash influence on this process. The analysis of the results obtained demonstrates that a fusibility of inorganic matter is one of the most significant ash coal characteristics. Refractory ash has an insignificant influence on the conversion dynamics and burning time of ash coal in comparison with ash free coal. The qualitative change of the ash coal combustion mechanism is to appear if the combustion temperature exceeds the ash fusing temperature. That leads to significant increase of the particles burning times and to new form of burning time dependence from the particle initial size and oxidizer mass fraction.

В. Г. Скогарев, А. В. Флорко

*Институт горения Одесского госуниверситета им. И. И. Мечникова
Дворянская ул., 2, Одесса, 65026, Украина.*

Факельное стационарное горение жидкого многокомпонентного углеводородного топлива

Рассмотрен способ сжигания жидкого топлива без его первичного распыления. Обосновано применение эмульгирования и предварительного испарения при использовании тяжелого высоковязкого топлива. Оптическими методами измерены температура, световые потоки и оптическая плотность излучения диффузионного факела горящей водотопливной эмульсии в диапазоне расходов горючего от 2 мм³/с до 10 мм³/с.

Показано, что температура и высота факела слабо зависят от водного содержания, в то время как с увеличением концентрации воды прозрачность пламени возрастает. При этом отложения нагара в камере испарения отсутствуют, а доля образующейся сажи по отношению к расходу масла не зависит ни от водной концентрации, ни от расхода горючего.

1. Основные стадии преобразования жидкого топлива в процессе его сжигания

1.1. Особенности распыления высоковязких топлив

Жидкие углеводородные топлива представляют собой класс горючих, горение которых происходит как в замкнутом пространстве камер сгорания двигателей (легкие фракции), так и в факеле открытых топочных устройств (тяжелые высоковязкие топлива). Общий для всех способов сжигания этап преобразования топлива — первичное диспергирование (распыление), одновременно является основным способом интенсификации его испарения. Поэтому сами факторы, определяющие распыление и испарение топлива, без учета их влияния на суммарные характеристики процесса горения, приобретают самостоятельное значение.

Развитие работ в этой области показывает, что задачи образования хорошо распыленных жидких струй, испарение одиночных капель и всей струи, а также условия, необходимые для создания той или иной степени равновесного испарения, представляют интерес прежде всего для конструкторов камер сгорания и разрабатывались, в основном, для летучих топлив. При этом было установлено, что с увеличением вязкости топлива увеличивается время разрушения жидкой струи, подвергаемой ротационно-симметричным воздействиям. Вязкость также значительно уменьшает скорость деформации

ции образующихся первоначальных капель, что существенно затрудняет их дальнейший распад [1].

В случае факельного сжигания вязкость топлива является главной причиной широкой функции распределения частиц по размерам и является основным фактором неоднородности структуры факела. На практике, при сочетании воздушного распыления и распыления давлением, не удается уменьшить разброс диаметров полученных капель, который составляет несколько порядков. Искусственная турбулизация воздушного потока способствует полному испарению наиболее мелких частиц перед подачей в зону горения факела, но не исключает догорания жидкого топлива в его наружной зоне вместе с твердыми частицами сажи и кокса [2]. В результате структура факела и граница между фронтом горения и наружной зоной становятся неоднородными

Водное эмульгирование дизельного топлива перед его распылением в факеле судового двигателя способствует улучшению качества смесеобразования в дизеле [3], но не исключает недостатков воздушного распыления, а именно высокой степени неоднородности размеров частиц.

Как видно из последнего примера, модификация используемого топлива также не способствует образованию высокодисперсных частиц. В связи с этим возникает задача поиска способа эффективного горения тяжелого топлива без его предварительного распыления.

С этой целью, распыление топлива, как первичный этап его преобразования, предлагается заменить эмульгированием, а полученную водотопливную эмульсию, после предварительного испарения, подавать в зону горения факела в газовой фазе. Это приводит к образованию на выходе ламинарного диффузионного факела, структура которого однородна и не содержит жидкой фазы.

1.2. Испарение многокомпонентных топлив

Для распыленного топлива испарение является следующей основной стадией его подготовки. В случае использования топлива в двигателях, важными факторами, влияющими на процесс испарения, являются воздушный поток, условия впрыска и тип топлива. При этом, при анализе испарения топлива, наряду со скоростью испарения, должны быть рассмотрены условия равновесия "пар-жидкая фаза", т.к. максимальное испарение струи определяется равновесными условиями. Особое значение это приобретает для топлив низкой летучести и низкотемпературных рабочих условий.

Для топлива известного состава методика определения концентрации насыщенного пара в топливо-воздушной смеси заключается в совместном решении уравнений материального баланса и равновесных соотношений для отдельного компонента. Затем строится кривая равновесного испарения для данных температуры и давления.

Для тяжелых нефтяных фракций, являющихся сложной смесью многих

углеводородов, приведенная методика неприменима, и решение может быть найдено из эмпирических соотношений на основе принятых стандартных тестов.

В случае факельного сжигания распыленного топлива условия его максимального испарения (равновесные) становятся еще более неопределенными. При высоких температурах, характерных для мазутного факела, испарение топлива, как и диффузия окислителя, являются наиболее медленными процессами, определяющими скорость горения. Влияние испарения на скорость горения значительно возрастает для высоковязкого (20-40 сантистоксов) топлива, поскольку основным свойством топлива, влияющим на степень дисперсности частиц, считается вязкость [1].

Наряду с общей неоднородностью структуры факела, недостатком окислителя в зоне испарения и смесеобразования, а также ответным влиянием горячих топочных газов, скорость самого процесса испарения вносит дополнительную неопределенность, лимитируя весь процесс горения.

В связи с этим возникает задача создания условий максимального для данного типа топлива испарения. В качестве одного из них предлагается замена процесса испарения распыленного топлива испарением приготовленной на его основе водотопливной эмульсии при отсутствии окислителя. Это позволит исключить из рассмотрения как влияние окислителя на этапе предварительного испарения эмульсии, так и испарение отдельных горящих капель распыленного топлива, а также способствовать наиболее полному для данного расхода топлива испарению эмульсии. При этом происходит пространственное разделение стадий испарения и горения, когда зона горения строго фиксирована (в факеле), а объем газовой фазы (до факела) может меняться.

В связи с этим, для многокомпонентных топлив, кипящих в широких температурных интервалах, возникает вопрос о составе топлива в процессе испарения. Как показывают эксперименты по испарению многокомпонентных струй в неподвижный воздух, концентрация компонента с более высокой точкой кипения в остающихся каплях увеличивается [1]. При повышенных температурах воздуха увеличение концентрации высококипящего компонента становится более резко выраженным.

Следовательно, полное испарение многокомпонентного топлива может произойти при заданной скорости его прогрева во всем диапазоне температур кипения. На основании этого можно предположить, что по мере продвижения макрообъема такого топлива в температурном поле с известным температурным градиентом топливо будет претерпевать последовательные этапы испарения каждого компонента.

Такое испарение может иметь место в специальной камере с температурным градиентом, соответствующим интервалу температур кипения данного топлива.

Конфигурация камеры испарения, в частности, соотношение ее длины и

площади поперечного сечения, объем, зависят от скорости испарения и расхода топлива.

1.3. Горение капель эмульсий

Водотопливные эмульсии, созданные на основе углеводородного топлива, являются многокомпонентными химическими системами, характеристики горения которых в настоящее время не систематизированы.

Многие положительные эффекты эмульгирования жидких топлив, связанные с их экономией и сажеобразованием, проявляются при использовании только распыленного летучего топлива. В связи с этим значительное внимание уделялось изучению горения одиночных капель и струй аэрозолей эмульсий. При этом учитывались различные механизмы испарения горячей капли, главная роль в которых отводилась летучести компонентов, их взаимной концентрации и температуре кипения [3,4,5].

Рассмотренные разнообразные механизмы испарения капли, горячей в открытой атмосфере, сводятся практически к двум группам: к так называемым микровзрывам, т.е. к неоднократному дроблению капли эмульсии в результате вскипания внутрифазных водных включений, достигших температуры перегрева [3,4], либо к модели испарения капли в отсутствие интенсивной внутренней циркуляции, когда скорость фракционного испарения каждого компонента определяется его массовой долей [5]. Для капель хорошо распыленных эмульсий, времена жизни которых составляли 0,7-0,8с, особое внимание уделялось моменту возникновения микровзрыва, который тем более вероятен, чем выше температура кипения.

Считается также [5], что чем ниже испаряемость топлива, тем лучше проявляются полезные эффекты эмульгирования, поскольку микровзрывы будут вызывать эффект вторичного измельчения, только если они появятся прежде, чем большая масса первоначальных капель испарится или пиролизуется.

В указанных моделях рассматривались капли эмульсий однородного размера, образованные на основе однокомпонентного летучего топлива (n-октан, n-гептан и др.) с известными характеристиками. Данные модели, являясь сами по себе ограниченными, не могут быть в полной мере применены к сложной смеси многих углеводородов, каждый из которых оказывает влияние на пределы воспламенения смеси. К тому же, при распылении эмульсий неоднородность размеров капель сохраняется [3], а при этом все характеристики горения, в частности, начало микровзрыва, тесно зависят от температуры капли.

2. Свойства горячей водотопливной эмульсии.

Как уже отмечалось, факельное горение высоковязкого многокомпонентного топлива может быть осуществлено без его предварительного распыления. При этом первичными стадиями преобразования топлива становятся

эмульгирование и предварительное испарение эмульсии. Описание процесса горения предварительно испаренной эмульсии на базе используемого в данной работе лабораторного устройства приведено в [6].

Поскольку эмульсия, подаваемая в камеру испарения, не достигает состояния равновесия "пар — жидкая фаза", максимальное испарение достигается в случае, если предположить, что температура поверхности жидкой фазы равна температуре кипения определенного компонента топлива при атмосферном давлении. В наших экспериментах температура внутри камеры составляла 500-550°C, отложения нагара на стенках камеры отсутствовали.

Эмульсии приготавливались на основе универсального моторного масла 15-W40-“SHELL” с помощью ультразвукового генератора УЗДН-1У4.2 в течение 1 часа на частоте 22кГц. Объемная концентрация воды C_b составляла 10-40%, сурфактант не использовался. Приготовленные эмульсии были белого кремового цвета и сохраняли видимую стабильность в течение двух-трех недель при 15-18°C, средний размер водных включений $\langle d_b \rangle$ составлял ~1-1,5мкм.

Проводились измерения температуры, интегральных характеристик сажеобразования, световых потоков, оптической плотности излучения, а также высоты диффузионного затопленного факела, который формировался на выходе камеры испарения. Диаметр сопла составлял 0,3 см, объемный расход V_3 горючего изменялся от 2 мм³/с до 10 мм³/с.

2.1. Было установлено, что температура во фронте имеет слабо выраженный максимум вблизи $C_b = 20-25\%$, слабо зависит от объемного расхода горючего V_3 и изменяется в пределах 1750-1850 К. Температура измерялась методом обращения спектральной линии Na с помощью дифракционного спектрометра. Типичная зависимость величины T от объемного содержания воды в эмульсии для $V_3 = 5$ мм³/с представлена на рис. 1.

2.2. Сбор сажи осуществлялся методом ее осаждения на фильтр в вытяжном воздушном потоке. Общее количество сажи S, выделившееся за установленное время Δt при данных V_3 и C_b , определялось взвешиванием фильтра. Затем скорость сажевыделения, определяемая как $(S/\Delta t)_{V_3, C_b}$, сравнивалась с объемным расходом масла, содержащегося в эмульсии данной концентрации $(V_m)_{V_3, C_b}$. Как оказалось, доля образующейся при горении сажи по отношению к расходу масла в пределах ошибок эксперимента не зависит ни от C_b , ни от V_3 , и составляет ~ 0,1 мг/мм³.

2.3. Высота факела H слабо меняется с изменением концентрации H₂O и линейно растет с увеличением расхода горючего ($H = a + b \cdot V_3$), и лишь при $C_b > 30\%$ с ростом C_b высота факела начинает уменьшаться. Сказанное иллюстрируют результаты экспериментов для различных величин C_b , приведенные в табл.1.

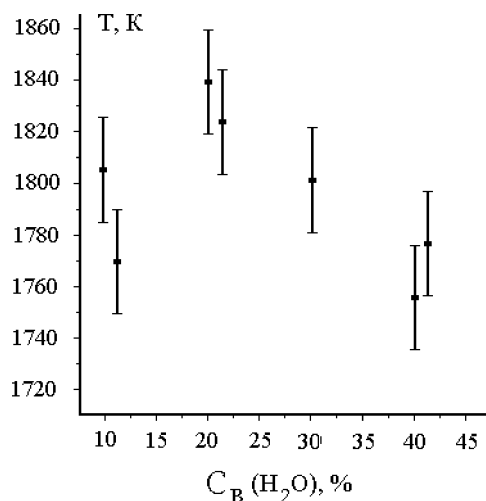


Рис. 1. Зависимость температуры во фронте факела от содержания воды в эмульсии

Таблица 1

Влияние концентрации воды и расхода горючего на линейность высоты факела

$C_B, \%$	20	30	40
a, мм	$21 \pm 1,3$	24 ± 3	24 ± 4
b, $c/мм^2$	$9,8 \pm 0,2$	$9,4 \pm 0,6$	$5,5 \pm 0,7$

Не очевидным результатом является то, что при $V_3 \rightarrow 0$ высота факела $H \rightarrow 24$ мм, а не к нулю, как это следует из теоретических соображений.

2.4. Интегральный световой поток Φ , измеренный в области длин волн 2-20 мкм, линейно возрастает с расходом горючего. Однако, отношение $\alpha = \Phi/H$ слабо уменьшается с ростом V_3 и слабо зависит от C_B . Так, например, увеличение V_3 в 5 раз приводит к уменьшению $\alpha = \Phi/H$ лишь в 1,3 — 1,4 раза. Полученный результат можно интерпретировать следующим образом. Величина α пропорциональна интегральной светимости R , которая, в соответствии с законами теплового излучения, определяется соотношением $R = \epsilon \cdot \sigma \cdot T^4$. Температура T (см. пункт 2.1) слабо зависит от C_B и V_3 . Интегральная испускательная способность ϵ пропорциональна произведению концентрации частиц сажи N_k и кубу их среднекубического размера $\langle d^3 \rangle$. Несложно убедиться, (см. пункты 2.2, 2.3), что величина ϵ также должна слабо зависеть от C_B и V_3 .

2.5. При измерениях экстинкции излучения, оказалось, что оптическая плотность пламени $\beta \cdot l$ при фиксированном V_3 и λ является сильной функци-

ей объемного содержания воды в эмульсии, в то время как другие параметры системы слабо зависят от C_v (l — удвоенная толщина фронта факела, λ — длина волны).

Таблица 2

Оптическая плотность пламени в зависимости от содержания воды.

$C_v, \%$	10	20	30	40
$\beta/l (\lambda=0,45 \text{ мкм})$	$0,48 \pm 0,05$	$0,3 \pm 0,05$	$0,2 \pm 0,04$	$0,11 \pm 0,03$

Полученные результаты могут оказаться полезными при построении теоретических моделей сажеобразования и при решении практических задач.

Литература

1. Основы горения углеводородного топлива. Под редакцией Л.Н. Хитрина и В.А. Попова. Издательство иностранной литературы, Москва, 1960.
2. В.И. Частухин, В.В. Частухин. Топливо и теория горения. Киев, Головное издательство издательского объединения "Выща школа", 1989.
3. О.Н. Лебедев. Некоторые особенности горения водотопливных эмульсий в дизелях. Физика горения и взрыва, 1978, т.14, №2.
4. А.Я. Исаков. Некоторые особенности микровзрыва капли водотопливной эмульсии. Физика горения и взрыва, 1985, т.21, №1.
5. С.К. Law, С.Н. Lee, and N. Srinivasan. Combustion characteristics of "water-in-oil" emulsion droplets. Combustion and flame, v.37, №2, 1980.
6. В.Г. Скогарев. Стационарное горение предварительно испаренной водотопливной эмульсии. Дисперсные системы. XVII конференция стран СНГ. 23-27 сентября 1996г. Тезисы докладов.

Skogarev V. G., Florko A. V.

The torch stationary combustion of liquid compound hydrocarbon fuel

SUMMARY

The method of liquid fuel burning without preliminary dispersion has been observed. The validity of emulsification and preliminary evaporation of heavy-oil fuel has been adduced. Diffusion flame emission of water-in-oil emulsion has been investigated in fuel consumption range ($2 \text{ mm}^3/\text{s}$ to $10 \text{ mm}^3/\text{s}$). It has been shown that temperature and torch length were not been affected by emulsion water content, while flame transparency increased. The soot deposition in the evaporation chamber was absent. Water content and fuel consumption did not affect the ratio of forming soot mass fraction to oil consumption.

В. Г. Скогарев, О. В. Флорко

**Факельне стаціонарне горіння рідкого багатокомпонентного
вуглеводневого палива**

АНОТАЦІЯ

Розглянуто механізм спалювання рідкого палива без його первинного розпилення. Обґрунтовано застосування попереднього випарування емульсії, що створена на базі вязкого вуглеводневого палива. Оптичними методами проведено виміри температур, світлових потоків та оптичної густини світлового випромінювання дифузійного факелу водопаливної емульсії у діапазоні витрат палива від 2 мм³/с до 10 мм³/с.

Залежність температури та висоти факелу від концентрації води у емульсії є досить слабкою, у той час як прозорість полум'я зростає з підвищенням вмісту води. Відклад нагару у камері випарування відсутній, а частка сажі що створюється, по відношенню до витрат масла не залежить від вмісту води та витрат масла.

Skogarev V. G., Florko A. V.

The torch stationary combustion of liquid compound hydrocarbon fuel

Summary

The method of liquid fuel burning without preliminary dispersion has been observed. The validity of emulsification and preliminary evaporation of heavy-oil fuel has been adduced. Diffusion flame emission of water-in-oil emulsion has been investigated in fuel consumption range (2 mm³/s to 10 mm³/s). It has been shown that temperature and torch length were not been affected by emulsion water content, while flame transparency increased. The soot deposit in the evaporation chamber was absent. Water content and fuel consumption did not affect the ratio of forming soot mass fraction to oil consumption.

Г. С. Драган

Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова, г. Одесса

Влияние обработки частиц твердого топлива водными растворами калийсодержащих соединений на кинетику их воспламенения и горения

В работе приведены результаты экспериментального исследования влияния обработки частиц кокса водными растворами K_2CO_3 и $KMnO_4$ на их окисление, воспламенение и горение. Показано, что обработка приводит к интенсификации окислительных процессов, к снижению температуры воспламенения и к увеличению константы скорости горения. Это объясняется повышением концентрации парамагнитных центров на поверхности углерода в результате карботермического восстановления калия на поверхности углерода.

Присадка в виде водного раствора карбоната калия используется в генераторах плазмы на твердом топливе с целью повышения электропроводности [1], несмотря на то, что пары воды снижают температуру плазмы продуктов сгорания. Наряду с тем, взаимодействие соединений щелочных металлов на поверхности твердого топлива приводит к каталитической активизации химических процессов [2]. Поэтому считалось целесообразным вводить легкоионизирующуюся присадку путем обработки порошкообразного топлива водными растворами калийсодержащих соединений по методике, предложенной в [3].

Настоящая работа посвящена исследованию влияния обработки частиц кокса Московского коксогазового завода калийсодержащими соединениями на кинетику низкотемпературного окисления, воспламенения и горения.

1. Низкотемпературное окисление и воспламенение

Настоящий раздел посвящен исследованию влияния калийсодержащих соединений на процессы низкотемпературного окисления и воспламенения частиц кокса. Рассмотрим методику и результаты экспериментов. Проба порошка после дисперсного анализа делилась на три части и помещалась в кюветы. В одну из кювет заливался водный раствор K_2CO_3 из расчета, чтобы вес сухого остатка K_2CO_3 составлял 6-10 % веса кокса. Вторая кювета заправлялась аналогичным образом раствором марганцевоокислого калия. После тщательного перемешивания суспензии помещались в термостат и выдерживались при температуре 335-400 К в течение 36-48 часов. Параллельно для контрольных измерений в термостат помещалась третья кювета,

смоченная таким же количеством чистой дистиллированной воды, что и другие. В процессе сушки порошок разрыхлялся. После сушки порошки просеивались через сито для разрушения конгломератов.

Эксперименты проводились на установке, содержащей муфельную печь и системы регулирования и контроля температуры. Температура воздуха в печи устанавливалась равной 873 К, 973 К, и 1073 К. В алундовые лодочки помещалось по 200 мг чистого кокса и кокса, обработанного растворами. Предполагалось, что поверхность всех частиц кокса равнодоступна окислителю. Время окисления равнялось 200 с. По истечении заданного времени лодочки с образцами взвешивались и определялась масса окисленного порошка.

При всех температурах масса окислившегося кокса после обработки растворами оказывалась больше, чем в контрольной пробе, что свидетельствует о влиянии обработки на процессы низкотемпературного окисления. На рисунке 1 представлены результаты измерений массы окислившегося порошка (Δm_2) в зависимости от температуры воздуха в печи. Для наглядности данные экспериментов представлены по отношению к массе окислившегося за то же время чистого кокса (Δm_1). Как видно из рис. 1 наиболее существенное влияние обработки на окисление наблюдается в области пониженных температур, причем раствор KMnO_4 оказывается более эффективным, чем K_2CO_3 .

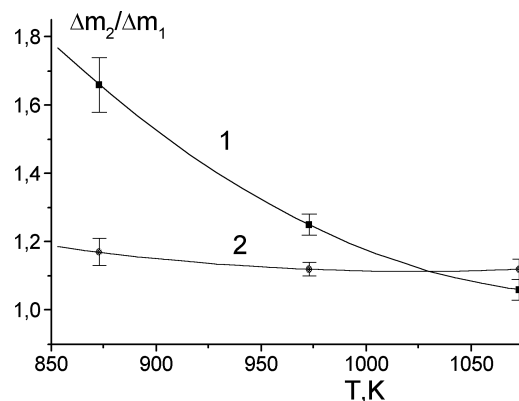


Рис.1. Зависимости относительной массы окислившегося кокса от температуры. (1 — порошок кокса обработанный раствором KMnO_4 , 2 — раствором K_2CO_3 от размера)

При температуре превышающей 1000К-1050К в обоих случаях масса окислившегося кокса увеличивается на 10%-15%. Очевидно, что если при низкотемпературном окислении реагирует большая масса обработанного кокса, чем чистого, то это свидетельствует о каталитическом влиянии соединений калия на процессы химического реагирования. В связи с этим можно ожи-

дать, что обработка кокса изучаемыми растворами приведет и к изменению периода индукции воспламенения. Остановимся теперь на результатах экспериментального исследования влияния обработки частиц кокса водными растворами K_2CO_3 и $KMnO_4$ на период индукции воспламенения ($\tau_{инд}$). Для проведения экспериментов использовался трековый метод В.А.Федосеева. Печь позволяла нагревать воздух до температуры, равной 1350 К. Температура воздуха измерялась хромель–копелевой термопарой. Частицы вводились в трековую трубку при помощи модифицированного вибрационного датчика. Треки фотографировались на движущуюся пленку скоростным фоторегистратором СФР-1. Результаты измерения периода индукции воспламенения ($\tau_{инд}$) частиц чистого кокса (1), обработанного растворами K_2CO_3 (2) и $KMnO_4$ (3) в зависимости от их размера представлены на рисунке 2. Как видно из графиков, обработка кокса не приводит к однозначному результату. Действительно $\tau_{инд}$ частиц обработанного кокса размером от 20 до 80 мкм превышает $\tau_{инд}$ чистого кокса, при этом различие достигает 40 %.

Можно полагать, что обработка частиц данного размера приводит к ингибирующему воздействию калийсодержащих соединений на кинетику химических реакций. Обратная ситуация имеет место для частиц, размер которых превышает 100 мкм. Период индукции таких частиц, обработанных исследуемыми растворами, оказывается меньше, чем для частиц чистого кокса.

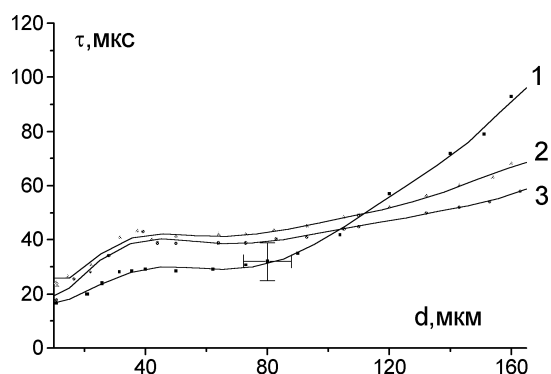


Рис. 2. Зависимости периода индукции воспламенения частиц чистого кокса (1), обработанных раствором K_2CO_3 (2) и $KMnO_4$ (3), от их размера.

Для частиц с размером превышающим 160 мкм эффект достигает 100%. Проведенные эксперименты свидетельствуют о влиянии калийсодержащих соединений на кинетику предпламенных процессов. Можно предположить, что осаждение K_2CO_3 или $KMnO_4$ на поверхность мелких частиц оказывает ингибирующее действие за счет тепловых эффектов. Часть энергии химичес-

ких реакций идет на нагрев соли и поэтому происходит задержка их воспламенения. Частицы крупных размеров имеют более пористую структуру в результате чего соль не покрывает полностью их поверхность. На поверхности вероятно проявляется химическое взаимодействие между углеродом и калийсодержащими соединениями.

Зависимость периода индукции воспламенения частиц кокса от поверхностных процессов, протекающих при их нагреве в окислительной среде в присутствии калийсодержащих соединений, свидетельствует о возможном влиянии обработки на температуру воспламенения частиц. Последняя является важным параметром, характеризующим реакционную способность топлива и используется при расчете камер сгорания.

2. Температура воспламенения и время горения

Температура воспламенения равно как и время горения частиц определялись на трековой установке. Опыты проводились с использованием частиц кокса; обработанного растворами K_2CO_3 и $KMnO_4$. Были выбраны фракции порошка 50 — 63 мкм, 63 — 80 мкм, 100 — 160 мкм. После обработки коксового порошка водными растворами калийсодержащих соединений температура воспламенения частиц кокса снижается. Результаты исследований представлены на рис.3.

Фракция коксового порошка 50 — 63 мкм, обработанного раствором $KMnO_4$, стабильно воспламеняется при температуре воздуха на 80° ниже, чем чистый кокс (кривая 1). Кокс, обработанный раствором K_2CO_3 (кривая 2), воспламеняется при температуре на 60° ниже, чем чистый кокс. Коксовый порошок фракции 63 — 80 мкм после обработки раствором K_2CO_3 воспламеняется при температуре воздуха на 90° ниже, чем чистый кокс, а после обработки раствором $KMnO_4$ — на 110° . Аналогично снижение температуры воспламенения кокса фракции 100 — 160 мкм. Кокс, обработанный растворами K_2CO_3 и $KMnO_4$, воспламеняется при температурах воздуха, на 110° и 120° соответственно ниже, чем чистый кокс. Причем, в некоторых случаях снижение достигает 125° .

Результаты определения температуры воспламенения частиц коксов согласуются с данными по периоду индукции воспламенения. Для более крупных частиц каталитическое влияние калийсодержащих соединений более заметно, чем для мелких частиц.

В связи с вышеизложенным, особый интерес представляет исследование влияния обработки частиц кокса на время их горения. Обработка результатов экспериментов позволила построить графики зависимостей времени горения частиц кокса от квадрата диаметра. Отметим, что экспериментальные точки хорошо укладываются на прямую. Это свидетельствует о выполнении закона Срезневского, следовательно, частицы кокса горят в диффузионном режиме. Из наклона прямых можно определить константу скорости горения (dS/dt).

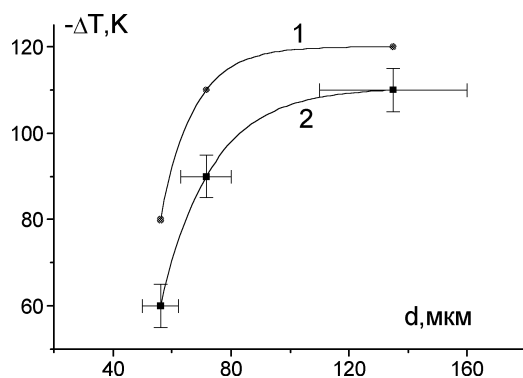


Рис. 3. Снижение температуры воспламенения частиц кокса, обработанных растворами K_2CO_3 (1) и $KMnO_4$ (2), для различных фракций частиц

Константа горения чистого кокса, полученная из обработки результатов эксперимента, равна $(0,5 \pm 0,1)10^{-6} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$; для кокса, обработанного водными растворами $KMnO_4$ и K_2CO_3 — $(1,7 \pm 0,3)10^{-6} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$ и $(2 \pm 0,4)10^{-6} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$, соответственно. Таким образом, обработка частиц кокса калийсодержащими соединениями приводит к возрастанию скорости горения частиц кокса размера 100 — 160 мкм в несколько раз.

3. Механизмы влияния обработки частиц твердого топлива на их поверхностные свойства

Из полученных результатов следует, что обработка частиц кокса водными растворами K_2CO_3 и $KMnO_4$ влияет на такие параметры воспламенения и горения, как температура воспламенения, период индукции воспламенения и время горения частиц. Причем, влияние обработки особенно заметно на стадии низкотемпературного окисления. При окислении коксового порошка масса окислившегося кокса с обработкой всегда превышает таковую для чистого кокса. Заметно снижается температура воспламенения, достигая максимального снижения (до 120 К) для крупных частиц размером 100-160 мкм. Формально это можно объяснить изменением эффективной энергии активации, величину которой можно найти по результатам экспериментов. Действительно, температура воспламенения частиц кокса, в приближении равнодоступной поверхности определяется соотношением [4]:

$$\left[\frac{d}{T} \right]^2 \cdot \exp\left(-\frac{E}{R \cdot T}\right) = A \quad (1)$$

где: константа А включает физико- химические величины исследуемых частиц, не имеющие в данном конкретном случае принципиального значения;

E — энергия активации, равная для кокса [5] — 140030 Дж/моль; d — эффективный диаметр частицы; T — температура воспламенения.

Константа A определялась по известной величине T для частиц кокса заданного размера и равнялась $5,9 \cdot 10^{-10}$ мкм²/ К². Далее используя график зависимости $2 \cdot \ln(d / (T - \Delta T(d)))$ от $1 / (T - \Delta T(d))$ можно найти эффективную энергию активации $E_{\text{эфф}}$ обработанных частиц кокса. Данные эксперимента позволили получить значение $E_{\text{эфф}} = (95 \pm 5)$ кДж/ моль. Отметим также, что обработка неоднозначно влияет на период индукции и время горения частиц. Для более мелких частиц обработка ведет к увеличению периода индукции и времени сгорания, а для частиц размером более 100 мкм наблюдается снижение до 50%-100%. Можно предположить, что механизмы влияния обработки на кинетические параметры воспламенения и горения заложены в изменении поверхностных свойств частиц кокса. Поверхностные свойства частиц определяют реакционную способность топлива. Как показано в работе [6], на поверхностные свойства влияет даже способ измельчения угля. Исследования концентрации парамагнитных центров на поверхности частиц методом ЭПР показывает, что увеличение реакционной способности угля объясняется наличием разорванных связей углерода с неспаренными электронами. Для выяснения механизмов поверхностных процессов проводились исследования зависимости концентрации парамагнитных центров на поверхности частиц кокса от температуры термообработки порошков.

Эксперименты проводились на радиоспектрометре РЭ-1301. Пробы порошков нагревались до заданной температуры и выдерживались в течение 10 минут. Затем проба подвергалась резкому охлаждению и образцы пробы запаивались в вакуумированную ампулу. Наблюдалась сигналы ЭПР углерода, по контуру линий которых рассчитывались концентрация парамагнитных центров кокса.

Результаты экспериментов показаны на рисунке 4. Кривая 1 описывает зависимость концентрации парамагнитных центров $N_{\text{ц}}$ чистого кокса от температуры термообработки; кривая 2 — смеси кокса с сухим порошком K_2CO_3 (10% по весу) и кривая 3 — кокса, обработанного водным раствором K_2CO_3 (10% K_2CO_3 по весу).

Как видно из графиков, с повышением температуры термообработки $N_{\text{ц}}$ для чистого кокса возрастает и при температуре 400 °С достигает максимума. При температуре выше 700°С сигнал ЭПР исчезает. Механическая смесь кокса с порошком K_2CO_3 дает ЭПР- сигнал, аналогичный чистому коксу. Наблюдается некоторое повышение $N_{\text{ц}}$ при температуре выше 400 °С и уменьшение $N_{\text{ц}}$ — при более высоких значениях температуры.

Наиболее заметное увеличение $N_{\text{ц}}$ происходит при обработке кокса раствором K_2CO_3 . Кривая зависимости носит практически линейный характер с небольшим максимумом, совпадающим с максимумом для чистого кокса.

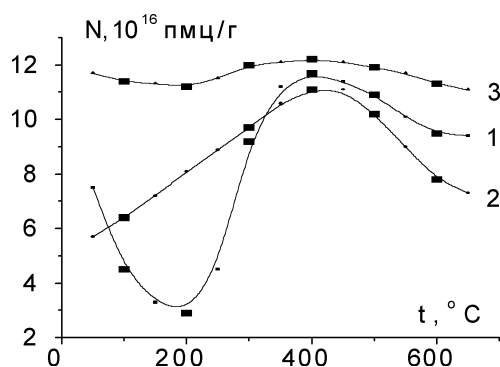
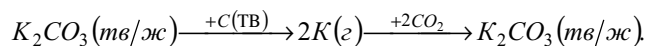


Рис. 4. Зависимость концентрации парамагнитных центров от температуры термообработки (1 — чистый кокс; 2 — механическая смесь кокса с K_2CO_3 ; 3 — кокс, обработанный раствором K_2CO_3)

Известно [7], что кокс является полимером с плоскими ароматическими сетками атомов углерода и с боковыми линейными органическими цепями. Энергия связи атомов в сетке и энергия боковых цепей различны. Поэтому при различной температуре термообработки разрываются те или иные связи. До температуры равной $350^{\circ}C$, разрушаются только периферийные части макромолекулы кокса, а при температуре выше $450^{\circ}C$ резко растет количество углеродных сеток, снижая тем самым концентрацию парамагнитных центров.

Анализируя результаты экспериментов, можно заключить, что рост N_{II} чистого кокса на первом этапе связан с перегруппировкой боковых цепей макромолекулы кокса, которая приводит к образованию свободных радикалов. Эти радикалы имеют неспаренные электроны и являются парамагнитными центрами. При более высокой температуре разрушение боковых цепей завершается и начинается формирование новых углеродных сеток, что ведет к снижению неспаренных связей и, соответственно, парамагнитных центров. Обработка поверхности кокса водным раствором карбоната калия приводит к тому, что на поверхности осажается K_2CO_3 , который может находиться также в порах частиц. При повышении температуры K_2CO_3 играет роль катализатора. Согласно [2, 8], карботермическое восстановление окисленной формы катализатора происходит по циклической схеме:



Таким образом, механизм каталитического влияния карбоната калия на низкотемпературное окисление и горение частиц кокса можно представить в виде указанной циклической схемы, описывающей восстановление катализатора углеродом с последующим окислением его кислородсодержащим

газом. Причем необходимым условием газокарбидного механизма карботермического восстановления является восстановление карбоната калия до газообразного калия. Вероятно, что процесс карботермического восстановления калия сопровождается образованием новых парамагнитных центров на поверхности частиц кокса за счет разрыва углеродных связей. Это приводит к активации процесса низкотемпературного окисления кокса и снижению температуры воспламенения, периода индукции и времени горения частиц кокса. Здесь уместно обратить внимание на противоречивые результаты, полученные для мелких частиц кокса, для которых период индукции и время горения обработанных частиц увеличиваются. Это можно объяснить тем, что наличие K_2CO_3 на поверхности мелких частиц нарушает тепломассообмен. Кристаллы калийсодержащих соединений покрывают значительную часть поверхности топлива и часть энергии химических реакций идет на нагрев катализатора, а при горении частиц — на диссоциацию.

Литература

1. Стырикович М.А., Захарко Ю.А., Мостинский И.Л. и др. Проблемы ввода и вывода ионизирующей присадки на установке У-25 //ТВТ. 1974. Т.12, №2. С440-445.
2. Львов Б.В., Илюхин А.В., Штэрк Х.И. Каталитическая активность соединений щелочных и щелочно-земельных металлов при окислении графита диоксидом углерода //ХТТ. 1988. №1. С118-121.
3. Исследование влияния реакционной способности и поверхностных свойств диспергированного угля на скорость его горения в различных средах. Отчет ОГУ по теме 01.03.523. Одесск.государств. университет. ГР 01870088653. 1989. 64с
4. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987. 502 с.
5. Головина Е.С. Высокотемпературное горение и газификация углерода. М.: Энергоатомиздат, 1983. 173 с.
6. Курятников В.В. Применение метода ЭПР для исследования реакционной способности угля струйного помола // Физика аэродисперсных систем. Киев-Одесса: Вища школа, 1977. В.15. С59-62.
7. Сидоров А.А., Ануфриенко В.Ф. Изучение спектров ЭПР углей и полукоксов //Кинетика и катализ. 1966. Т.7, №6.
8. Горинчук В.Е., Драган Г.С., Каримова Ф.Ф. О механизме каталитического влияния карбоната калия на воспламенение и горение угольной частицы //Физика аэродисперсных систем. Одесса. 1996. В.35. С46-52.

Г. С. Драган

Вплив обробки часток твердого палива водяними розчинами з'єднань, що містять калій, на кінетику їхнього запалення і горіння

АНОТАЦІЯ

У роботі приведені результати експериментального дослідження впливу обробки часток коксу водяними розчинами марганцевокислого калію та карбонату калія на їхнє окислювання, запалення і горіння. Показано, що обробка приводить до інтенсифікації окисних процесів, до зниження температури запалення і до збільшення константи швидкості горіння. Це пояснюється підвищенням концентрації парамагнітних центрів на поверхні вуглецю в результаті карботермічного відновлення калію на поверхні вуглецю.

Dragan G.

Influence of solid fuel particles processing by water solutions of K_2CO_3 and $KMnO_4$ on kinetics of their inflammation and burning

SUMMARY

The experimental results of coke particles processing by water solutions of manganese, potassium influence on their oxidation, inflammation and burning are presented. It has been shown, that such processing lead to intensification of oxidizing processes, to decrease of inflammation temperature and to increase of burning rate constant. This is explained by rise of paramagnetic centers concentration on carbon surface due to carbotermic reduction of potassium on carbon surface.

В. Г. Шевчук, Л. В. Бойчук, С. Ю. Иванов

Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова

Естественно-конвективная неустойчивость в горящих пылях

Экспериментально изучено влияние естественной конвекции на процесс распространения пламени в горящих пылях в трубах и свободных облаках. Установлено, что в полуоткрытых трубах при зажигании взвеси у нижнего открытого конца естественная конвекция не оказывает влияния на процесс горения. При зажигании у верхнего открытого конца такое влияние имеет место для низкоскоростных смесей. В свободных облаках аэровзвесей свободная конвекция проявляется во всплывании горящего очага на стадии распространения пламени только в низкоскоростных смесях.

При распространении пламени по аэровзвеси твердых частиц в зависимости от физико-химических параметров взвеси (сорт, дисперсность, концентрация горючего), а также от условий организации процесса горения возможна реализация ламинарного, вибрационного или турбулентного режима. Эти режимы являются предельными с точки зрения гидродинамики и хорошо изучены как в экспериментальных, так и в теоретических работах [1-7]. Смена режимов распространения пламени обуславливается развитием различного вида неустойчивостей. Так, например, акустическая неустойчивость является причиной перехода от ламинарного режима к вибрационному в трубах при зажигании взвеси у открытого конца трубы [4]. Вынужденная конвекция, обусловленная тепловым расширением продуктов сгорания в направлении движения исходной смеси, вызывает переход от ламинарного к турбулентному режиму горения в полуоткрытых трубах при зажигании взвеси у закрытого конца [4] и в свободных облаках при зажигании в центре облака [5].

Влияние естественной конвекции на процесс распространения пламени в газовзвесах вообще не изучалось. Аналогичные исследования в газофазных горючих системах проводились в трубах при различных ориентациях скорости распространения пламени и вектора силы тяжести [8], для газофазных горючих облаков имеются только косвенные свидетельства [9] влияния естественной конвекции для медленно горящих смесей.

В настоящей работе представлены результаты экспериментальных исследований роли естественной конвекции в процессах распространения пламени в аэровзвесах частиц твердых горючих в полуоткрытых трубах (А) и в свободных облаках (В). Исследовались мелкодисперсные порошки алюми-

ния, магния, циркония, железа, бора и некоторых полимеров (витан, финилон, полистирол и др.).

А. Опыты проводились по схеме вертикальных труб [7] (труба длиной 1 м и диаметром 3,6 см). Взвесь воспламенялась электрической искрой.

При зажигании у нижнего открытого конца трубы нами не обнаружено влияния естественной конвекции на процесс горения для всех исследованных горючих, в том числе и для наиболее медленно горящих аэровзвесей железа и механических смесей В+Mg, В+Al, для которых нормальные скорости пламени $U_H \sim 0.07$ м/с. Для объяснения этого эффекта оценим характерные времена развития конвекции в продуктах сгорания t_k и распространения пламени t_Γ :

$$t_k \approx \frac{U_H \varepsilon}{g}, \quad t_\Gamma = \frac{\delta_T}{U_H},$$

где δ_T — тепловая ширина пламени, ε — степень теплового расширения продуктов сгорания.

Условие отсутствия конвекции:

$$t_k \geq t_\Gamma, \text{ т.е. } \frac{U_H \varepsilon}{g} \geq \frac{\delta_T}{U_H}$$

или

$$\frac{\varepsilon U_H^2}{g \delta_T} \geq 1. \quad (1)$$

Оценим значение этого критерия для характерных параметров пламени: $U_H \approx 0,1$ м/с; $\varepsilon \approx 10$; $\delta_T \approx 0.002$. Тогда:

$$\frac{\varepsilon U_H^2}{g \delta_T} = 5.$$

Т.е. практически всегда при распространении пламени против вектора силы тяжести естественная конвекция не проявляется, как это имеет место и для газовых смесей [8]. По крайней мере для этого необходимы очень маленькие скорости пламени, как следует из (1) $U^{KP}_H < 0,05$ м/с.

Влияние естественной конвекция было обнаружено при организации процесса горения вдоль вектора силы тяжести и только для наиболее медленно горящих взвесей Fe+воздух в диапазоне концентраций от 150 до 180 г/м³ и В+О₂ в диапазоне концентраций от 200 до 400 г/м³. Влияние конвекции проявлялось в периодическом изменении наклона поверхности пламени по отношению к стенкам трубы. Как и в газах [8], это явление обусловлено, веро-

ятно, образованием последовательности вихрей в продуктах сгорания, появляющихся попеременно на противоположных стенках трубы. Полупериод этих колебаний $T/2 \sim 0,3$ с. Оценим характерный полупериод конвективных конвективных колебаний следуя [10]:

$$\tau_* \approx \frac{Ra^{2/3} Pr^{1/3} Re^{-1/3}}{2^{2/3} \pi \left(\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon}\right)^{2/3}}, \quad (2)$$

где $\tau_* = \frac{T}{\sqrt{D/g_0}}$; $Ra = 27 \frac{\pi^4}{4}$ — критическое число Релея; $Re = \frac{D\sqrt{Dg_0}}{\nu}$ — характерное число Рейнольдса данной задачи; $\nu \approx 5,4 \cdot 10^{-4}$ м²/с- кинематическая вязкость продуктов сгорания, D — диаметр трубы, $Re \approx 40$; $Pr \approx 1$. Тогда:

$$T/2 \approx \sqrt{\frac{D}{g_0}} \left(\frac{Ra}{2\sqrt{Re}}\right)^{2/3} \frac{1}{\pi} \approx 0,24 \text{ с,}$$

что соответствует наблюдаемому значению.

Естественно, вследствие трения о стенки трубы, дополнительные энергетические затраты оказывают более жесткие условия на развитие конвекции по сравнению со свободными очагами горения.

В. Опыты проводились на малообъемной (начальный размер облака: $V_0 = 5 \cdot 10^{-3}$ м³; $R_0 = 0,1$ м) и крупномасштабной (облака объемом до 40 м³) установках [5]. В данных опытах влияние естественной конвекции должно проявляться во всплывании горящего очага еще на стадии распространения пламени по облаку.

Для облаков аэровзвесей условие отсутствия конвекции $t_k \geq t_\Gamma$ приводит к следующему выражению:

$$\frac{\bar{U}_B}{g} \leq \frac{R}{\bar{U}_B},$$

здесь \bar{U}_B — средняя видимая скорость пламени.

Отсюда критический размер горячей зоны R^{KP} , при которой может развиваться конвекция:

$$R^{KP} = \frac{\bar{U}_B^2}{g}. \quad (3)$$

Экспериментальные исследования, проведенные на малообъемной установке для быстро горящих аэровзвесей Al, Mg, Zr, алюмомагниевого сплава, характерные видимые скорости пламени в которых превышали 2 м/с,

конвекция в процессе горения не обнаруживалась. Это легко понять, исходя из (3). Например, для аэровзвеси алюминия (АСД-4) при $V=200 \text{ г/м}^3$ $\bar{U}_B=1,9 \text{ м/с}$, $R^{KP}=0,36 \text{ м}$ и значительно превосходит начальный размер облака.

Эти эффекты проявляются только в медленно горящих облаках, для которых, в соответствии с выражением (3), видимая скорость пламени $\bar{U}_B \leq 1 \text{ м/с}$. Все сказанное выше иллюстрируют установленные в ходе опытов экспериментальные данные (таблица 1).

Таблица 1

Параметры горения малообъемных облаков

Горючее	$V, \text{ г/м}^3$	$U_B, \text{ м/с}$	$R^{KP}, \text{ м}$	$R_{\text{экс}}, \text{ м}$
В+Mg (50%/50%) + + воздух	100	0.61	0.035	0.055
	200	1.19	0.14	не набл.
	300	1.62	0.17	не набл.
В+Mg (20%/80%) + + воздух	100	0.69	0.045	0.06
	200	2.16	0.47	не набл.
	300	3.64	1.32	не набл.
В+Al (80%/20%) + +60% O ₂	200	0.8	0.064	0.075
В+100% O ₂	250	0.7	0.05	0.08

Для общности полученных результатов исследовалось распространение пламени в газовзвесах порошкообразных полимеров. Исследовались порошки следующих веществ: витан ($d_{10}=13 \text{ мкм}$); полистирол ($d_{10}=9 \text{ мкм}$); полиэтилен ($d_{10}=8 \text{ мкм}$); полихлорвинил ($d_{10}=7,7 \text{ мкм}$); финилон ($d_{10}=8,6 \text{ мкм}$); фторопласт ($d_{10}=1,7 \text{ мкм}$). В условиях малообъемной установки с использованием искрового зажигания не удалось организовать устойчивое распространение пламени именно в силу естественной конвекции. Очаг горения при $R \geq 0,03 \div 0,04 \text{ м}$ терял сферическую форму, происходило его всплывание с разрушением сферической формы очага. Устойчивое распространение пламени наблюдается только в аэровзвеси частиц витана. При этом концентрационный предел распространения пламени составил $100 \pm 20 \text{ г/м}^3$. Видимая скорость слабо возрастала от $\sim 0,7 \text{ м/с}$ при $V=126 \text{ г/м}^3$ до $\sim 1 \text{ м/с}$ при $V=250 \text{ г/м}^3$. Причем для аэровзвесей с концентрацией $V \approx 120 \div 140 \text{ г/м}^3$ при $R \approx 0,055 \text{ м}$ наблюдалось конвективное всплывание очага горения уже в процессе распространения пламени; при $V \geq 150 \text{ г/м}^3$ и $\bar{U}_B \sim 1 \text{ м/с}$ конвекция очага наблюдается только после полного сгорания облака, что соответствует выводам, сделанными для металлов.

Результаты исследований в крупномасштабных облаках существенным образом зависят от того, в каком режиме (ламинарном или турбулентном) происходит горение облака. Например, для аэровзвесей частиц алюминия

АСД-1 и ПА-4 видимые скорости в режиме ламинарного горения находятся в диапазоне $\bar{U}_B = 3 \div 7$ м/с, соответственно $R^{KP} = 0,9 \div 4,9$ м. Т.е. в этом случае выполняется условие для проявления естественной конвекции, которая проявляется в виде всплывания горящего ядра еще на стадии распространения пламени по облаку. Результаты проведенных исследований приведены в таблице 2.

Таблица 2

Параметры горения крупномасштабных облаков

Горючее	$V, \text{ г/м}^3$	$U_B, \text{ м/с}$	$R^{KP}, \text{ м}$	$R_{\text{экс}}$	$R_{\text{экс}}/R^{KP}$
ПА-4	160	3	0.9	1.2	1.6
	200	3.8	1.4	1.68	1.2
	240	4	1.6	1.96	1.23
	260	4.4	1.93	2.13	1.1
	280	4.6	2.1	не набл.	
	350	7	4.9	не набл.	
	370	7.8	6	не набл.	
АСД-1	200	2.5	0.625	1.08	1.7
	250	3.8	1.44	1.88	1.3
	350	10	10	не набл.	

Для аэровзвесей быстро горящих порошков АСД-4, ПАП-1, ПАП-2; АМД, которые горят в турбулентном режиме с видимой скоростью более 10 м/с, естественная конвекция наблюдается только после полного сгорания облака и проявляется в виде всплывания и последующего образования вихревого кольца в облаке продуктов сгорания.

Фактически начало конвективного всплывания очага горения в газозвеси удается наблюдать только в низкоскоростных пылевых взвесах, для которых характерен ламинарный режим распространения. Однако в достаточно протяженных облаках ламинарный режим переходит в турбулентный при

$Re = \frac{\bar{U}_{\%} R_*}{\nu} = 10^5$ [5]. При этом вопрос о том, что произойдет раньше — всплывание очага горения или переход в быстрый турбулентный режим зависит от соотношения:

$$\Pi = \frac{R_*}{R^{KP}} = \frac{10^5 \nu g}{\bar{U}_B^3}. \quad (4)$$

Если $\Pi < 1$, то роль турбулентности преимущественна и естественная конвекция практически не влияет на динамику горения большого очага. Из (4) следует, что $\Pi = 1$ соответствует $\bar{U}_B^{KP} \approx \sqrt[3]{10^5 \nu g} \sim 4,1$ м/с. Указанное значение хорошо коррелирует с представленными в предыдущей таблице данными о влиянии естественной конвекции.

Заключение

Естественная конвекция налагает определенные ограничения на возможность организации процесса горения в облаке при локальном источнике зажигания малой мощности. Когда пламя распространяется в ламинарном режиме, не удастся организовать изотропного распространения пламени в облаке. Причем, для смесей с нормальной скоростью горения около 0,07 м/с (борные и железные смеси) конвекция вообще приводит к гашению облака. Для смесей с $U_H \geq 0,12$ м/с (крупнодисперсный алюминий) процесс горения хотя не носит изотропный характер, однако распространяется на весь объем горючей смеси. Для быстрогорящих аэрозвесей Al, Zr, Mg и алюмомагние-вых сплавов процесс носит изотропный характер, а сама естественная кон-векция могла бы проявиться только для очень больших облаков с $R_0 > 10$ м. *Работа выполнена при поддержке INTAS (грант ESA 99-00138).*

Литература

1. Cassel H.M. Some Fundamental Aspects of Dust Flames // U.S. Dept. of the Interior Bureau of Mines. Report of Investigations. 1964. N6551. P.1-51.
2. Bartkeht W. Preventive and Design Measures for Protection Against Dust Explosions // Industrial Dust Symp. 1987. P.158-190.
3. Горошин С.В., Шевчук В.Г., Агеев Н.Д. Вибрационное горение аэрозвесей // Физика горения и взрыва. 1981. Т.17,№6. С.15-20.
4. Шевчук В.Г., Кондратьев Е.Н., Бойчук Л.В. Высокоскоростные режимы волнового горения газовзвеси в полузакрытых трубах // Физика горения и взрыва. 1986. Т.22,№2. С.40-45.
5. Шевчук В.Г., Безродных А.К., Кондратьев Е.Н. Горение аэрозвесей частиц алюминия в свободном объеме // Физика горения и взрыва. 1986. Т.22,№5. С.40-43.
6. Шевчук В.Г., Безродных А.К., Бойчук Л.В. О механизме ламинарного пламени в аэрозвесах металлических частиц // Физика горения и взрыва. 1988. Т.24,№2. С.85-89.
7. Асланов С.К., Шевчук В.Г., Бойчук Л.В., Костышин Ю.Н. Закономерности вибрационного горения аэрозвесей // Физика горения и взрыва. 1993. Т.29,№2. С.30-36.
8. Аbruков С.А., Самсонов В.Д. Закономерности вихреобразования за фронтом пламени // ПМТФ. 1985. №6. С.68-72.
9. Иващенко П.Ф., Румянцев В.С. Конвективный подъем и скорость распространения большого очага горения // Физика горения и взрыва. 1978. Т.14,№3. С.83-87.
10. Копылов Г.Г., Махвиладзе Г.М., Мелихов В.И., Мелихов О.И. Численное исследование формирования и распространения очагов горения в замкнутых объемах в условиях естественной конвекции. 1984. (Препр. / ИПМ АН СССР).

В. Г. Шевчук, Л. В. Бойчук, С. Ю. Іванов

Натурально-конвективна нестійкість в горючих пилах

АНОТАЦІЯ

Експериментально досліджено вплив натуральної конвекції на процес розповсюдження полум'я в горючих пилах в трубах і вільних хмарах. Встановлено, що в напіввідкритих трубах при запалюванні завису біля нижнього відкритого кінця натуральна конвекція не виказує впливу на процес горіння. При запалюванні біля верхнього відкритого кінця такий вплив має місце тільки для низькошвидкісних сумішей і проявляється у періодичній зміні нахилу фронту полум'я відносно стінок труби. У вільних хмарах газозавису натуральна конвекція проявляється у впливанні вогняної кулі ще на стадії розповсюдження полум'я в низькошвидкісних сумішах.

Shevchuk V. G., Boychuk L. V., Ivanov S. Ju.

Natural-convective instability in combustible dusts.

SUMMARY

The influence of the natural convection in the process of flame propagation through combustible dust clouds has been experimentally investigated. Combustion process has not been influenced by the natural convection in case of ignition near the open bottom of a tube. In case of ignition near the open top of a tube such influence has taken place only for slow-burning mixtures. In unbounded dust clouds the natural convection developed as the upward motion of the fireball on the stage of flame propagation and only for slow-burning mixtures.

М. Ю. Трофименко, М. Н. Чесноков, Т. Ф. Смагленко
Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова.

Измерение излучательной способности оптически плотных пламен твердых смесевых топливных систем

Одна из основных задач при исследовании горения твердых смесевых топливных систем (ТСТС) — определение температуры пламени. Разница между расчетной термодинамически равновесной температурой и реально достигаемой в камере постоянного давления может быть значительна и зависит не только от рецептуры состава и технологии изготовления, но и от условий горения, в частности, теплоотдачи факела в окружающую среду. В этих условиях решающее значение приобретают экспериментальные методы измерения температур.

Наибольшую ошибку в определении цветовой и яркостных температур вносит отсутствие данных об излучательной способности ϵ исследуемых оптически плотных пламен. Кроме того, необходимо учитывать рассеяние и поглощение излучения частицами дыма в более холодных внешних слоях пламени, зависящее от линейных размеров частиц, длины волны рассеиваемого света, линейных размеров дымогазовой среды и ряда других параметров [1]. Таким образом, как отмечается в работе [2], определение ϵ — отдельная сложная задача пирометрии и использование значений излучательной способности, полученных из независимых источников требует определенной осторожности.

Корректность определения цветовой температуры предполагает выполнение условия постоянства ϵ . Поэтому большую важность приобретает выяснение если не абсолютных значений излучательной способности, то, по крайней мере, характера спектральной зависимости ϵ исследуемых пламен. К сожалению, исследований такого рода мало и имеются экспериментальные данные, в основном, по оксидам металлов [3,4] и частицами сажи углеродных пламен [5] при осаждении частиц на подложки.

В этих работах установлено, что спектральная зависимость ϵ порошков оксидов в области $\lambda < 2$ мкм представляется гладкой, спадающей с ростом длины волны λ функцией.

Нами исследовались пламена, получающиеся при горении ТСТС на основе перхлората аммония с каучуковой полиакрилатной связкой в состав которых вводилась 13% добавка сферического порошка алюминия марки АСД-1. Методика проведения эксперимента аналогична указанной в работе [6]. Образец ТСТС диаметром 20 мм и высотой 20 мм сжигался в камере сгорания при давлении 4 МПа.

Сканирующим спектрофотометром регистрировались спектры излучения пламени ТСТС. Два полученных спектра излучения факела ТСТС соответствуют двум локальным объемам пламени, находящихся в факеле на разных расстояниях от поверхности образца. Спектры записывались запоминающим электронным осциллографом С 8-17. На эти спектры накладывались спектр излучения эталонной лампы СИ 10-300 и градуировочный спектр ртутной лампы.

Совместное рассмотрение спектра излучения ТСТС и спектра излучения ртутной лампы разрешает провести привязку излучения пламени по длинам волн (в данной работе по 5 точкам), а зарегистрированный на той же осциллограмме спектр излучения эталонной лампы — определить температуры локальных объемов пламени.

Определение спектрального распределения ϵ проводились нами по методике, описанной в работе [7], дающей возможность в одном и том же эксперименте одновременно определить температуру и оценить значение излучательной способности пламени.

Значение ϵ для заданных λ определяли по формуле:

$$\epsilon = \frac{e^{\frac{c_2}{\lambda T_{\text{и}}} - 1}}{e^{\frac{c_2}{\lambda T_{\text{я}}} - 1}}$$

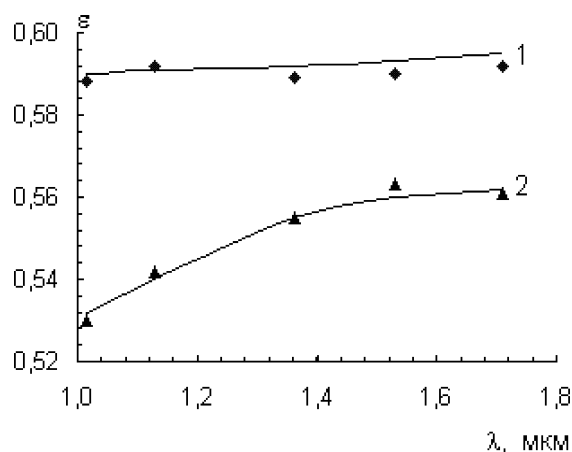
За величину $T_{\text{и}}$ берется величина $T_{\text{цв}}$, определяемая по тангенсу угла наклона экспериментально найденной зависимости $\ln b\lambda^5 = f\left(\frac{1}{\lambda}\right)$. Для обоих объемов, указанная зависимость оказалась линейной, таким образом зарегистрированное излучение близко к излучению серого тела.

В условиях эксперимента найденные значения $T_{\text{цв}}$ равнялись 1920 К и 1590 К. Полученные спектральные распределения ϵ представлены на рис.

Таким образом изменение ϵ с увеличением длины волны в интервале $\Delta\lambda = (1-2)$ мкм представляет собой гладкую монотонную слабо возрастающую зависимость ($T = 1920$ К).

Регистрируемое излучение представляет собой излучение горячей (центральной) части факела: прошедшее через холодные внешние слои. Поэтому представляется интересным оценить пропускание внешних слоев пламени со значительным содержанием К-фазы продуктов сгорания. (Под "значительным содержанием" в данном случае подразумевается такое содержание К-фазы, которое делает горящий факел оптически плотным, т.е. непрозрачным для собственного излучения пламени отраженного зеркалом).

С этой целью нами проведены измерения пропускания продуктов К-фазы осажденным на стекло.



Спектральная зависимость ϵ для пламен ТСС
1 — 1580 К; 2 — 1920 К.

Подложка из стекла помещалась в разные точки камеры сгорания. Спектральная зависимость пропускания измерялась на спектрометре СД-10. Как и следовало ожидать, экстинкция таких слоев растет в коротковолновую область.

Рост температуры центральной части факела приводит к увеличению разницы между нею и температурой наружных слоев пламени. На выходящее наружу факела излучение все большее влияние оказывает внешний холодный слой пламени. Поглощение и рассеяние наружных охлажденных слоев продуктов сгорания воспринимается при измерении, как уменьшение излучательной способности горячей (центральной) части факела.

С увеличением расстояния от поверхности образца до пиromетрируемого объема пламени изменяется поперечная структура факела. Пламя становится более однородным и, следовательно, уменьшается влияние холодной окружающей области на излучение горячего ядра. Кроме того, как отмечается в работе [8], изменяется дисперсный состав продуктов сгорания (максимум в распределении частиц сдвигается в сторону частиц с большими размерами) оксидов алюминия, составляющих значительную часть конденсированной фазы наружных слоев факела.

Таким образом, по мере увеличения разницы температур между наружными и внутренними слоями факела пропускание внешних слоев резко уменьшается с уменьшением λ и может перекрыть эффект роста ϵ с уменьшением λ излучающей центральной части факела. Это явление может служить одной из причин расхождения между абсолютными значениями и видом спектральной зависимости ϵ для порошков окислов и сажи в работах [3,4,5] и полученной нами спектральной зависимостью для пламен в камере сгорания.

Литература

1. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. — М.: Мир. — 1986. — 660 с.
2. Свет Д.Я. Оптические методы измерения истинных температур. — М.: Наука. — 1982. — 296 с.
3. Белинский Н.М., Скогарев В.Г., Флорко А.В. Излучательные характеристики окисей магния и алюминия при температурах горения // Физика аэродисперсных систем. Одесса: № 30. — С.97-99.
4. Olson O.H., Morris J. Handbook of Thermophysical Properties of Solid Materials, N.Y., Pergamon Press, 1961, V.3.
5. Блох А.Г., Журавлев Ю.А., Рыжков Л.Н. Теплообмен излучением. Энергоатомиздат. Москва. 1991. 431 с.
6. Трофименко М.Ю. Оценка температуры пламени смесевой системы по локальным флуктуациям яркости в факеле // Физика аэродисперсных систем. № 35. Одесса: — 1996. — С. 38-45.
7. Трофименко М.Ю. Исследование горения твердых смесевых систем оптическими методами // Материалы двадцать первого международного пиротехнического семинара. Москва. — 1995. — С. 884-890.
8. Чесноков М.Н. Динамика образования и физические характеристики конденсированной дисперсной фазы в низкотемпературной плазме горения модельных алюминизированных топлив. Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Одесса, 1986.

М. Ю. Трофименко, М. М. Чесноков, Т. Ф. Смазленко

Вимірювання випромінюючої здатності оптично щільних полум'я твердих сумішних паливних систем

АНОТАЦІЯ

В камері сгорання, за умов постійного тиску, досліджувалось горіння сумішевих систем на основі перхлорату амонію. При значенні тиску в 4 МПа знайдено числові значення та хвильова залежність випромінювальної здатності оптично густих полум'я. Робиться висновок, що форма, одержаної авторами хвильової залежності, значення якої зростає з ростом довжини хвилі обумовлена екстинцією випромінювання найбільш високотемпературної центральної частини факела холодним зовнішнім шаром полум'я.

Trofimenko M. Y., Chesnokov M. N., Smaglenko T. F.

Optically dense flame emissivity measurement of solid blended fuel

SUMMARY

Combustion of solid blended fuel based on ammonium perchlorate has been investigated in constant pressure chamber. Emissivity of optically dense flame has been defined in wavelength range 1.0-1.8 μm . It has been defined that emissivity increased with μ . Authors have explained this fact by extinction of flame radiation in cold boundary layer.

В. В. Головки, А. К. Копейка

Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова, Одесса

Влияние инертных добавок на критические условия воспламенения газозвеси частиц магния

Приводятся результаты экспериментального исследования процесса воспламенения газозвеси частиц магния с инертными добавками MgO и Al₂O₃. В рамках существующей модели воспламенения газозвеси горючего вводится новый обобщенный параметр, позволяющий комплексно учесть взаимное влияние частиц горючего, инертной добавки и окисляющего газа.

Особенности воспламенения газозвесей различных металлов существенным образом определяются закономерностями взаимного влияния частиц, — так называемый “коллективный эффект” [1,2]. При этом температура воспламенения газозвесей оказывается ниже, чем для одиночных частиц. Очевидно, проявление “коллективного эффекта” может не только интенсифицировать воспламенение дисперсных горючих, но и должно ингибировать этот процесс, если применить в качестве добавок к горючему инертные порошки.

В этой связи, цель настоящей работы состояла в экспериментальном и теоретическом исследовании процесса воспламенения взвеси частиц магния с дисперсными добавками MgO и Al₂O₃.

Экспериментальные исследования проводились по методике, описанной в работах [3,4]. В опытах использовались порошки Mg, которые имели средний размер 10мкм, порошки Al₂O₃ и MgO с диаметром 30мкм и 50мкм соответственно. Порошки горючего и инертных добавок смешивались в различных соотношениях таким образом, чтобы концентрация *B* горючего в облаке реакционной камеры оставалась постоянной и равной 100мг/л.

Обратимся к результатам экспериментальных исследований. На рис.1 приведены зависимость температуры воспламенения модифицированных взвесей горючего от концентрации инертной добавки. Как видно, температура воспламенения взвеси растет по мере увеличения содержания инертной добавки в смесевом составе, и оказывается выше температуры воспламенения чистой газозвеси Mg ($T_{ign} = 880\text{K}$ при $B=100\text{мг/л}$). Уровень температур воспламенения газозвеси частиц магния с добавкой дисперсного MgO ниже, при прочих одинаковых условиях, чем взвеси частиц магния с добавкой Al₂O₃ на 50÷100 градусов. Кроме того, как видно из рис.1, для газозвеси частиц магния с добавкой Al₂O₃, зависимость температуры воспламенения от концентрации добавки оказывается более сильной, чем для взвесей с дисперсным MgO. Поскольку по своим физическим свойствам добавки отличаются

лишь дисперсностью и теплоемкостью, то очевидно, именно эти факторы и оказывают основное влияние на различие в воспламенении модифицированных взвесей горючего.

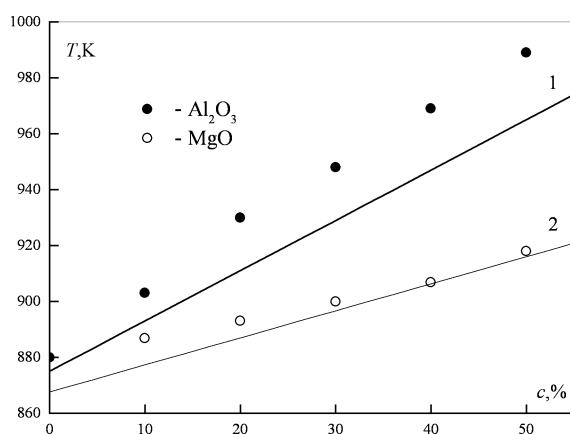


Рис. 1. Зависимость критической температуры воспламенения газозвеси частиц Mg от содержания инертной добавки. (точки — эксперимент, 1 — расчет для добавок Al₂O₃, 2 — расчет для добавок MgO)

Повышение температуры воспламенения модифицированных газозвесей по сравнению с температурой воспламенения взвеси магния, вероятно связано с отводом тепла из газовой фазы к частицам инертной добавки. Другими словами, дисперсная инертная добавка является дополнительным стоком тепла для реагирующего горючего.

Для анализа экспериментальных данных обратимся к модели воспламенения взвеси частиц горючего с инертной добавкой. Рассмотрим систему, состоящую из равномерно перемешанных частиц горючего и инертных добавок, взвешенных в окислительной среде некоторого ограниченного объема. На поверхности частиц горючего может протекать гетерогенная экзотермическая реакция. В процессе саморазогрева частиц горючего выделяющееся тепло поглощается газом, от которого в свою очередь часть тепла отдаётся в стенку реактора, а часть идёт на нагрев частиц инертной добавки. Уравнения, описывающие баланс тепла для частиц и газа в сложившейся ситуации, имеют следующий вид:

$$m_f c_f \frac{dT_f}{dt} = q(T_f) - \alpha_f \sigma_f N_f (T_f - T_g),$$

$$m_g c_g \frac{dT_g}{dt} = \alpha_f \sigma_f N_f (T_f - T_g) - \alpha_w S (T_g - T_0) - \alpha_n \sigma_n N_n (T_g - T_n).$$

Где m_i , c_i , T_i — масса, теплоемкость и температура горючего ($i=f$), инертной добавки ($i=n$) и газа ($i=g$), T_0 — температура стенки реактора, N_i — число частиц горючего и инертной добавки, σ_i — площадь поверхности частиц, α_f и α_n — коэффициенты теплообмена между конденсированными частицами и газом, α_w — коэффициент теплообмена между газом и стенкой, S — площадь поверхности стенок реактора, $q(T_f)$ — тепловыделение за счет химической реакции на поверхности частиц горючего, t — время.

Критические условия воспламенения определяют предельные значения параметров, при которых стационарное решение хотя бы одного уравнения из этой системы становится невозможным. Тогда, в приближении монодисперсной конденсированной фазы ($\sigma_f \approx \sigma_n = \sigma$), следствием которого является равенство $\alpha_f = \alpha_n = \alpha$, и считая, что на пределе воспламенения $T_0 \approx T_n$, получим:

$$q(T_f) = \alpha \sigma N_f (T_f - T_g), \quad (1)$$

$$\alpha \sigma N_f (T_f - T_g) = \alpha_w S_0 (T_g - T_0) - \alpha \sigma N_n (T_g - T_0). \quad (2)$$

Выражая величину T_g из уравнения (2) и исключая ее в уравнении (1), решение системы уравнений (1) и (2) относительно $q(T_f)$ получим как:

$$q(T_f) = \alpha \sigma N_f \left[\frac{1}{1 + \frac{\alpha \sigma N_f}{\alpha_w S + \alpha \sigma N_n}} \right] (T_f - T_0). \quad (3)$$

Обозначим комплекс $\frac{\alpha \sigma N_f}{\alpha_w S + \alpha \sigma N_n} = \Psi$, тогда решение (3) переписется, как:

$$q(T_f) = \sigma N_f \left[\frac{\alpha}{1 + \Psi} \right] (T_f - T_0). \quad (4)$$

Уравнение (4) определяет критические условия воспламенения взвеси горючего с инертной добавкой, где в качестве эффективного коэффициента теплообмена выступает комплекс

$$\alpha'_{effect} = \frac{\alpha}{1 + \Psi}. \quad (5)$$

Этот коэффициент α'_{effect} формально совпадает с эффективным коэффи-

коэффициентом теплообмена α_{effect} , предложенном в работе [1], при исследовании воспламенения газозвеси чистого горючего: $\alpha_{effect} = \frac{\alpha}{1+A}$, где

$A = \frac{\alpha \sigma N_f}{\alpha_w S}$ — величина, которая характеризует “коллективный эффект”. В экспериментальных исследованиях других авторов [4] для величины A также было получено эмпирическое выражение:

$$A = \frac{3}{2} \cdot \frac{\rho_g}{\rho_f} \cdot \frac{B}{1-B} \cdot \frac{Nu_f}{Nu_w} \left(\frac{L}{d} \right)^2. \quad (6)$$

Здесь L — характерный размер реактора (диаметр), d — диаметр частицы, B — характеризует массовую концентрацию горючего

$$B = \frac{m_f c_f N_f}{m_g c_g + m_f c_f N_f}.$$

На этом основании можно полагать, что безразмерный параметр ψ в формуле (5) также характеризует “коллективный эффект” газозвеси. Однако, в отличие от A , этот параметр учитывает не только разогрев газа за счет экзотермической реакции на поверхности частиц горючего, но и теплообмен частиц инертной добавки с газом. Поскольку ψ по определению меньше A , то $\alpha_{effect} \leq \alpha'_{effect} \leq \alpha$.

По аналогии с воспламенением газозвеси горючего без инертных добавок [1,4], обозначим комплекс:

$$\frac{\alpha \sigma N_n}{\alpha_w S} = A'. \quad (7)$$

В соответствии с (6):

$$A' = \frac{3}{2} \cdot \frac{\rho_g}{\rho_n} \cdot \frac{B'}{1-B'} \cdot \frac{Nu_n}{Nu_w} \left(\frac{L}{d'} \right)^2, \quad (8)$$

где d' — диаметр инертных частиц, $B' = \frac{m_n c_n N_n}{m_g c_g + m_n c_n N_n}$. Тогда параметр ψ можно представить как:

$$\psi = \frac{A}{A'+1}. \quad (9)$$

Проанализируем полученные выражения (5), (7) и (9) для α'_{effect} , A' и ψ . Рассмотрим предельные случаи:

1. Высокая концентрация инертной добавки: $A' \rightarrow \infty, \psi \rightarrow 0$ и $\alpha'_{effect} \rightarrow \alpha$, т.е. на верхнем по концентрации пределе приходим к критическим условиям воспламенения одиночной частицы (рис.2);

2. Концентрация инертной добавки малая: $A' \rightarrow 0, \psi \rightarrow A$ и $\alpha'_{effect} \rightarrow \alpha_{effect}$ т.е. на нижнем по концентрации пределе получаем критические условия для воспламенения газозвеси частиц горючего (рис.2);

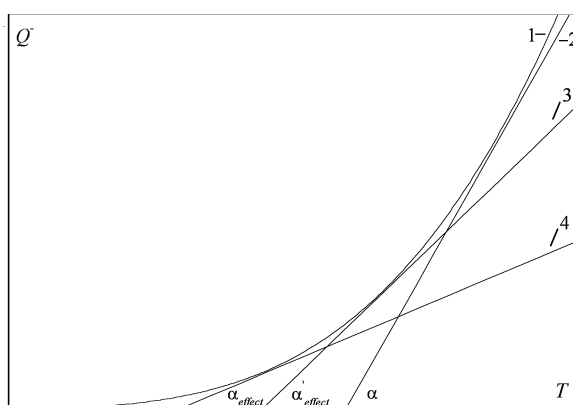


Рис. 2. Зависимость скорости теплообразования и теплоотвода от температуры (1 — скорость теплообразования, 2 — скорость теплоотвода от одиночной частицы, 3 — скорость теплоотвода для взвеси частиц горючего с инертной добавкой, 4 — скорость теплоотвода для взвеси частиц горючего)

Данные экспериментальных исследований, приведенные выше, говорят о том, что анализ полученных выражений, учитывающих вклад инертных частиц в общий “коллективный эффект” не может быть полным, без рассмотрения влияния таких геометрических и теплофизических характеристик инертной добавки, как размер частиц d' и теплоемкость инертного вещества c_n . Из выражения (8) для величины A' следует, что:

1. $A' \sim \frac{1}{d^2}$, то есть чем выше дисперсность частиц инертной добавки,

тем больше A' и больше α'_{effect} . Следовательно, с увеличением дисперсности добавки, растет температура воспламенения модифицированной взвеси частиц горючего (рис.2);

2. $A' \sim c_n$, тогда, чем выше теплоемкость c_n , тем больше A' , тем выше α'_{effect} , и температура воспламенения модифицированной взвеси частиц горючего также возрастает.

Таким образом, понятно, что наибольший эффект ингибирования должен наблюдаться при использовании добавок с минимальным размером и наибольшей теплоемкостью.

Эти выводы полностью согласуются с экспериментальными данными (рис. 1). Так при введении в газовзвесь магния добавки Al_2O_3 со средним размером частиц 30 мкм, уровень температур воспламенения оказывается выше, чем для взвесей магния с добавкой MgO, имеющей средний размер 50 мкм.

Рассчитанная по данной модели температура воспламенения модифицированной газовзвеси, также как и в эксперименте, растет с увеличением концентрации инертной добавки (сплошная линия). Это связано с тем, что параметр A' пропорционален концентрации инертной добавки и ее рост приводит к увеличению A' , а следовательно уменьшению параметра ψ , определяющему эффективный теплоотвод от реагирующей системы.

Из рис. 1 видно, что рост температуры воспламенения взвеси с увеличением концентрации инертной добавки оказывается более резким для взвесей, содержащих дисперсный Al_2O_3 , по сравнению со взвесями имеющими в составе дисперсный MgO. Такой результат, по-видимому, связан с тем обстоятельством, что как было показано выше параметр A' , пропорционален теплоемкости инертной добавки. Чем выше теплоемкость частиц инертной добавки, тем сильнее зависит температура воспламенения взвеси от концентрации инертной добавки. Физически это связано с увеличением скорости теплоотвода от реагирующей с окислителем газовзвеси частиц горючего. Очевидно, наиболее сильно этот фактор отразится на временах задержки воспламенения газовзвеси.

Таким образом, хорошее качественное согласование экспериментальных данных с результатами расчета свидетельствует о правильности тех предположений, которые были положены в основу теоретической модели. Основным параметром, определяющим воспламеняемость модифицированных газовзвесей порошков горючего является параметр ψ . Использование этого параметра делает сложную модель воспламенения газовзвеси частиц горючего с инертными добавками более наглядной, и позволяет в комплексе учесть взаимное влияние частиц горючего, инертной добавки и окисляющего газа.

Литература

1. Руманов Э.Н., Хайкин Б.И. Критические условия самовоспламенения совокупности частиц // Физика горения и взрыва. 1969. Т.5, №1. С.129-137.
2. Клячко Л.А., Воспламенение совокупности частиц при гетерогенной реакции // Теплоэнергетика. 1966. №8. С.65
3. Мацко В.Н., Копейка К.М., Полищук Д.И. Влияние внешнего теплоотвода на критические условия воспламенения газовзвеси частиц магния // Физика аэродисперсных систем. 1980. №20. С.53-56.

4. Копейка К.М., Золотко А.Н., Полищук Д.И.. Воспламенение совокупности частиц магния в воздухе // Физика аэродисперсных систем. 1974. №11. С.54-57.

В. В. Головки, О. К. Копійка

Вплив інертних домішок на критичні умови спалахування газозавису частинок магнію

АНОТАЦІЯ

Подані результати експериментального дослідження процесу спалахування газозавису частинок магнію з інертними домішками MgO і Al₂O₃. В рамках існуючої моделі спалахування газозавису горючого вводиться новий узагальнюючий параметр, що дозволяє комплексно врахувати взаємний вплив частинок горючого, інертної домішки і окислюючого газу.

Golovko V. V., Kopeyka A. K.

The influence of inert solid additives on magnesium dust ignition

SUMMARY

The results of experimental investigation of ignition process of magnesium particles dust with the inert additives MgO and Al₂O₃ are presented. A new generalized parameter has been offered. This parameter has allowed to take into account the mutual influence of fuel particles, inert additive and oxidizing gas in terms of known model of magnesium particles dust ignition.

Л. И. Рябчук, М. Н. Чесноков

Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова

Воспламенение и потухание таблетки торфа при лазерном возбуждении химических реакций на поверхности

Представлен модельный анализ лазерного возбуждения реакции воспламенения и потухания торфа. В рамках полуэмпирической математической модели проведен компьютерный эксперимент по изучению влияния параметров лазерного излучения на процессы термического разложения и выхода летучих, влияния интенсивности и количества летучих на процессы воспламенения и потухания таблетки торфа. Моделирование проводилось совместным решением двухмерного нестационарного уравнения теплопроводности в цилиндрических координатах, уравнений химической кинетики на поверхности мишени, эмпирического уравнения выделения продуктов термолитиза. Потери тепла на облучаемой поверхности учитывают молекулярно-конвективный поток и тепловой поток излучением в окружающую среду. Получены профили концентрации летучих и кислорода на поверхности облучаемого образца, профили суммарного количества конвективных и радиационных потерь и теплопритоков от химических реакций. Показана важность решения двухмерного уравнения теплопроводности.

Анализ гетерогенного горения твердых топлив показывает, что скорость химического реагирования углерода определяется интенсивностью расходования им кислорода и интенсивностью образования продуктов реакции, что указывает на необходимость учета двух параллельных реакций



где q_1 и q_2 — тепловые эффекты реакций.

С физической точки зрения возможность воспламенения вещества возникает вследствие конкуренции энергосвободы реакций в облучаемой зоне и поглощенной веществом лазерной энергии и выноса тепла из зоны реакции благодаря теплопроводности и теплообмену с внешней средой. При различных значениях удельной теплоты реакции в веществе могут устанавливаться два различных состояния, каждое из которых зависит от соотношения конкурирующих факторов теплоотвода и теплопритоков:

1) установления стационарного температурного поля, которое определяется равенством теплопритоков и теплопотерь;

2) воспламенение вещества, если значение удельной теплоты реакций таково, что величина теплопритоков превышает величину теплоотвода.

При лазерном облучении таблетки возможно установление вынужденного горения, когда самой химической реакции недостаточно для самоподдерживающегося горения.

Процессы, протекающие на поверхности таблетки торфа, облучаемого излучением CO₂ лазера (лазерный луч направлен перпендикулярно к горизонтально расположенному образцу), в соответствии с особенностями задачи, описываются в цилиндрической системе координат r, z φ, рис.1.

Уравнение теплопроводности, описывающее задачу имеет вид:

$$\frac{1}{a_T} \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{1}{r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad (3)$$

где a_T — температуропроводность торфа, м²/с.

Уравнение теплопроводности (3) должно быть проинтегрировано совместно с уравнениями гетерогенных реакций (1) и (2) на поверхности.

Если скорость химических реакций W (кг/м² с), то

$$W_i = \rho_2 n_{ок} \frac{K_i \beta}{(K_1 + K_2) + \beta}, \quad (4)$$

где K_i — константы скоростей химических реакций ($i = 1, 2$; 1 — реакция образования оксида углерода; 2 — реакция образования диоксида углерода); β — коэффициент массообмена, м/с; n — концентрация кислорода в пограничном слое, моль/м³; ρ — плотность окислителя пограничного слоя, кг/м³. Каждая из первичных реакций — реакция соединения кислорода с углеродом имеет свой тепловой эффект q и свою скорость взаимодействия W , которая в каждый данный момент времени зависит от температуры, теплопроводности, плотности, теплоемкости и концентрации окислителя в пограничном слое; изменение констант скоростей химических реакций подчиняется закону Аррениуса $K_i = k_{oi} \exp(-E_i/R_{sb}T)$, k_{oi} — предэкспоненциальный множитель, м/с, E_{oi} — энергия активации химической реакции, Дж/моль.

При лазерном воздействии на твердое топливо, согласно термохимической концепции, деструкция топлива происходит через развитие светотермохимической неустойчивости. В общем виде скорость термоллиза может быть

записана в виде: $\frac{dx}{d\tau} = \frac{1}{x^m} f(K_d)$, где x — толщина слоя продуктов реакции

к моменту τ (например, толщина образования оксида или размер зоны разложения), K_d — константа скорости реакции, характеризующей разрушение физико-химических структур, m — показатель степени в уравнении, который принимает различные значения в зависимости от типа и механизма реакции [1]. Кинетика разложения в большинстве случаев подчиняется линейному ($m = 0$) закону [2]. Константа скорости реакции, характеризующей раз-

рушение физико-химических связей отдельных составляющих органической массы твердого топлива, выражается известным законом Аррениуса

$$K_d = k_{od} e^{-T_d/T},$$

T_d — энергия активации распада исходных составляющих в К; $T_d = E_d / R_{sb}$, E_d — энергия активации в Дж/моль; R_{sb} — газовая постоянная ($R_{sb} = 8,31$ Дж/К моль); k_{od} — предэкспоненциальный множитель, м/с.

$$K_d = k_{od} e^{-E_d/R_{sb}T}. \quad (5)$$

Так как термоллиз — это разрыв физико-химических связей исходных составляющих топлива с быстрым образованием конечных продуктов разложения, то можно выделить отдельные группы связей, которые разрушаются при определенных условиях с определенной скоростью примерно одинаковой для данной группы связей.

Суммарный выход летучих определялся по двухкомпонентной схеме [3]

$$V = V_o \left[C_{o1} \left(1 - e^{-K_{d1}\tau} \right) + C_{o2} \left(1 - e^{-K_{d2}\tau} \right) \right], \quad (6)$$

где V_o — суммарное количество летучих в %, которое практически может выделиться при полном термическом разложении органической массы данного топлива, в процентах от сухой массы топлива; C_{o1} и C_{o2} — количественные характеристики 1 и 2 групп реакций. Предполагается, что в первом приближении, — E_{d1} и k_{od1} - кинетические константы процесса образования H_2O и CO_2 ; константы процесса образования других составляющих летучих- E_{d2} и k_{od2} . Если принять все выделяющиеся в процессе пиролиза летучие за 100 %, то пары воды, образующиеся в процессе деструкции составляет более 50 % от общей массы летучих торфа, ее теплоемкость 4,200 кДж/кг К, теплоемкость каждой из остальных составляющих газов (CO , CO_2 , C_2H_4 , H_2) ~ 1 кДж/кг К, кроме CH_4 , теплоемкость которого 2,484 кДж/кг К, однако содержанием CH_4 можно пренебречь, так как летучие содержат всего ~ 1 % этого компонента [4]. Таким образом, для удобства вычисления температуры смеси летучих и воздуха в пограничной пленке, смесь можно считать состоящей из 3-х компонентов: воздуха, H_2O и остальных газов. Температуру выделяющихся летучих считаем равной температуре торфа.

Модель предусматривает наличие пограничного слоя. Размер пограничного слоя для плоской частицы

$$h_{pl} = d/Nu_p, \quad (7)$$

где d — характерный размер пятна облучения ($d=2R$). Для расчета температуры смеси воздуха и летучих в пограничной пленке принимаем $Nu_p = Nu_T$. Расчет концентрации летучих в погранслое производился с учетом того, что выделившиеся летучие протекают сквозь пограничный слой за счет диффузии и молярного переноса [3].

Граничное условие на облучаемой поверхности ($z=H$) учитывает частич-

ное поглощение лазерного излучения, теплопритоки от химических реакций, протекающих на поверхности, а также конвективные и радиационные потери тепла

$$\chi \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=H} = A(\tau)I + \sum_{L=1}^2 q_L W_L - \sigma_c \varepsilon (T^4 - T_{\rho m}^4) - \alpha (T - T_{\rho m}) \Big|_{z=H}, \quad (8)$$

где $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$ Вт/м² К⁴ — постоянная Стефана-Больцмана; ε — излучательная способность тела; T — температура пограничного слоя, К; α — коэффициент теплоотдачи, Вт/К; χ — коэффициент теплопроводности торфа, Вт/м² К; $A(\tau)$ — поглощательная способность торфа; I — интенсивность лазерного излучения Вт/см². Поглощательная способность торфа предполагалась постоянной, не зависящей от окружающего газа, т.к. пары воды, основной компонент летучих торфа, прозрачны для излучения CO₂ — лазера ($\lambda=10,6\mu$) [5].

Коэффициент теплоотдачи рассчитывался с помощью критериев подобия для теплоотдачи при свободной конвекции газа в большом объеме около горизонтальной пластины [6].

$$\alpha = \frac{Nu\chi}{d}; \quad Nu = c(Gr \cdot Pr)^m \varepsilon_\tau;$$

$$Gr = g_\tau \beta_\tau \frac{\Delta T}{\nu^2} \left(\frac{d}{2} \right)^3; \quad Pr = \frac{\nu}{a},$$

где ΔT — разность температур поверхности мишени и окружающей среды; χ , a и ν — коэффициенты теплопроводности, Вт/м² К; температуропроводности, м²/с и кинематической вязкости, м²/с соответственно; g_τ — ускорение свободного падения, м/с²; d — параметр длины, характеризующий задачу (т.е. $d=2R$; при g порядка сорока радиусов облучаемого пятна сохраняется условие, что температура торцевой поверхности мишени равна температуре окружающей среды); β_τ — температурный коэффициент объемного расширения, $\beta_\tau \sim T^{-1}$.

При расчете потерь тепла, уносимых молекулярно-конвективным потоком и за счет радиации, учитывалось то, что выделяющиеся в процессе пиролиза торфа летучие газы в пределах пограничного слоя смешиваются с воздухом. Температура смеси рассчитывалась из уравнения теплового баланса.

Граничное условие на облучаемой поверхности (8) не учитывает потерь энергии, уносимой летучими. Можно предположить, что при учете этих потерь температура поверхности будет расти несколько медленнее.

На нижней ($z=0$) поверхности пластины (рис. 1) граничное условие к уравнению теплопроводности [3] имеет вид

$$-\chi \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} = \sum_{L=1}^2 q_L W_L - \sigma_c \varepsilon (T^4 - T_0^4) - \alpha (T - T_0) \Big|_{z=0}, \quad (9)$$

Расчеты проводились для интенсивностей лазерного излучения $I = 100 \text{ Вт/см}^2$ и 300 Вт/см^2 .

Предполагалось, что поверхность образца торфа воспламеняется при выполнении условий $\frac{\partial q_x}{\partial \tau} \geq \frac{\partial q_p}{\partial \tau}$ и $\frac{\partial^2 q_x}{\partial \tau^2} \geq \frac{\partial^2 q_p}{\partial \tau^2}$, где q_x и q_p теплопритоки от химических реакций и потери на конвективный и радиационный теплоотвод.

Проведенные расчеты показали, что при воздействии лазерного излучения интенсивностью 300 Вт/см^2 на торф в интервале температур $600 < T < 800 \text{ К}$ величина $\partial q_x / \partial \tau$ значительно превышает $\partial q_p / \partial \tau$ и достигает максимального значения при температуре $\sim 650 \text{ К}$. Для интенсивности лазерного излучения 100 Вт/см^2 в интервале температур $450 < T < 750 \text{ К}$ величина $\partial q_x / \partial \tau$ превышает значение $\partial q_p / \partial \tau$, достигая максимального значения также при $T = 650 \text{ К}$ (рис.2).

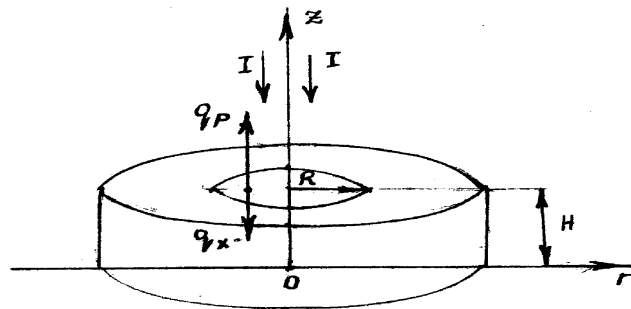


Рис. 1. Образец, облучаемый излучением CO_2 — лазера. q_x — плотность тепловыделения за счет химических реакций; q_p — плотность потока тепловых потерь в окружающую среду; q_c — плотность потока потерь тепла за счет теплопроводности

При интенсивности лазерного излучения 100 Вт/см^2 к моменту времени τ , когда температура образца достигает значения, при котором $\partial q_x / \partial \tau$ максимально, количество выделившихся летучих (рис.3) составляет 25% от максимально возможного. Летучие насыщают пограничную пленку, повышая температуру смеси воздуха с летучими, создаются условия для интенсификации химических реакций (значение q_x растет, рис.4) и горения поверхности образца.

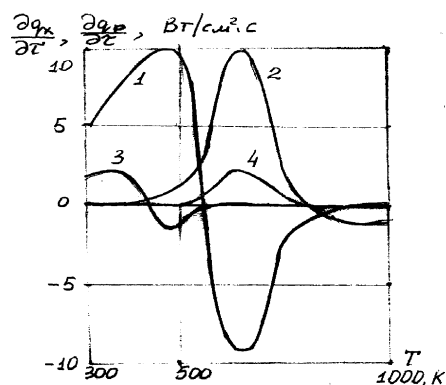


Рис. 2. Скорость изменения плотности теплового потока в зависимости от температуры мишени. Кривые 1 и 3 — скорости суммарных потерь тепла при $I = 300 \text{ Вт/см}^2$ и 100 Вт/см^2 соответственно. Кривые 2 и 4 — скорость выделения тепла за счет химических реакций при $I = 300 \text{ Вт/см}^2$ и 100 Вт/см^2 соответственно

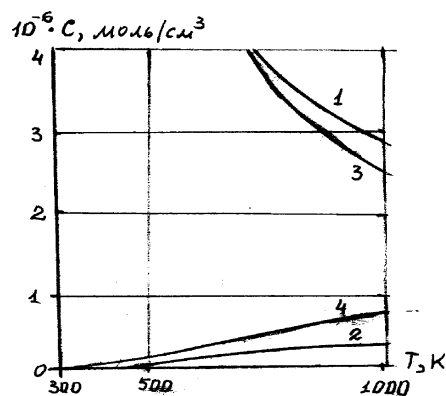


Рис. 3. Изменение концентрации летучих и окислителя в пограничном слое в зависимости от температуры мишени. Кривые 1 и 3 — концентрация окислителя при $I = 300 \text{ Вт/см}^2$ и 100 Вт/см^2 соответственно. Кривые 2 и 4 — концентрация летучих при $I = 300 \text{ Вт/см}^2$ и 100 Вт/см^2 соответственно

Дальнейшее повышение температуры в погранслое усиливает выход летучих. Летучие оттесняют окислитель от поверхности образца, горение поверхности прекращается.

При интенсивности лазерного излучения 300 Вт/см^2 скорость повыше-

ния температуры поверхности резко растет. К моменту времени, когда $\frac{dq_x}{dt}$ максимально, количество выделившихся летучих составляет всего 8 % от максимально возможного. Летучие не принимают участия в воспламенении поверхности образца, т.к. их количество в пограничной пленке очень низко, и их сгорание существенно не может повысить температуру в погранслое.

В некоторых расчетах предполагалось, что можно пренебречь радиальной координатой и проводить расчеты в одномерном приближении [7]. В работе [8] были проведены приближенные оценки радиальной теплопроводности. В настоящей работе использована двумерная модель и проведено сравнение суммарных конвективных и радиационных потерь с радиальным переносом тепла теплопроводностью из зоны облучения в "холодную" не облучаемую часть образца за весь период облучения. Из рис.5 видно, что радиальные потери за счет теплопроводности значительно превышают суммарное значение потерь с облучаемой поверхности. Стало понятно, что в одномерных расчетах отсутствие радиальной координаты не позволяет ограничить зону лазерного воздействия и сделать вывод о том, распространяется ли самоподдерживающееся незатухающее горение по мишени или имеет место только в зоне облучения.

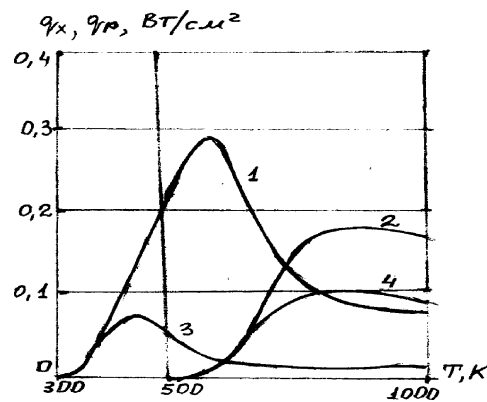


Рис. 4. Плотность потоков тепловых потерь и плотность тепловыделения за счет химических реакций в зависимости от температуры образца. Кривая 1 для $I=300$ Вт/см², кривая 2 для $I=100$ Вт/см²

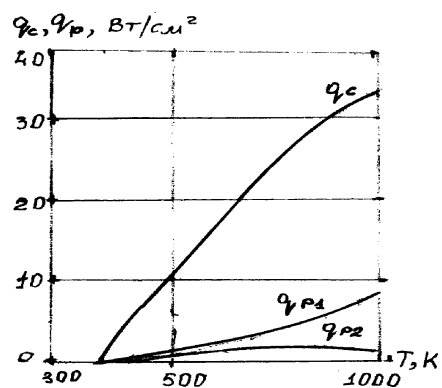


Рис. 5. Потери тепла из облучаемой зоны за счет теплопроводности q_c и за счет теплоотдачи в окружающую среду — q_{p1} , q_{p2} , где q_{p1} — для случая $T_{pl} = T_{ок.ср}$ и q_{p2} — для случая $T_{pl} = T_{см}$.

Литература

1. Либенсон М.Н. Термохимическая неустойчивость конденсированных сред при нагревании светом // Письма в ЖТФ Т.4 Вып.15, 1978 г. 51 — 54.
2. Янг Д. Кинетика разложения твердых веществ. М. Мир. 1969. С.263.
3. Основы практической теории горения. Л.: Энергоатомиздат. 1986. С.312.
4. Грязнов Н.С. Пиролиз углей в процессе коксования. М.Металлургия. 1983. С.184.
5. Криксунов Л.З. Справочник по основам инфракрасной техники. М.: Сов. радио. 1978. С.400.
6. Теоретические основы теплотехники. Теплотехнический эксперимент. Спр. Москва: Энергоиздат. 1982. С.560.
7. Phuoc T.X., Mathur M.P., Ekmann J.M. and Durbetaki P. High-Energy Nd-Yag Laser Ignition of Coals: Modeling Analysis. Combust. Flame 94: 349-362 (1993).
8. Поюровская И.Е., Рябчук Л.И. Зажигание титана излучением в потоке воздуха // Изв.АН СССР. 1989. Т.53. N 3. С.509-514.

Л. І. Рябчук, М. М. Чесноков

Займання та потухання таблетки торфу при лазерному збудженні хімічних реакцій на поверхні

АНОТАЦІЯ

Представлено математичний аналіз лазерного збудження реакції займання та потухання торфу. В рамках полуміричної математичної моделі проведено математичний експеримент по вивченню впливу параметрів лазерного випромінювання на процеси термічного розпаду та виходу летких, впливу кількості летких на процеси займання та потухання таблетки торфу. Моделювання проводилося сумісним розв'язанням двумірною нестационарною рівнянням теплопроводності у циліндричних координатах, рівнянь хімічної кінетики на поверхні мішені, емпіричного рівняння вилучення продуктів термолізу. Збитки тепла на поверхні, яка опромінюється, урахувують молекулярно-конвективний потік і тепловий потік випромінюванням у навколишнє середовище. Одержано профілі концентрації летких та кисню на поверхні зразка, який опромінюється, профілі підсумкової кількості конвективних та радіаційних збитків та теплопритоків від хімічних реакцій. Показана важливість розв'язування двумірною рівнянням теплопроводності.

L. I. Ryabchuk, M. N. Chesnokov

Ignition and extinction of peat tablet during laser initiation of surface chemical reactions

SUMMARY

A modeling analysis of laser-induced ignition and extinction of peat is present. Computational study of laser radiation influence on peat thermolysis of volatile fraction on the ignition and extinction of peat has been fulfilled. A model includes two — dimensional transient equation of heat conduction, equations of chemical kinetics on peat surface and empirical equation of thermolysis products output. Radiation heat transfer and molecular-convective heat flux have been taken into account. Volatile profiles on sample surface and profiles of heat flux have been obtained.

В. Н. Корнилов, Е. Н. Кондратьев

*Институт горения. Одесский национальный университет
им. И.И. Мечникова, Одесса*

Горение одиночных углеродных частиц в акустически пульсирующем потоке

Приводятся результаты экспериментального исследования горения одиночных углеродных частиц в акустически пульсирующем потоке. Обнаружен немонотонный характер зависимости эффективности акустического воздействия на горение частицы от ее начального размера. Предложена модель механизма влияния пульсаций потока на горение связанного с периодическим смещением зоны газофазных реакций в окрестности углеродной частицы. В рамках данной модели анализируются частотные зависимости эффективности влияния пульсаций на горение одиночной частицы.

Введение

Постоянное ужесточение требований к экологическим и экономическим показателям работы топок для сжигания угля, а также ухудшение качества добываемых углей обусловили подъем интереса к пульсационному горению в последнее десятилетие. Акустические колебания, которые специально приносятся или возникают спонтанно в топочном объеме при соответствующей организации влекут существенные улучшения показателей топочного процесса. Рост теплонапряженности, уменьшение недожога, снижение выхода окислов азота и сажи, интенсификация теплопередачи в теплоприемные устройства - это основные полезные изменения, которые наблюдаются при переводе работы топки в пульсирующий режим.

Применение пульсирующего способа сжигания угля имеет многолетнюю историю. Одной из первых крупных промышленных установок использовавшей пульсирующее горение угля была установка для газификации фирмы "Рургаз" [1]. В СССР лабораторные и полупромышленные установки разрабатывались с конца 50-х годов [2,3]. В США фирмой TermoChem, Inc. последние несколько лет ведутся работы по созданию промышленной установки совмещающей способы сжигания угля в кипящем слое и в камере пульсирующего горения (КПГ) [4].

Исследования механизмов влияния колебаний потока газа на горение одиночной углеродной частицы являются отправной точкой для понимания природы ряда эффектов сопровождающих работу КПГ. Кинетика выхода летучих из одиночных частиц натурального топлива и последующее выго-

рание коксового остатка исследовалось в работе [5]. Показано, что для частиц угля размером >500 мкм наблюдается существенное увеличение скорости выхода летучих и интенсификация горения коксового остатка. Совместное влияние пульсационной и постоянной составляющих потока на горение одиночных угольных частиц экспериментально исследовалось в [3,6]. Там же теоретически анализируется роль вовлечения мелких частиц в колебательное движение газа при пульсирующем горении угольной пыли. Так же как и в [5] отмечено интенсифицирующее действие пульсаций, однако при малой скорости постоянной составляющей потока и небольшой амплитуде колебаний наблюдалось уменьшение скорости горения частиц угля. Этот эффект авторы объясняют формированием зоны газофазных реакций в окрестности частицы, которые препятствуют проникновению кислорода к ее поверхности.

Горение крупных (1-3мм) частиц угля в пульсирующем потоке исследовалось в [7]. Одним из выводов работы явилось зафиксированное увеличение эффективности воздействия пульсаций на горение по мере уменьшения размера частицы и приближения ее диаметра к амплитуде смещения газа в пульсирующем потоке. Мерой эффективности принято отношение полных времен горения частицы в стационарном и пульсирующем потоках. Следует отметить, что подобную тенденцию можно обнаружить анализируя данные работ [3,6].

Результаты численного моделирования горения малых (~ 100 мкм) углеродных частиц в акустически пульсирующем потоке представлены в работе [8]. Рассчитывались двумерные поля скорости, температуры и концентраций реагентов в окрестности частицы; движение, температура и выгорание самой частицы. Учитывалась одна газофазная и две гетерогенные реакции. Результаты счета указывают на то, что эффективность акустического воздействия (изменение времени горения) возрастает при увеличении начального размера частицы. Эта тенденция объясняется меньшей степенью вовлечения крупных частиц в колебательное движение и, соответственно, большей амплитудой колебаний скорости газа относительно частицы.

Из анализа приведенных выше результатов вырисовывается следующая зависимость от начального размера частицы эффективности влияния акустических пульсаций скорости (смещения) газового потока на ее горение. Для частиц малых по сравнению с амплитудой смещения газа рост начального размера ведет к росту эффективности влияния колебаний. Для частиц крупных по сравнению с амплитудой смещения газа тенденция противоположна- эффективность акустического воздействия падает по мере роста размера частицы. Следовательно, можно ожидать наличие максимума эффективности влияния пульсаций потока на скорость (время) горения частицы угля в зависимости от ее размера.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния колебаний потока на горение одиночных углеродных частиц. Анализируются физические ме-

ханизмы, конкуренция которых приводит к немонотонной зависимости эффективности влияния колебаний газа на горение углеродной частицы.

Методика и оборудование эксперимента

Источником акустического поля во всех проводившихся опытах являлся термоакустический генератор- труба Рийке. Он представляет собой вертикально установленную открытую с обеих концов трубу длиной $\sim 1,1$ м и диаметром $\sim 0,1$ м. На $1/4$ от нижнего конца трубы расположен спиральный электрический нагреватель. Частота генерируемых автоколебаний соответствует частоте основного тона и равна ~ 150 Гц. Сжигание угольных частиц проводилось в области пучности колебаний скорости в стоячей волне у нижнего конца трубы. Амплитуда смещения газа $0,7-1$ мм что соответствует амплитуде колебаний скорости $0,7-1$ м/с. При проведении экспериментов в стационарном потоке, колебания подавлялись, для чего открывалось малое отверстие расположенное на $1/2$ длины трубы Рийке. Все эксперименты проводились с частицами древесного угля (медицинский активированный уголь); плотность- 500 кг/м^3 , зольный остаток меньше 1% по массе, выход летучих не замечен.

Необходимость измерений времен горения частиц широкого диапазона размеров потребовала привлечения нескольких различных методик внесения частиц в поток, воспламенения, измерения времен горения.

Порошок частиц с размером меньшим 100 мкм рассеивался на 4 фракции с медианами функций распределения 35 , 52 , 64 и 80 мкм . Частицы исследуемой фракции вбрасывались вертикально вверх в поток посредством специального электростатического питателя. На выходе из питателя частицы поджигались миниатюрной печкой. Длина трека горячей частицы составляла $1-8 \text{ см}$, что много меньше $1/4$ длины волны акустических колебаний ($\sim 55 \text{ см}$), т.о. частица сгорает в области приблизительно постоянной амплитуды колебаний.

Крупные частицы ($100-1000 \text{ мкм}$) сжигались приклеенными на кварцевом подвесе диаметром 25 мкм . При измерении времени горения более крупных частиц существенное влияние оказывает неопределенность момента воспламенения. Это связано с тем, что крупная частица воспламеняется локально и некоторое время необходимо для того, чтобы поверхность реагирования охватила всю частицу. Во избежании связанных с этим ошибок частицы $1-3 \text{ мм}$ нагревались в отдельной заполненной азотом печке до $800-900 \text{ К}$ и затем быстро вносились в пучность колебаний скорости. Подвесом служила борная нить 130 мкм .

Времена горения определялись либо по длительности свечения частицы (мелкие фракции), либо обработкой фотоснимков треков сделанных через обтюратор. Световой поток от частицы регистрировался фотодиодом, сигнал с которого фиксировался запоминающим осциллографом. Время горения четырех фракций порошков с размером меньшим 100 мкм определялись

по известной методике статистической обработки такого рода данных [9] для медианного размера фракции.

Размер и время горения частиц больших 100мкм измерялись индивидуально для каждой частица.

Результаты экспериментов

На рис. 1 представлены функции распределения размеров и времен горения в стационарном и пульсирующем потоках для 4-х фракций порошков. Соответствие времен горения и размеров устанавливалось на медианах функций распределения [9]. На рис.2 этим экспериментам соответствуют первые слева пары точек, отражающие результаты статистической обработки порядка 200 измерений каждая. Остальные точки на рис.2 соответствуют экспериментам, в которых время горения и размер частицы измерены индивидуально.

Если зависимость времени горения t частицы связана с ее начальным размером d как: $t \sim d^n$, то показатель степени n определяет тангенс угла наклона прямой, аппроксимирующей зависимость t от d , построенной в логарифмическом масштабе. Обработка экспериментальных точек (рис.2) дает для n значения близкие к 2 ($n_{st} = 1,98$, $n_{ac} = 2,02$), т.е. в данном случае в среднем на всем диапазоне размеров имеет место связь $t = kd^2$, (k - константа горения). Как известно, “закон- d^2 ” характерен для внешнедиффузионного режима горения гетерогенно реагирующей частицы.

Количественно, степень влияния акустических колебаний потока на время выгорания частицы будем характеризовать величиной

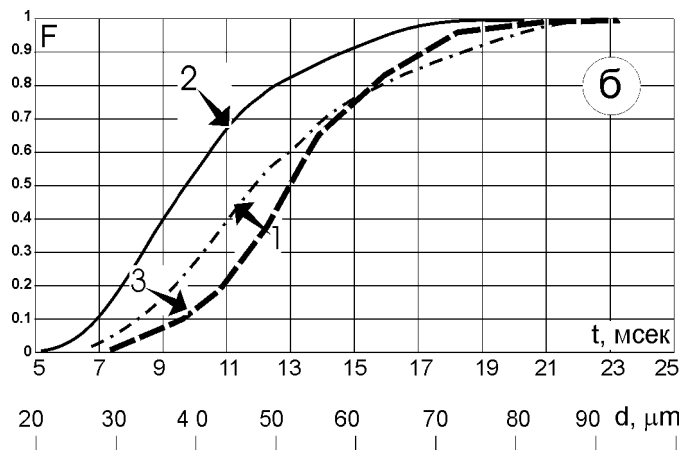
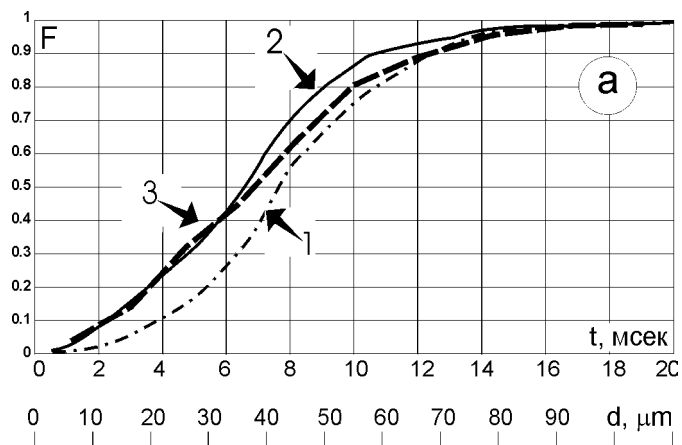
$$\varepsilon = (t_{st} - t_{ac}) / t_{st} = (k_{st} - k_{ac}) / k_{st}$$

здесь t_{st} , k_{st} и t_{ac} , k_{ac} — соответственно времена и константы горения частицы в стационарном и пульсирующем потоке. Таким образом ε характеризует долю уменьшения времени горения частицы за счет воздействия колебаний потока.

На рис.3 точки представляют зависимость ε от d полученную по экспериментальным данным. Первые слева четыре точки построены по измеренным временам для фракций порошков (рис.1), остальные точки рассчитывались после усреднения констант горения k для частиц неширокого диапазона размеров вблизи отмеченной точки.

Как следует из зависимости $\varepsilon(d)$, для всех диаметров $\varepsilon > 0$, т.е. имеет место интенсификация горения одиночной угольной частицы. Следовательно можно ожидать некоторое увеличение температуры частицы горящей в пульсирующем потоке по сравнению с температурой горения в стационарном потоке. На рис.4 представлена термограмма горения крупной (~2,5мм) частицы. В моменты отмеченные стрелками производилось “включение/выключение” пульсаций. Очевиден более высокий уровень температуры горения угольной частицы в акустически колеблющемся потоке. По термограмме можно также

отметить уменьшение времени тепловой релаксации частицы, что естественно связано с ее выгоранием. (Хорошо видно увеличение скорости изменения температуры при переключениях по мере выгорания частицы).



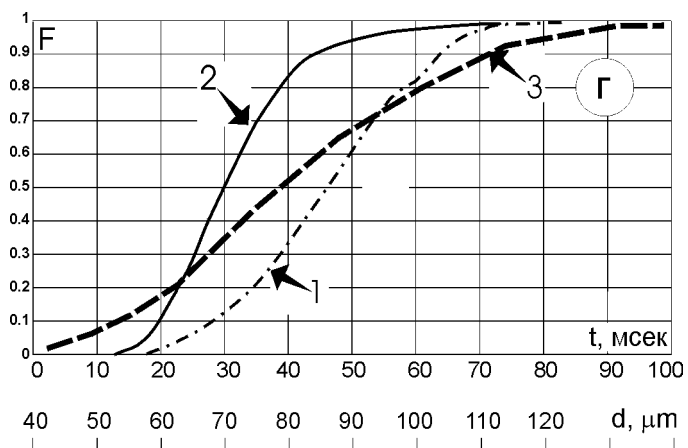
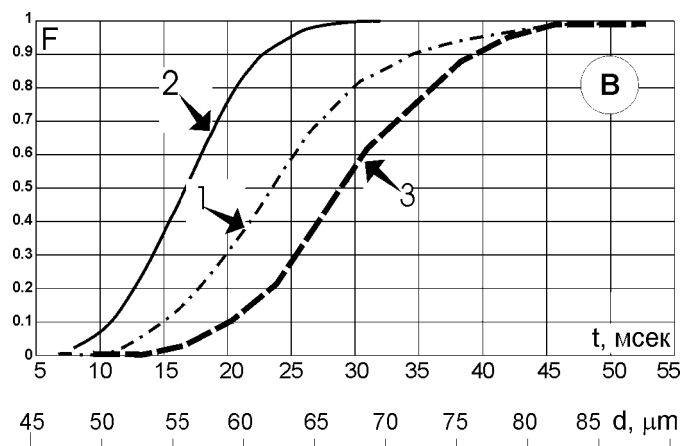


Рис. 1. Функции распределения для времени горения в стационарном (1), акустически пульсирующем (2) потоках и распределение частиц по размерам (3) для порошков фракций с медианным размером (а) — 35 мкм; (б) — 52 мкм; (в) — 64 мкм; (г) — 80 мкм

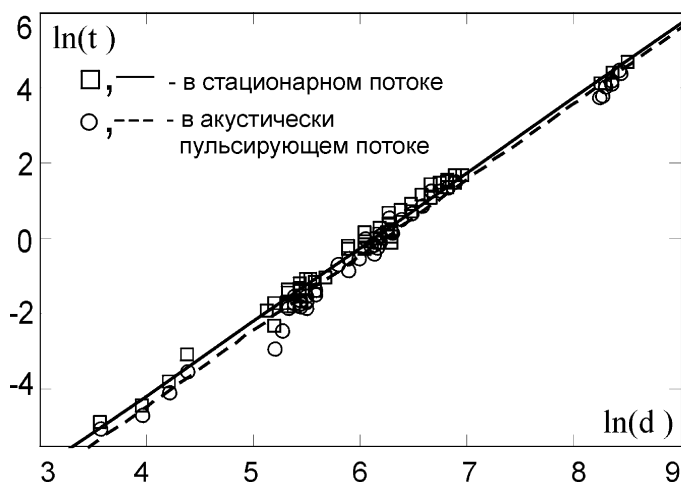


Рис. 2. Зависимость времен горения одиночных частиц угля от их начального размера

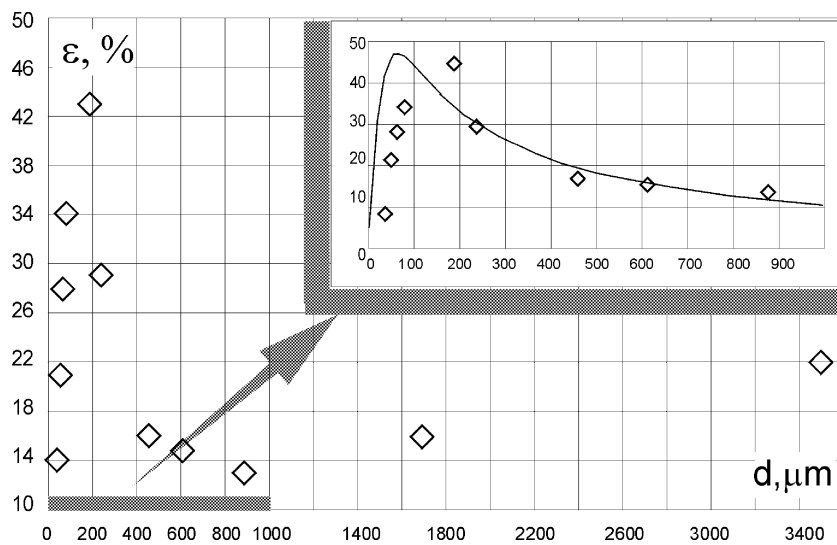


Рис. 3. Относительное изменение времени горения частицы угля в пульсирующем потоке как функция размера. На выноске повторен участок до 1000мкм. Точки построены по экспериментальным результатам, сплошная кривая — по выражению (7)

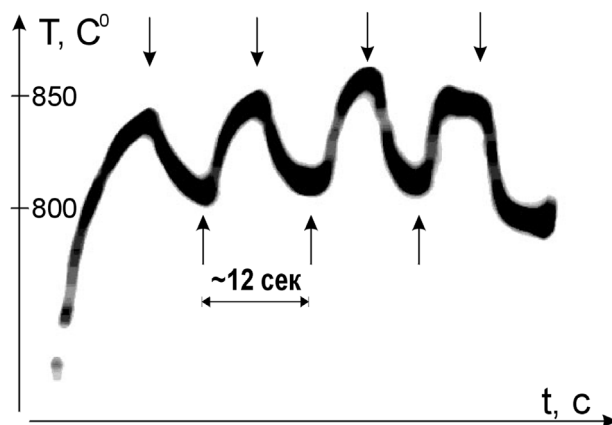


Рис. 4. Осциллограмма изменения температуры горения крупной (~ 2,5мм) частицы угля при "включении/выключении" акустических пульсаций

Обсуждение результатов

Из приведенных выше экспериментальных результатов наиболее подробного рассмотрения и интерпретации требует наблюдаемая немонотонность зависимости эффективности акустического воздействия ϵ от размера угольной частицы. При внешнедиффузионном режиме скорость горения гетерогенно реагирующей частицы определяется диффузионным подводом окислителя к поверхности частицы. Зависимость безразмерного коэффициента массообмена — числа Шервуда Sh , от числа Рейнольдса рассчитанного по скорости потока и диаметру частицы есть монотонная функция. Оценить сверху степень влияния колебаний на скорость массообмена (Sh) можно, подставив значение амплитуды колебаний скорости V_a в зависимость $Sh(Re)$ например, вида $Sh=2(1+0.08Re^{2/3})$. С учетом параметров эксперимента ($V_a=1\text{ м/с}$, кинематическая вязкость воздуха при 1273 К — $\nu_{1273}=177\cdot 10^{-6}\text{ м}^2/\text{с}$) дает прибавку в 3-15% по сравнению даже с $Sh=2$ для частиц диаметром 50-500мкм. Численное моделирование горения одиночной угольной частицы в рамках $k-\beta$ модели с учетом исключительно гетерогенной реакции на поверхности, а также с учетом движения частицы и ее выгорания дает для ϵ еще меньшие значения. При этом, как оценка Sh так и результаты численного счета предсказывают монотонный рост ϵ с ростом d . Т.о. имеет место не только существенное количественное расхождение экспериментальных и расчетных значений относительного изменения времени горения частицы в результате наложения пульсаций потока, но и, что более значимо, качественное отличие вида зависимости $\epsilon(d)$ полученной экспериментально (точки на рис.3) и сле-

дующей из результатов моделирования. Можно предположить, что именно исключение факторов, связанных с влиянием колебаний потока на зону газозфазных реакций в окрестности частицы и приводит к несогласованности предсказываемых и наблюдаемых зависимостей.

Важная роль сноса области реагирования СО при горении угольной частицы в потоке обсуждалась еще в ранних работах [10]. Влияние положения области газозфазного реагирования при горении угля в пульсирующем потоке отмечалось в [3,6]. Зона газозфазных реакций в окрестности углеродной частицы существенно смещается при горении в пульсирующем потоке, что можно непосредственно наблюдать на фотографии треков-рис.5. На выноске показана область траектории вблизи точки поворота. Хорошо выделяется яркая полоса по центру трека- след самой частицы, который окружен несколько размытой светящейся зоной- область протекания газозфазных реакций. В самой точке поворота видно, что область реагирования СО сорвана с частицы (не охватывает частицу полностью); край области образует четкую границу в виде дуги, обращенной в сторону частицы.

Таким образом, физический механизм, обуславливающий немонотонный ход зависимости $\epsilon(d)$, представляется следующим: для частиц малых настолько, что они в большой мере вовлекаются в колебательное движение, $\epsilon(d)$ мало, т.к. область догорания СО и частица движутся с близкими амплитудой и фазой и смещение газовой оболочки относительно частицы мало по сравнению с d . Для более крупных частиц характерно отставание частицы от газовой оболочки в ходе их колебательного движения, соответственно растет смещение области газозфазного реагирования относительно частицы, что влечет рост $\epsilon(d)$. Еще более крупные частицы вовсе перестают вовлекаться в колебания газа, смещение области газозфазных реакций относительно частицы ограничено величиной амплитуды смещения газа в акустической волне. Соответственно, отношение смещения оболочки к размеру частицы d будет уменьшаться по мере роста диаметра, что уменьшает влияние сноса области газозфазных реакций на горение угольной частицы, т.е. ведет к падению значения $\epsilon(d)$.

Некоторый рост $\epsilon(d)$, который можно заметить на рис.3 для точек с $d > 1000 \text{ мкм}$ возможно связан с ростом эффективного значения Re , что отражается на интенсивности массообмена.

Для выяснения роли смещения газозфазной области при горении частицы углерода в пучности смещения в акустической волне рассмотрим следующую простую модель. Пусть имеет место гармонический закон изменения во времени смещения газа в акустической волне

$$X_g = A \sin(\omega t), \quad (1)$$

здесь A — амплитуда смещения, ω — частота. Тогда скорость смещения: $V_g = V_a \cos(\omega t)$, где $V_a = A \cdot \omega$ — амплитуда колебаний скорости газа в волне.

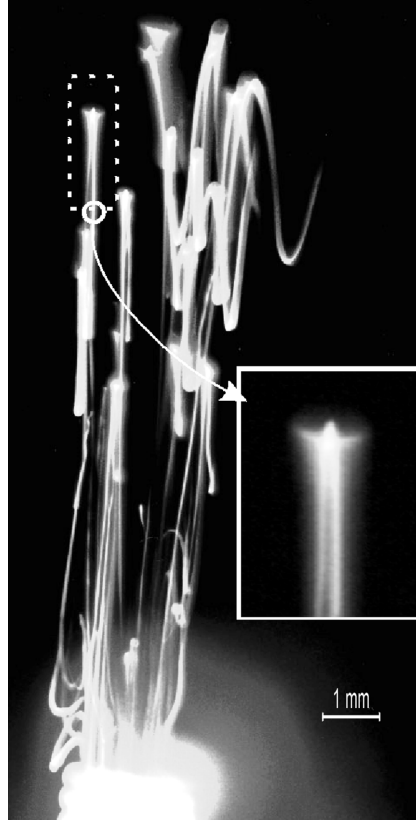


Рис. 5. Фотография треков частиц угля горящих в акустически пульсирующем потоке

В стоксовом приближении, для сферической частицы массой m и радиусом r уравнение ее движения имеет вид

$$\frac{dV_p}{dt} = B \cdot (V_a \cos(\omega t) - V_p), \quad (2)$$

где $B = 6\pi\eta r/m$, η — коэффициент динамической вязкости газа.

Установившееся решение для смещения частицы

$$X_p = A \cdot \frac{B}{\omega^2 + B^2} (B \cdot \sin(\omega t) - \omega \cdot \cos(\omega t)). \quad (3)$$

Смещение относительно частицы обозначим $Y=X_g-X_p$, тогда из (1) и (3) следует

$$Y(t) = A \cdot \omega \cdot \left(\frac{\omega}{\omega^2 + B^2} \cdot \sin(\omega t) + \frac{B}{\omega^2 + B^2} \cdot \cos(\omega t) \right) = \frac{A\omega}{\sqrt{\omega^2 + B^2}} \cdot \sin(\omega t + \varphi), \quad (4)$$

где $\operatorname{tg}(\varphi)=B/\omega$. Для амплитуды смещения газ-частица с учетом зависимости B от m :

$$Y_a = \frac{A\omega}{\sqrt{\omega^2 + \left(\frac{9\eta}{2\rho_p r^2} \right)^2}}.$$

Логично принять, что в механизме интенсификации процесса горения частицы за счет периодического сноса области газофазного реагирования промежуточного продукта реакции, определяющим параметром воздействия будет не сама амплитуда взаимного смещения частица-газ, а соотношение этой амплитуды и размера (диаметра) частицы. Обозначим это отношение как

$$f(r) = \frac{Y_a}{2r} = \frac{1}{2r} \frac{A\omega}{\sqrt{\omega^2 + \left(\frac{9\eta}{2\rho_p r^2} \right)^2}}. \quad (5)$$

На рис.6 представлена зависимость $f(r)$ при $\omega=2\pi \cdot 150\text{с}^{-1}$, $A=800\text{мкм}$, $\rho_p=500\text{кг/м}^3$, $\eta=50 \cdot 10^{-6}\text{Па}\cdot\text{с}$ (воздух при 1273К), что приблизительно соответствует вышеописанным экспериментам. В данном случае $f(r)$ имеет максимум вблизи $2r=50\text{мкм}$.

В настоящий момент не видится возможным получить аналитически связь относительного изменения времени горения частицы угля ϵ и относительного смещения газовой оболочки f . Для этого следовало бы решить задачу о горении углеродной частицы с учетом реакций в газовой фазе в условиях нестационарного обдува. Примем простейшую связь ϵ с f в виде прямой пропорциональности $\epsilon(r)=\gamma \cdot f(r)$. Т.е. будем полагать, что “константа” скорости горения в колеблющемся потоке связана с константой горения в стационарном потоке как: $k_{a^2}(r)=k_{st} \cdot (1+\gamma \cdot f(r))$. Для горения частицы в стационарном потоке выполняется “закон- d^2 ”, т.е. уравнение выгорания есть: $dr/dt=-k_{st}/(2r)$, здесь k_{st} - не зависит от r . При принятой связи k_{ac} и k_{st} это уравнение для случая горения в пульсирующем потоке преобразуется к виду

$$\frac{dr}{dt} = - \frac{k_{st} \cdot (1 + \gamma \cdot f(r))}{2r}. \quad (6)$$

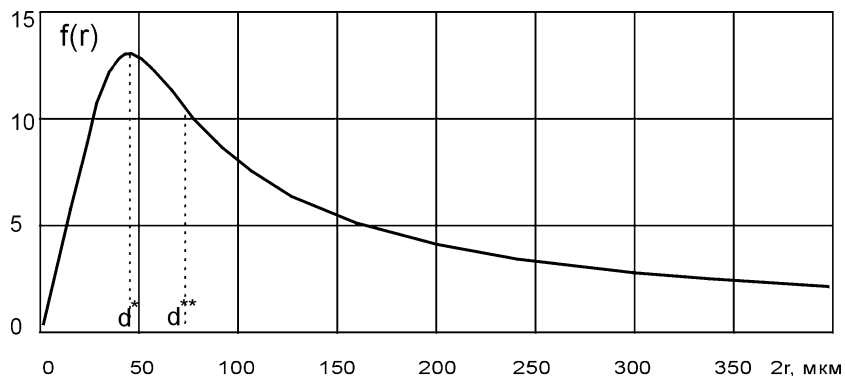


Рис. 6. Относительная величина амплитуды взаимного смещения частица- газ как функция размера частицы.

Интегрируя (6), для времени горения частицы с начальным радиусом r_0

получаем $t_{ac} = \frac{1}{k_{st}} \int_0^{r_0} \frac{2rdr}{1 + \gamma f(r)}$, тогда относительное изменение времени горения частицы в пульсирующем потоке по сравнению со стационарным выразится как

$$\varepsilon = \frac{t_{st} - t_{ac}}{t_{st}} = 1 - \frac{2}{r_0^2} \int_0^{r_0} \frac{rdr}{1 + \gamma f(r)}. \quad (7)$$

Линия на рис.3 построена по уравнению (7), где учтена $f(r)$ в виде (5) и использованы те же значения параметров что и при построении рис.6. Параметр γ сказывается на “высоте” кривой $\varepsilon(d)$ и слабо влияет на положение максимума. При построении кривой на рис.3 было выбрано $\gamma=0,08$, что дает согласование значений расчетного и экспериментального значений ε в максимуме.

Максимум кривой $\varepsilon(d)$ смещен относительно максимума кривой $f(d)$ в сторону больших размеров. Действительно, частицы с размером несколько большим чем d^* , соответствующий максимуму $f(d)$ по мере горения “захватят” большее время эффективного действия колебаний чем частицы с размером меньшим или равным d^* . Частицы с размером больше некоторого d^{**} в процессе выгорания будут долгое время (в соответствии с законом “ d^2 ”) находиться при малом $f(d)$ и, соответственно, относительное уменьшение времени горения ε для таких частиц будет падать с ростом начального размера.

В рамках рассматриваемого описания можно проанализировать частотную зависимость данного механизма влияния пульсаций потока на горение частицы. Представление о влиянии частоты можно получить из вида зависимости амплитуды относительного взаимного смещения частица-газ от

частоты, т.е. функции $f(\omega)$. Существенно, какой из параметров колебаний-амплитуда смещения A или амплитуда колебаний скорости $V_a = A \cdot \omega$ (давления) будет фиксированным при вариации частоты. Соответствующие этим двум случаям зависимости $f(\omega)$ при фиксированном радиусе частицы r приведены на рис. 7а,б. При постоянной амплитуде смещения A по мере роста частоты степень вовлечения частицы в колебания уменьшается, поэтому $f(\omega)$ растет приближаясь асимптотически к величине $A/(2r)$. При фиксированной амплитуде колебаний скорости V_a график $f(\omega)$ спадает с ростом частоты.

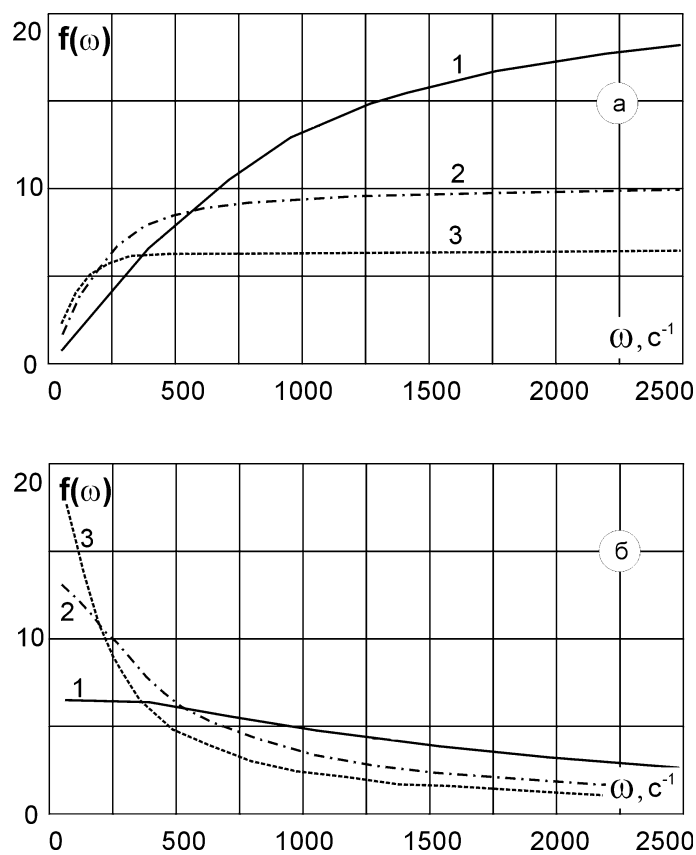


Рис. 7. Частотные зависимости относительной амплитуды взаимного смещения частица-газ при фиксированной амплитуде смещения (а) и при фиксированной амплитуде колебаний скорости (б) в акустической волне. Кривые соответствуют частицам диаметром 40мкм (1); 80мкм (2) и 120мкм (3).

Заключение

По результатам проведенного экспериментального исследования и оценочных расчетов влияния пульсаций потока на горение одиночных углеродных частиц можно сделать следующие основные выводы:

– акустические пульсации потока приводят к интенсификации горения одиночной углеродной частицы во всем исследованном диапазоне (35-3500мкм);

– зависимость эффективности влияния акустических пульсаций на время горения (ϵ) как функция от начального размера частицы может носить немонотонный характер;

– наличие максимума на зависимости ϵ от d может быть объяснено, если принять во внимание существенную роль сноса зоны газофазного реагирования СО в окрестности частицы. Конкуренция двух факторов: зависимость степени вовлечения частицы в колебательное движение и зависимость относительной величины взаимного смещения частицы и газа от размера частицы обуславливает появление максимума на зависимости $\epsilon(d)$. Оценки опирающиеся на данные представления хорошо коррелируют с результатами экспериментов.

Полезность для практического применения результатов данного исследования состоит в возможности оценки оптимальных частоты и амплитуды акустического воздействия на реагирующую углеродсодержащую частицу. Эта возможность позволяет ускорить разработку установок использующих акустическую интенсификацию горения (газификации) угля, утилизации отходов и т.п. на стадиях проектирования и доводки таких устройств.

Литература

1. Гамбург Д.Ю. Газификация пылевидного топлива в пульсирующем режиме // Газовая промышленность. 1960. №5.
2. Подымов В.Н., Северянин В.С., Щелоков Я.М. Прикладные исследования вибрационного горения. Казань: Изд. Казанского университета, 1978.
3. Сб. Пульсационное горение (материалы к научно-технической конференции). Челябинск, 1968.
4. <http://nepa.eh.doe.gov/ea/ea0646/ea0646.html> Comprehensive Report to Congress on the Clean Coal Technology Program: Demonstration of Pulse Combustion in an Application for Steam Gasification (October 1992). Prepared by ThermoChem, Inc. U.S. Department of Energy report DOE/FE-0267P. (Available from NTIS as DE93000959.)
5. Бухман С.В., Крылова Н.П. Влияние скоростных пульсаций потока на процесс горения натурального твердого топлива // Проблемы теплоэнергетики и прикладной теплофизики. 1970. Вып. 6. С. 9-17.
6. Северянин В.С., Кацнельсон Б.Д. Некоторые вопросы вибрационного горения твердого топлива // Вибрационное горение в некоторых модельных устройствах. Казань, 1970.

7. Jayant S. Sabnis, Frederic A. Lyman, Effect of Oscillating Flow on Combustion Rate of Coal Particles // *Combustion and Flame*. 1982. V.47. pp. 157-172.
8. Man Yeong Ha, Savash Yavuzkurt. Combustion of Carbon or Char Particle in the Presence of High-Intensity Acoustic Fields // *Combustion and Flame*. 1991. V. 86. pp. 33-46.
9. Гуревич М.А., Игнатов Г.В., Озеров Е.С., Сотниченко Б.И. Статистический метод получения характеристик горения частиц металлов // *Физика горения и взрыва*. 1969. Т.5, №3. С. 441-444.
10. Горение углерода / Под ред. А.С. Предводителя. М.: Изд. АН СССР, 1949.

В. М. Корнілов, Е. М. Кондратьєв

**Горіння поодиноких вуглецевих частинок
в акустично пульсуючому потоці**

АНОТАЦІЯ

В статті приведено результати експериментального дослідження горіння поодиноких вуглецевих частинок в акустично пульсуючому потоці. Виявлено немонотонний характер залежності ефективності акустичного впливу на горіння частинки від її початкового розміру. Запропоновано модель механізму впливу пульсацій потоку на горіння, що пов'язаний з періодичним зсувом зони газофазних реакцій в околі вуглецевої частинки. В межах цієї моделі розглянуто частотні залежності ефективності впливу коливань на горіння частинки.

V. N. Kornilov, E. N. Kondratjev

The combustion of single char particle in acoustically pulse flow

SUMMARY

The results of experimental study of individual char particles combustion in flow under action of acoustical excitation are presented. It has been found that the effectiveness of acoustical influence depended non-uniformly from particle initial size. The model of influence mechanism based on periodical gas-phase reactions zone shifting in particle vicinity has been proposed. In terms of this model the effectiveness of acoustical influence on combustion process depending on char particle size has been considered.

В. Л. Захарченко, Е. Н. Кондратьев, И. В. Жиганюк
*Институт горения Одесского национального университета
им. И. И. Мечникова, г. Одесса*

Влияние воды как инертной добавки на структуру ламинарного диффузионного факела метана

Рассматривается влияние паров воды как инертной добавки в составе горючего на характеристики ламинарного диффузионного факела предварительно не перемешанных реагентов. Показана применимость приближения Бурке — Шумана для моделирования характеристик факела заранее выпаренной водо-топливной эмульсии. Рассчитана высота факела в зависимости от различного содержания воды. Построены распределения концентраций окислителя и горючего в диффузионном факеле. Приведена оценка адиабатической температуры факела от процентного содержания воды в составе горючего.

В связи с возрастающим интересом к проблеме применения водо-топливных эмульсий в качестве альтернативного топлива особое значение приобретает вопрос выяснения роли водного компонента в процессах горения. Будучи малоактивной добавкой в составе топлива, вода снижает его тепловой эффект, ухудшает воспламеняемость горючего. Заметим, что в присутствии достаточно большого количества кислорода пары воды по сути не проявляют реакционных свойств. Однако, при определенных условиях введение в топливо инертных добавок, как показано в работах [1, 2], может привести к возрастанию скорости пламени, а также к повышению полноты преобразования горючего.

Роль воды в процессах горения проявляется по-разному в зависимости от способа организации процесса сжигания.

Использование форсуночного распыла — наиболее распространенный метод организации сжигания тяжелых углеводородов. При этом наиболее характерным является явление микровзрыва. Наличие добавок воды, как показано в [3, 4], интенсифицирует процесс горения топлива за счет внутритопочного дробления капель воды. Это приводит к увеличению поверхности испарения частиц и улучшению перемешивания горючего с воздухом. Сокращается время горения эмульгированного топлива и, соответственно, увеличивается мощность тепловыделения в камерах сгорания. Наличие паров воды благоприятно сказывается на стадии догорания сажистых остатков, что уменьшает отложения сажи на рабочих поверхностях. В работах [5, 6] показано, что использование водо-топливной эмульсии в качестве альтернативного горючего в двигателе внутреннего сгорания снижает выделе-

ние оксидов азота и других вредных продуктов сгорания. В работе [7] показана эффективность применения водно-мазутных эмульсий в качестве топлива для тепловых электростанций.

Альтернативный способ организации процесса сжигания основан на предварительной тепловой подготовке топлива. При заранее выпаренной водо-топливной эмульсии в камеру сгорания подается топливная смесь, состоящая из паров воды и продуктов термического пиролиза углеводородов [3, 4]. Следовательно, особый интерес представляет вопрос о влиянии добавок воды на структуру диффузионного факела углеводородного горючего, содержащегося в составе водо-топливной эмульсии.

Наиболее простой и в то же время достаточной для качественного описания структуры ламинарного диффузионного факела предварительно не перемешанных компонентов горючей смеси (горючего и окислителя) является модель Бурке — Шумана, приведенная в [8]. Применимость модели Бурке — Шумана к факелу водо-топливной эмульсии обусловлена тем, что в зону горения эмульсия, в отличие от форсуночного метода сжигания, подается в газообразном виде после предварительного испарения [9].

Основные предположения модели Бурке — Шумана следующие: 1) у среза горелки скорости горючего и окислителя приняты постоянными, равными и равномерно распределенными по сечению соответствующих коаксиальных трубок так, что “молярное” отношение потоков горючего и окислителя равно $\gamma_0^2 / (R_0^2 - r_0^2)$, где r_0 — радиус внутренней трубки, по которой в зону горения подается горючее, R_0 — радиус внешней трубки, по которой в зону горения подается окислитель; 2) коэффициент взаимной диффузии двух газовых потоков постоянный; 3) смешение двух потоков происходит только за счет диффузии; 4) взаимная диффузия двух газовых потоков происходит в радиальном направлении; 5) фронт пламени представляет собой геометрическую поверхность, на которой горючее и окислитель находятся в стехиометрическом соотношении и реагируют с образованием продуктов сгорания.

Сохраняя подход Бурке — Шумана к описанию основных процессов в таком факеле и варьируя содержание воды в потоке газообразного горючего, рассмотрим влияние добавок воды на высоту, его форму, распределение концентраций и температуры. В расчетах будем использовать в качестве горючего метан так как, в соответствии с [3, 4], перед горением углеводородного топлива происходит стадия термического пиролиза, после которого топливо распадается на углеводородные фракции и одной из наиболее представительных (24 %) является фракция метана [10].

1. Адиабатическая температура факела

Адиабатическая температура факела — одна из важнейших характеристик процесса сжигания топлив.

Знание ее значений необходимо для оценки эффективности процесса горения в целом. Так как введение в состав горючего части воды снижает общую калорийность топлива, то следует ожидать соответствующего снижения и адиабатической температуры.

Исходя из уравнения теплового баланса, выражение для адиабатической температуры можно записать в виде:

$$T = T_0 + \frac{Q}{c_M + \frac{C_W}{1-C_W} c_W + \left(\frac{C_N}{(1-C_N)} c_N + c_O \right) \alpha \gamma}, \quad (1)$$

где

$$\alpha = \frac{v_M}{v_O} \frac{1 + \frac{C_W \mu_M}{(1-C_W) \mu_W} \left(\frac{R_0^2}{r_0^2} - 1 \right)}{1 + \frac{C_N \mu_O}{(1-C_N) \mu_N}}, \quad \gamma = \frac{v_M \mu_M}{v_O \mu_O}. \quad (2)$$

Здесь α — коэффициент избытка окислителя, $T_0 = 300$ К — температура холодной смеси, v_O — количество моль окислителя, v_M — количество моль горючего, γ — стехиометрическое соотношение реагентов, $Q = 43260$ кДж/кг — тепловой эффект реакции метана с кислородом [12], C_N — относительная массовая концентрация азота в воздухе, C_W — относительная массовая концентрация воды в составе горючей смеси, μ_O , μ_M , μ_N , μ_W — молярные массы кислорода, метана, азота, воды, c_O , c_M , c_N , c_W — удельные теплоемкости кислорода, азота, метана и воды соответственно.

Расчет адиабатической температуры производился с учетом значения коэффициента избытка окислителя. При $\alpha > 1$ тепловой эффект реакции считался равным αQ . Как видно из рис.1, оценка адиабатической температуры сгорания водо-топливной смеси метана с воздухом показывает, что в широкой области изменения процентного содержания воды, в частности, для кривой 1 до 56 % (44 % — содержание метана в горючей смеси), значение температуры слабо меняется. Это объясняется тем, что относительная доля воды невелика по отношению к общему количеству инерта, включающего азот и воду. Так, например, соотношению воды и метана 1:1 соответствует соотношение воды и азота 1:16.

Скачку производной $\frac{dT}{dC_W}$ на приведенных зависимостях (рис. 1, кривые 1 — 5) соответствует точное значение $\alpha = 1$.

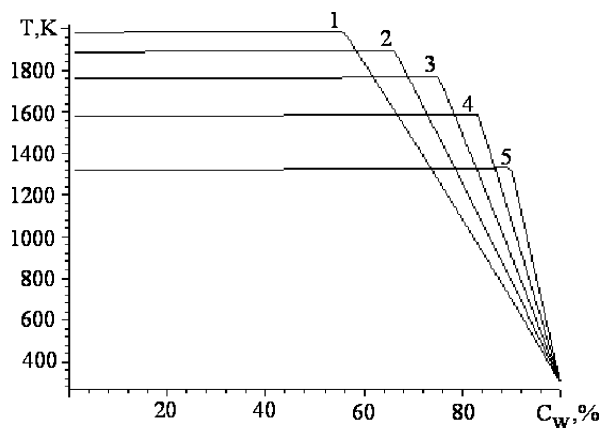


Рис. 1. Зависимость адиабатической температуры T от концентрации воды C_w при соотношениях R_0/r_0 : 1 — 2,5; 2 — 2,25; 3 — 2; 4 — 1,75; 5 — 1,5

При уменьшении отношения R_0/r_0 соответственно уменьшается поток воздуха и, как это следует из (2), значение коэффициента избытка $\alpha = 1$ достигается при большем содержании воды. С другой стороны, увеличение содержания воды как инертного компонента, естественно, приводит к снижению адиабатической температуры (1). Это видно из сравнения кривых 1 — 5.

Распределение концентраций

Для расчета распределения концентраций горючего и окислителя в диффузионном факеле метана рассмотрим предложенную в [11] задачу Бурке — Шумана с учетом введения добавок воды в состав горючего компонента. Уравнение диффузии для разности приведенных концентраций окислителя

и горючего $p = \frac{a_O}{v_O} - \frac{a_M}{v_M}$, в соответствии с [11], имеет вид

$$\frac{V}{D} \frac{\partial p}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p}{\partial r} \right), \quad (3)$$

где a_O — концентрация окислителя, a_M — концентрация горючего, D — коэффициент диффузии горючего, V — скорость подачи горючего в зону горения. С учетом сделанных предположений и цилиндрической симметрии задачи, решение уравнения (3) имеет вид:

$$p(r, z) = \bar{p} - \sum_{i=1}^{\infty} A_i J_0^0(r\varphi_i/R_0) \exp(-s_i z), \quad (4)$$

где

$$\bar{p} = p|_{z=\infty} = \frac{1}{v_M} \left[\frac{\alpha}{\left(\frac{R_0^2}{r_0^2} - 1\right)} - \left(1 + \frac{\alpha}{\left(\frac{R_0^2}{r_0^2} - 1\right)} \left(\frac{r_0}{R_0}\right)^2 \right) \right], \quad s_i = \frac{D}{V} \frac{\varphi_i^2}{R_0^2},$$

$$A_i = \frac{2}{v_M} \left(1 + \frac{\alpha}{\left(\frac{R_0^2}{r_0^2} - 1\right)} \right) \frac{r_0}{R_0} \frac{1}{\varphi_i} \frac{J^1(r_0 \varphi_i / R_0)}{(J^0(\varphi_i))^2}. \quad (5)$$

Здесь J^0 и J^1 — функции Бесселя первого рода, φ_i — корни уравнения $J^1(\varphi) = 0$ ($\varphi_i < \varphi_{i+1}$), \bar{p} — значения функции p на большом удалении от среза внутренней трубки (или асимптотика решения при $t \rightarrow \infty$).

На рис.2 приведено распределение концентраций метана и кислорода, рассчитанное по формуле (4) с учетом первых пяти членов ряда.

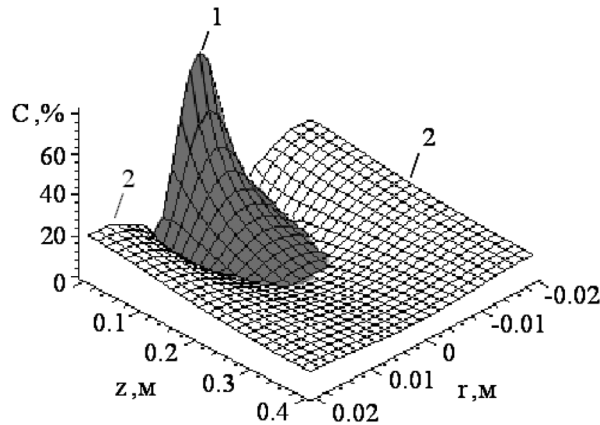


Рис. 2. Распределение концентраций горючего и окислителя в случае избытка окислителя: зона 1 — распределение концентрации горючего; зона 2 — распределение концентрации окислителя; $C_w = 50\%$; $r_0 = 0.005$ м; $R_0 = 0.02$ м; $\alpha = 2.73$.

В расчетах принималось: $V = 1$ м/с, $D = 0.00192$ м²/с, $\nu_O = 2$ моль, $\nu_M = 1$ моль. Значение D взято из [13]. При изменении процентного содержания паров воды соответствующим образом учитывалось изменение коэффициентов переноса.

Линия раздела областей 1 и 2 на рис.2 соответствует местоположению фронта диффузионного факела, основным параметром которого является его высота, то есть значение z при $r = 0$ для случая избытка окислителя или значение z при $r = R_0$ при недостатке окислителя. Высота факела меняется в зависимости от соотношения входных потоков и содержания воды в горючей смеси.

Зависимость высоты факела от содержания воды

Полагая для расчета высоты факела в (4) $p(r, z) = 0$ и, просуммировав до пятого порядка, получим трансцендентное уравнение

$$\bar{p} - \sum_{i=1}^5 A_i J^0(r\varphi_i/R_0) \exp(-s_i z) = 0, \quad (6)$$

которое неявно содержит зависимость высоты факела от соотношения сечений входных потоков, содержащих горючее и окислитель, и от концентрации воды C_W .

На рис. 3 представлена зависимость высоты факела Z_f от соотношения между радиусами входных потоков при фиксированной концентрации воды C_W в составе горючего, полученная после преобразований из уравнения (6). Возрастающим кривым соответствует область недостатка окислителя, ниспадающим — его избытка.

Видно (рис.3), что при фиксированном значении концентрации воды увеличение соотношения между радиусами входных потоков приводит к тому, что возрастающие зависимости сменяются на убывающие при достижении некоторого значения этого соотношения. Сравнение кривых 1 — 4 показывает, что с увеличением процентного содержания воды в составе горючего при постоянном соотношении R_0/r_0 высота факела уменьшается в области избытка окислителя. Это вызвано ростом значения коэффициента избытка окислителя с увеличением водного компонента. При этом, поскольку с увеличением водного компонента доля метана уменьшается, происходит смещение коэффициента избытка окислителя в сторону его увеличения. Асимптоты кривых 1 — 4 представляют границы раздела областей недостатка и избытка окислителя и соответствуют значению коэффициента избытка, равному единице.

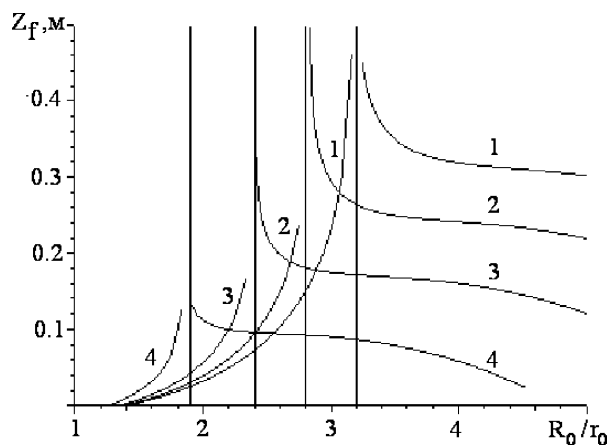


Рис. 3. Зависимость высоты факела от соотношения R_0/r_0 при фиксированном значении концентрации воды C_w : 1) $C_w = 20\%$; 2) $C_w = 40\%$; 3) $C_w = 60\%$; 4) $C_w = 80\%$

На рис.4 представлена зависимость высоты факела Z_f от процентного содержания воды C_w для различных соотношений между радиусами входных потоков.

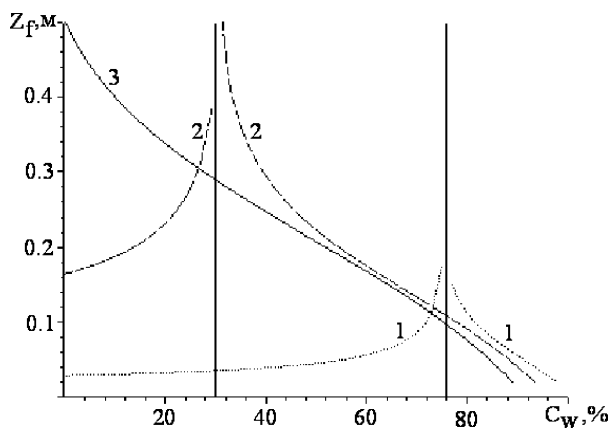


Рис.4. Зависимость высоты факела Z_f от содержания воды C_w : 1) $R_0/r_0 = 1.4$; 2) ----- $R_0/r_0 = 2$; 3) ——— $R_0/r_0 = 4$

Как показано на рис. 4, для кривых с малым отношением R_0/r_0 реализуются два типа зависимости. При фиксированном соотношении между сечениями входных потоков увеличение процентного содержания воды в эмульсии приводит к тому, что при достижении критической концентрации ($\alpha = 1$) недостаток окислителя сменится избытком.

Видно, что в случае избытка окислителя (правые ветви кривых 1, 2 и кривая 3) с увеличением процентного содержания воды высота факела уменьшается. Это происходит вследствие того, что требуется меньше окислителя для полного выгорания горючего. В случае недостатка окислителя — наоборот. В этом случае, так как фронт пламени развернут к периферии, с увеличением содержания воды сокращение зоны, занимаемой горючим, приводит к увеличению высоты факела.

Таким образом, вода играет роль регулятора структуры диффузионного факела предварительно не перемешанных компонентов углеводородного горючего и окислителя. Это объясняется смещением коэффициента избытка окислителя в сторону увеличения окислителя при возрастании содержания воды в составе горючего и наоборот. Можно утверждать, что точность расчетов будет возрастать при увеличении доли кислорода в составе смеси.

Литература

1. Хитрин Л.Н. Физика горения и взрыва. — М.: Изд. МГУ, 1957. 442 с.
2. Ксандопуло Г.И., Дубинин В.В. Химия газофазного горения. М.: Химия, 1987. 240 с.
3. Иванов В.М. Топливные эмульсии. М.: Изд. АН СССР, 1962. 216 с.
4. Иванов В.М., Канторович Б.В. Топливные эмульсии и суспензии. М.: Металлургиздат, 1963. 183 с.
5. Яковлев А.В. и др. Воспламенение обратных водо-топливных эмульсий // Химия и технология топлив и масел. 1984, № 12. с. 15 — 17.
6. Муталибов А.А. и др. Некоторые особенности процессов сгорания водно-бензиновых эмульсий в воздухе // Химическая физика. 1983, № 5. с. 683 — 687.
7. Комиссаров Л.А. и др. О перспективах применения обводненных топлив в виде эмульсий на тепловых электростанциях // Новые методы сжигания топлива и вопросы теории горения. М.: Наука, 1972. 182 с.
8. Burke S.P., Schumann T.E. Diffusion flames // Industry and Engineering Chemistry. 1928. Vol.20, № 10. p.998–1004.
9. Скогарев В.Г. Стационарное горение предварительно испаренной водотопливной эмульсии // Дисперсные системы, XVII конф. стран СНГ, 23 – 27 сент. 1996 г.
10. Жоров Ю.М. Моделирование физико-химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. М.: Химия, 1978. 376с.

11. Зельдович Я.Б. и др. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980. 480 с.
12. Глушко В.П. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Справочник [В 5т.]. М.: Изд. АН СССР, 1973, т.3. 578 с.
13. Бретшнайдер С.С. Свойства газов и жидкостей. М.-Л.: Химия [Ленингр. отд.], 1966. 535 с.

В. Л. Захарченко, Є. М. Кондратьєв, І. В. Жиганюк

Вплив води як інертного додатку на структуру ламінарного дифузійного факела метана

АНОТАЦІЯ

Розглядається вплив парів води як інертного додатку у складі пального на характеристики ламінарного дифузійного факела попередньо не перемішаних реагентів. Показана застосовність наближення Бурке — Шумана для моделювання характеристик факела заздалегідь випареної водно-паливної емульсії. Розрахована висота факела у залежності від різного вмісту води. Побудовані розподіли концентрацій окислювача та пального у дифузійному факелі. Доведена оцінка адіабатичної температури факела від відсоткового вмісту води у складі пального.

V. L. Zakharchenko, E. N. Kondratyev, I. V. Zhiganyuk

The influence of vapor of the water as inert component on the structure of a laminar diffusion flame of methane

SUMMARY

The influence of vapors of the water as inert component in composition combustible on the characteristics of a laminar diffusion flame beforehand of not mixed reagents is considered. The applicability of Burke — Schumann approximation for simulation of characteristics of a flame of the beforehand evaporated water-fuel emulsion is demonstrated. The height of a flame is calculated depending on different water content. The distributions of concentrations of an oxidizing agent and combustible in a diffusion flame are constructed. The estimation of adiabatic temperature of a flame from percentage of water in composition combustible is reduced.

К. И. Семенов

Одесский национальный университет им. И.И.Мечникова, г. Одесса

Особенности остывания седиментирующих в воздухе высокотемпературных металлических микрочастиц

Получены экспериментальные зависимости светимости от времени для седиментирующих в воздухе высокотемпературных (1000°C - 4000°C) металлических микрочастиц (Cu, W, Mo, Fe, Ta), на основании которых построены кривые изменения температуры. Зависимости имеют особенности, выражающиеся в резком изменении светимости, визуально наблюдаемые как вспышки. Проведены дополнительные экспериментальные исследования светимости неподвижных медных частиц в атмосфере инертного газа. Предложен механизм возникновения вспышек с учетом изменения излучательной способности поверхности и химических реакций в объеме частиц.

Исследование процессов взаимодействия высокотемпературных металлических частиц с различными газовыми средами позволяет лучше понять процессы горения металлических топлив. Материалы, получаемые при заалке таких частиц, обладают ценными, а нередко и уникальными свойствами [1,2]. В связи с этим представляется важным рассмотреть явление резкого изменения светимости седиментирующих в воздухе высокотемпературных частиц различных металлов.

В работах [3,4] рассмотрены результаты исследований остывания седиментирующих в воздухе металлических микрочастиц, полученных с помощью импульсного дугового генератора [5,6]. На рис.1 приведены уточненные зависимости температуры от времени лета для частиц из молибдена, вольфрама, меди и тантала.

Согласно модели процесса остывания, предложенной в [4,5], для медных частиц полагается, что при температуре $T > 1800^{\circ}\text{C}$ [6] Cu_2O на поверхности микрочастицы нет, а при $T < 1800^{\circ}\text{C}$ — есть, при этом частица содержит включения раствора O_2 в Cu в стехиометрическом соотношении как для Cu_2O . Затем, при температуре около 1200°C , происходит реакция $2\text{Cu} + \text{O} = \text{Cu}_2\text{O}$, приводящая к разогреву микрочастицы. В рамках описанной модели остается неясным: почему появление окисла на поверхности капли, например для меди при 1800°C , не сопровождается увеличением сигнала с пирометра, измеряющего температуру по монохроматической яркости, т.к. для жидкой Cu излучательная способность равна 0,05-0,2, а для Cu_2O — около 0,7 [7,8]; почему иногда наблюдается несколько включений после прохождения одной вспышки (резкий нагрев частицы предполагает синхронность прохож-

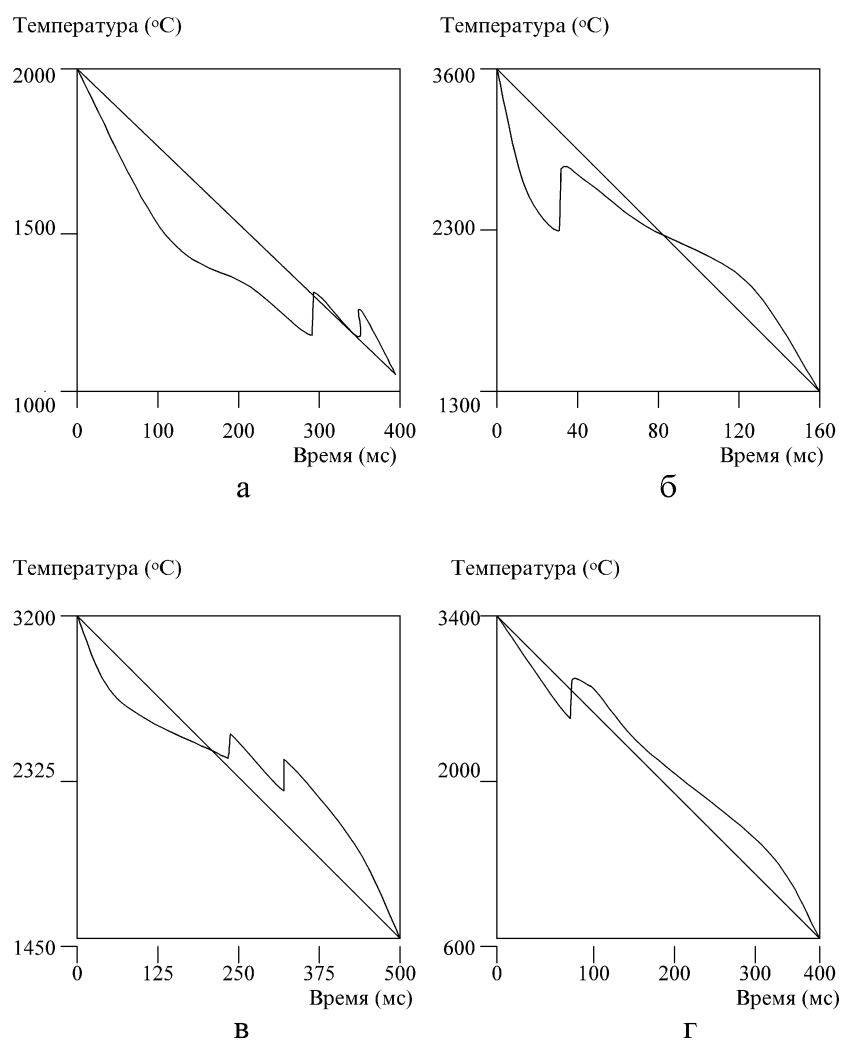


Рис. 1. Характерный вид экспериментальных зависимостей изменения температуры во времени оседающих в воздухе высокотемпературных микрочастиц металлов: (а) — медь; (б) — вольфрам; (в) — тантал; (г) — молибден

дения реакции в множестве включений, а прохождение реакции в одном из включений меняет основной параметр определяющий начало реакции — температуру — для других включений); почему вспышки наблюдаются на металлах, в которых после прохождения вспышки не выявлено никаких включений; почему для равных по диаметру медных частиц с одинаковыми по интенсивностям вспышками величина включений различна ?

Таких противоречий не возникает, если предположить, что вспышки (по крайней мере, некоторые) связаны с изменением излучательной способности микрочастиц. Например, медная микрочастица, исходя из фазовой диаграммы, при понижении температуры до 1800°C — 1400°C будет только растворять кислород, при более низкой температуре начнет образовываться Cu_2O , которая хорошо растворяется в меди. Выше 1200°C , согласно фазовой диаграмме системы медь-кислород, частица состоит из двух жидкостей — раствора около 7% кислорода в меди и раствора Cu_2O в меди, которые между собой не смешиваются. При температуре около 1200°C раствор Cu_2O в меди распадается на Cu_2O и Cu , но т.к. температура плавления Cu_2O равна 1235°C , то окись, после выделения, затвердевает, образуя на поверхности корку, что приводит к изменению излучательной способности, визуально проявляющейся как вспышка. Для медных частиц, которые вспыхивают дважды, в рамках предложенного механизма, можно предположить, что на поверхности микрочастицы могут последовательно образовываться соединения с возрастающими излучательными способностями (медь имеет такие соединения — Cu_2O и CuO).

Для экспериментальной проверки была собрана установка, позволяющая контролируемо нагревать и охлаждать микрочастицы с одновременным определением ее монохроматической яркости. При этом частица меди и расположенная рядом термопара, отделенные, для исключения взаимодействия материалов термопары с частицей, кварцевой трубкой, помещались в другую кварцевую трубку, большего диаметра, которая закрывалась с торцов заглушками. Трубочка с частицей могла нагреваться газовой горелкой, при этом температура частицы в определенной степени соответствовала температуре спая термопары, э.д.с. которой измерялась вольтметром. Светимость частицы контролировалась яркостным пирометром (со стеклянным светофильтром с длиной волны пропускания $0,65$ мкм).

Медная частица после седиментации (с проявлением вспышек или без) помещалась в кварцевую трубочку вблизи термопары. После продувки аргоном трубочка закрывалась и нагревалась до необходимой температуры, при этом скоростью ввода трубочки в пламя можно было варьировать скорость нагрева частицы.

При нагревании медной частицы, которая седиментировала со вспышкой, пирометром отмечалось повышение светимости при температуре около 1200°C , визуально наблюдался распад и растворение поверхностного слоя окисла меди, при медленном охлаждении наблюдалась обратная последова-

тельность- поверхность жидкой меди покрывалась отдельными островками, которые росли, дрейфовали по поверхности, сливались и, наконец, образовывали сплошную неровную корку. В процессе дальнейшего охлаждения при температуре около 1000°C происходила еще одна вспышка, но теперь визуально на поверхности не наблюдалось никаких изменений. В месте прикрепления частицы к стенке кварцевой трубочки во время вспышки при 1200°C изменений светимости не отмечалось, а при прохождении второй — при 1000 °C- светимость места крепления повышалась, т.е. частица прогревалась выделяющимся внутри нее теплом. Когда брались частицы с достаточно малым временем седиментации, то изменений светимости не наблюдалось, с увеличением времени седиментации на частицах при их аналогичном исследовании возникала все более значительная окисная пленка, но вторая вспышка возникала только после определенного времени седиментации. И, наконец, когда бралась частица, искусственно доокисленная на воздухе (нагревом до 1000°C в течении минуты) до почти полного окисления меди, то изменений светимости при температуре 1200°C не наблюдалось, при 1000°C вспышка сохранялась. После размазывания (встряхиванием трубочки) капли окисла в слой, вспышка при температуре 1000°C также сохранялась, и реакция зарождалась в одном или двух местах и радиально распространялась по всему образцу. Скорость прохождения ее также зависела от скорости охлаждения, при некоторой длительности охлаждения вспышка не проявлялась. Полностью окисленных частиц после их генерации и седиментации не получалось, что согласуется с оценкой времени насыщения кислородом медной частицы по [9] $t=3,14 r^2 / (36 D)$, где: t - время насыщения, r - радиус частицы, D - коэффициент диффузии кислорода в меди. Вычисленное время насыщения порядка десятых долей секунды, а все время движения частиц меди около 0,5 с. Кроме того, после появления окисной пленки и спада температуры, процесс диффузии резко замедляется, что вполне объясняет проявление первой вспышки на всех генерируемых микрочастицах.

Таким образом, резкое изменение светимости седиментирующей высокотемпературной медной частицы при температуре 1200°C связано с изменением излучательной способности ее поверхности (и, частично, с небольшим изменением диаметра, т.к. плотность образующегося окисла меньше плотности меди), при температуре около 1000°C происходит химическая реакция доокисления Cu_2O до CuO . Азот воздуха слабо растворяется в меди, азид меди распадается при 300°C, поэтому взаимодействие с азотом не учитывалось.

На рис.2 показан скорректированный ход температурных зависимостей с учетом изменения излучательной способности частиц. Для вольфрамовых частиц процесс представляется таким: испаряющийся с поверхности вольфрам вступает в реакцию с кислородом воздуха, образуя зону реакции на некотором удалении от частицы. Образующаяся на поверхности окись испаряется. При падении температуры до 1287°C [10] на поверхности появляется

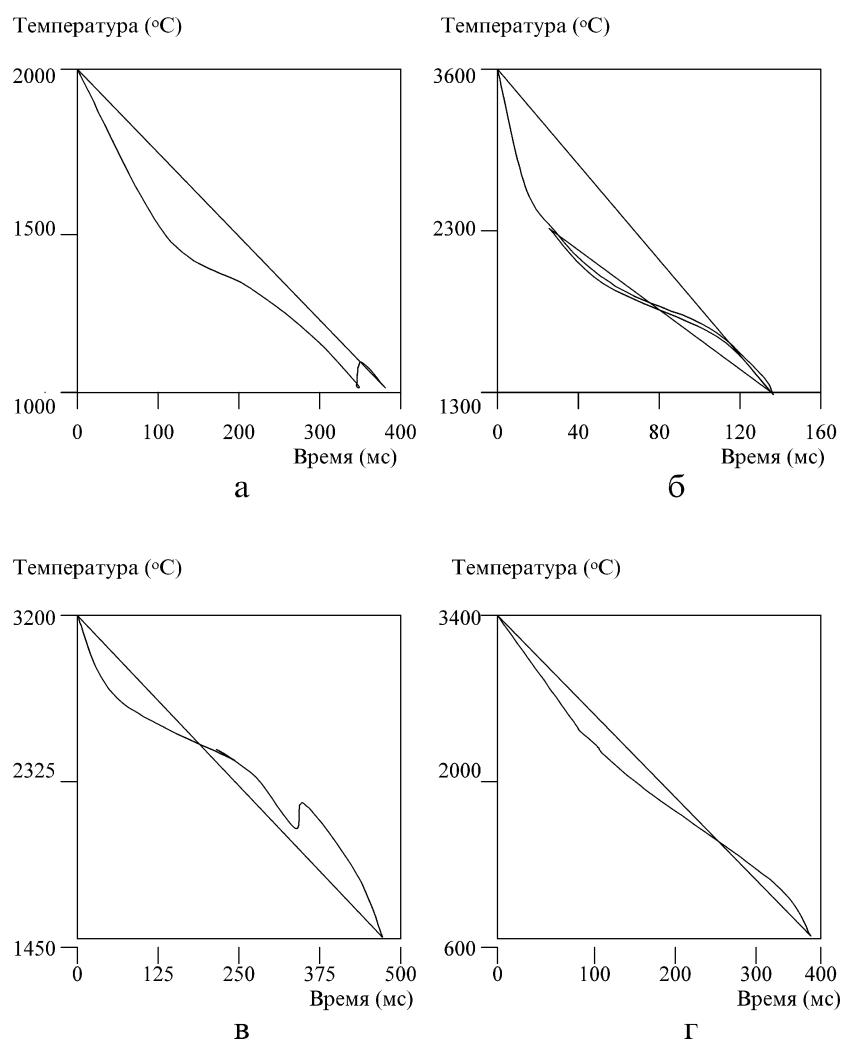


Рис. 2. Зависимости температуры во времени для седиментирующих в воздухе высокотемпературных микрочастиц металлов с учетом изменения излучательной способности: (а) — медь; (б) — вольфрам; (в) — тантал; (г) — молибден

оксид вольфрама. При этом, во-первых, меняется излучательная способность поверхности с 0,45 до 0,8, во-вторых, резко увеличивается плотность конденсированной фазы, что увеличивает яркость объекта. Для частиц из Мо вспышка наблюдается при температуре около 2200°C, что соответствует температуре кипения системы Mo+MoO₂ [11], т.е. в данном случае можно провести аналогичные рассуждения. Частицы из Та первый раз вспыхивают при температуре около 2200°C, что практически совпадает с температурой кипения Ta₂O₅ (2227°C). Для исследованных интервалов температур частицы из металлов, имеющих большую растворимость кислорода, вспыхивали дважды (Cu и Ta), а частицы из металлов с плохой растворимостью кислорода — один раз (W и Mo).

Интересным фактом является появление вспышек в среде инертного газа после некоторого времени движения в воздухе, предполагается, что успешный раствориться кислород при понижении температуры частицы диффундирует из нее и в соответствующий момент образует на поверхности пленку окисла.

Литература

1. Крапошин В.Е., Линецкий Я.Л. Физические свойства металлов и сплавов в аморфном состоянии // Итоги науки и техники. Металловедение и термическая обработка. — М.: ВИНТИ. 1982. — Вып. 16. — С. 3–68.
2. Аморфные сплавы / А.И.Манохин, Б.С.Митин, В.А.Васильев, А.В.Ревякин. — М.: Металлургия, 1984. — 160 с.
3. Suslov A.V., Semionov K.I. Interaction of High — Temperature Monodispersed Metal Particles with Gases // Abstr. Of 14th Annual Meeting of the American Association for Aerosol Research. — Pittsburgh. USA. — 1995. — P.37.
4. Dreizin E. L., Suslov A. V. and Trunov M. A. General Trends in Metal Particles Heterogeneous Combustion // Combust. Sci. And Tech. — 1993. — Vol.90. — P. 79–99.
5. Суслов А.В. Тепло- электрофизические аспекты монодиспертирования металлов повышенной тугоплавкости: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.14. — Одесса, 1998. — 322 с.
6. Краткий справочник по химии / Ред. И. Т. Гороновский и др. К.: Наукова Думка, 1987. 832 с.
7. Температурные измерения. Справочник / Ред. О.А. Герашенко и др. К.: Наукова Думка, 1989. 704 с.
8. Излучательные свойства твердых материалов. Справочник / Ред. А. Е. Шейндлина. М.: Энергия, 1974. 472 с.

К. І. Семенов

**Особливості остигання седиментуючих
у повітрі металевих мікрочасток**

АНОТАЦІЯ

Отримано експериментальні залежності світності від часу для седиментуючих у повітрі високотемпературних (1000°C—4000 °C) металевих мікрочастинок (Cu, W, Mo, Fe, Ta), на підставі яких побудовані криві зміни температури. Залежності мають особливості, що виражаються в різкій зміні світності, спалаху, що спостерігаються візуально як. Проведено додаткові експериментальні дослідження світності нерухомих мідних часток в атмосфері інертного газу. Запропоновано механізм виникнення спалахів з урахуванням зміни ізлучательної здатності поверхні і хімічних реакцій в обсязі часток.

Semenov K. I.

Peculiarities of cooling high temperature metal particles sediment in air

SUMMARY

The experimental temporal luminosity dependences for moving high-temperature (1000°C-4000°C) metal micro particles (Cu, W, Mo, Fe, Ta) have been received . The dependences have peculiarities in the form of sharp change of luminosity, visually observable as flares. The additional experimental studying of fixed copper particles luminosity in inert gas has been carried out. The mechanism of flares origin due to emissivity changes and chemical reactions in particle bulk has been proposed .

УДК 536.46:662.612

В. В. Калинин, С. Г. Орловская, О. Н. Гулеватая

Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова

Высокотемпературный тепломассообмен нагреваемой лазерным излучением углеродной частицы с учетом стефановского течения на ее поверхности

Решена задача о тепломассообмене и химическом превращении пористой углеродной частицы с учетом стефановского течения на ее поверхности. Выявлены закономерности временных зависимостей температуры, диаметра и плотности пористой углеродной частицы, нагреваемой лазерным излучением. Впервые определены критические значения диаметров и плотностей пористой углеродной частицы, при которых происходит самопроизвольный переход с высокотемпературного на низкотемпературный режим. Изучено влияние внутрипористого реагирования на характерные времена высокотемпературного тепломассообмена и температуру горения в зависимости от диаметра пористой углеродной частицы при различных интенсивностях лазерного излучения.

Разработка энергосберегающих и экологически чистых методов использования диспергированных угольных топлив в энергетических установках требует детальных исследований взаимовлияния процессов тепломассообмена (ТМО) и кинетики химических реакций внутри пор и на внешней поверхности углеродной частицы с учетом стефановского течения. В работе [1] проведен анализ влияния стефановского течения на устойчивые и критические режимы ТМО углеродной частицы. Однако эта задача решалась без учета внутренней диффузии и химических реакций на поверхности пор внутри углеродной частицы. Результаты исследований критических состояний и временных характеристик высокотемпературного ТМО пористых углеродных частиц [2] свидетельствуют, что такой учет необходим.

В данной работе решается задача о высокотемпературном тепломассообмене и кинетики химических реакций $C+O_2=CO_2$ (I), $2C+O_2=2CO$ (II) неподвижной пористой углеродной частицы с учетом стефановского течения на ее поверхности. Изучается влияние внутрипористого реагирования на характеристики высокотемпературного ТМО углеродной частицы, нагреваемой лазерным излучением.

Уменьшение диаметра и плотности частицы с течением времени в результате протекания химических реакций (I) и (II) на внешней поверхности частицы и в порах описывается уравнениями

$$W_{c,s} = -\frac{1}{2} \rho \frac{\partial (d)}{\partial t} = \frac{M_C}{M_{O_2}} (k_1 + 2k_2) \rho_g n_{O_2,s}, \quad d(t=0) = d_b, \quad (1)$$

$$W_{c,v} = -\frac{1}{6} d \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{d}{6} F_v \frac{M_C}{M_{O_2}} (k_1 + 2k_2) \rho_g \langle n_{O_2} \rangle_v, \quad \rho(t=0) = \rho_b \quad (2)$$

$$k_1 = k_{0,1} \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right), \quad k_2 = k_{0,2} \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right).$$

Здесь $W_{c,s}$, $W_{c,v}$ — скорости химического реагирования углерода на внешней поверхности частицы и на поверхностях пор, кг/м²с; d — диаметр частицы, м; t — время, с; ρ , ρ_g — плотность газа и частицы, кг/м³; T — температура частицы, К; k_1 , k_2 — соответственно, константа скорости химической реакции (I) и (II), м/с; $k_{0,1}$, $k_{0,2}$ — предэкспоненциальный множитель, м/с; E_1 , E_2 — энергия активации, Дж/моль; $n_{O_2,s}$ — относительная массовая концентрация кислорода на поверхности частицы; $\langle n_{O_2} \rangle_v$ — среднее по объему частицы значение концентрации кислорода; F_v — удельная поверхность пор, м⁻¹; M_C , M_{O_2} — молярные массы углерода и кислорода, кг/кмоль.

Параллельные химические реакции (I), (II) и тепломассообмен протекают взаимосвязано через обратную связь с температурой частицы. Временная зависимость температуры пористой частицы, нагреваемой лазерным излучением, определяется выделением теплоты в результате химических реакций (I) и (II); поглощением энергии лазерного излучения; теплообменом поверхности частицы с газом, который осуществляется теплопроводностью, конвекцией и стефановским течением; теплообменом излучением с холодными стенками реакционной установки. Для этого случая дифференциальное уравнение, описывающее временную зависимость температуры пористой углеродной частицы при $Bi_0 < 1$, представим в виде:

$$\frac{1}{6} \rho \rho d \frac{\partial T}{\partial t} = q_{ch,v} + q_{ch,s} + q_{las} - q_{\lambda,sf} - q_{rad}, \quad T(t=0) = T_b, \quad (3)$$

где $q_{ch,v}$, $q_{ch,s}$ — плотность тепловыделения за счет химических реакций соответственно в порах и на внешней поверхности частицы, Вт/м²; $q_{\lambda,sf}$ — плотность теплового потока теплопроводностью и стефановским течением, Вт/м²; q_{rad} — плотность теплового потока излучением, Вт/м²; q_{las} — мощность ла-

зерного излучения, поглощенного единицей поверхности частицы, Вт/м²; c — удельная теплоемкость частицы, Дж/(кг·К); $Вю$ — критерий Био.

Мощность лазерного излучения, поглощённая единицей поверхности частицы, и плотность теплового потока излучением находятся из формул

$$q_{las} = \frac{1}{4} K \alpha I, \quad q_{rad} = \epsilon \sigma (T^4 - T_w^4), \quad (4)$$

I — интенсивность лазерного излучения, Вт/м²; $K\alpha$ — фактор эффективности поглощения частицей лазерного излучения; T_w — температура стенок реакционной установки, К; ϵ — коэффициент черноты частицы, $\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8}$ — постоянная Стефана-Больцмана, Вт/м²К⁴.

Плотность теплового потока, характеризующего теплообмен частицы с газом, определяется градиентом температуры газа на поверхности частицы и стефановским течением

$$q_{\lambda, sf} = q_{\lambda} + q_{sf} = -\lambda_g \left. \frac{\partial T_g}{\partial r} \right|_{r_s} + U_s c_g \rho_g T_g \Big|_{r_s}, \quad (5)$$

где T_g , λ_g , c_g — температура, коэффициент теплопроводности и удельная теплоемкость газа, К, Вт/(м·К), Дж/(кг·К); U_s — скорость стефановского течения на поверхности частицы, м/с.

Плотности химического тепловыделения в результате поверхностного и внутреннего реагирования определяются концентрациями кислорода на поверхности и в объеме частицы

$$q_{ch, s} = (q_1 k_1 + q_2 k_2) \rho_g n_{O_2, s}, \quad q_{ch, v} = (q_1 k_1 + q_2 k_2) \rho_g \langle n_{O_2} \rangle_v \frac{F_v d}{6}, \quad (6)$$

где q_1 , q_2 — тепловые эффекты химических реакций, Дж/кгO₂.

Суммарная плотность химического тепловыделения

$$q_{ch} = q_{ch, s} + q_{ch, v}. \quad (7)$$

Среднее по объему значение относительной концентрации кислорода найдем из приближенного решения задачи диффузии при наличии химических реакций (I) и (II) внутри частицы:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial n_{O_2}}{\partial \xi} \right) - S e_v^2 n_{O_2} = 0,$$

$$\xi^2 \left. \frac{\partial n_{O_2}}{\partial \xi} \right|_{\xi=0} = 0; \quad n_{O_2}(\xi=1) = n_{O_2, s}.$$

Решение этой задачи имеет вид

$$n_{O_2}(\xi) = n_{O_2,s} \frac{1}{\xi} \frac{sh(Se_v \xi)}{sh Se_v}, \quad Se_v = \sqrt{\frac{(k_1 + k_2)r_s^2 F_v}{D_v}},$$

где $\xi=r/r_s$ — безразмерная переменная; r, r_s — радиальная координата и радиус внешней поверхности частицы, м; n_{O_2} — относительная массовая концентрация кислорода в воздухе; Se_v — критерий Семенова; D_v — коэффициент внутренней диффузии, м²/с.

Тогда для среднего значения концентрации кислорода по объему частицы

$$\langle n_{O_2} \rangle_v = \frac{3 \int_0^{r_s} n_{O_2}(r) 4\pi r^2 dr}{4\pi r_s^3} \quad \text{получим}$$

$$\langle n_{O_2} \rangle_v = n_{O_2,s} \frac{k_v}{(k_1 + k_2)} \frac{6}{F_v d}, \quad k_v = \frac{D_v}{r_s} (Se_v \operatorname{cth} Se_v - 1), \quad (8)$$

где k_v — эффективная константа внутреннего реагирования.

Подставляя (8) в (6), получим

$$q_{ch,v} = \rho_g n_{O_2,s} (k_1 q_1 + k_2 q_2) \frac{k_v}{(k_1 + k_2)}, \quad (9)$$

$$q_{ch} = (k_1 q_1 + k_2 q_2) \left(1 + \frac{k_v}{(k_1 + k_2)} \right) \rho_g n_{O_2,s}. \quad (10)$$

Концентрацию кислорода на поверхности частицы $n_{O_2,s}$ найдем из равенства плотности массового потока кислорода $j_{O_2,s}$ суммарной скорости поверхностного и внутреннего реагирования

$$j_{O_2,s} = D \rho_g \left. \frac{\partial n_{O_2}}{\partial r} \right|_s - (\rho_g U)_s n_{O_2,s} = (k_1 + k_2) P_v \rho_g n_{O_2,s}, \quad (11)$$

где D — коэффициент диффузии, м²/с; $P_v = 1 + \frac{k_v}{k_1 + k_2}$ — величина, учитывающая внутреннее реагирование, при его отсутствии $P_v = 1$.

Аналогично для плотностей массовых потоков $j_{CO_2,s}$ и $j_{CO,s}$ запишем

$$j_{CO_2,s} = -D\rho_g \left. \frac{\partial n_{CO_2}}{\partial r} \right|_s + (\rho_g U)_s n_{CO_2,s} = \frac{M_{CO_2}}{M_{O_2}} k_1 P_v \rho_g n_{O_2,s}, \quad (12)$$

$$j_{CO,s} = -D\rho_g \left. \frac{\partial n_{CO}}{\partial r} \right|_s + (\rho_g U)_s n_{CO,s} = \frac{2M_{CO}}{M_{O_2}} k_2 P_v \rho_g n_{O_2,s}, \quad (13)$$

где $n_{CO_2,s}$, $n_{CO,s}$, M_{CO_2} , M_{CO} — относительные массовые концентрации и молярные массы двуокиси и окиси углерода.

Плотность потока азота

$$j_{N_2,s} = D\rho_g \left. \frac{\partial n_{N_2}}{\partial r} \right|_s - (\rho_g U)_s n_{N_2,s} = 0, \quad (14)$$

$n_{N_2,s}$ — относительная массовая концентрация азота.

Воспользовавшись условием $n_{O_2} + n_{CO_2} + n_{CO} + n_{N_2} = 1$, из (11)–(14) получим, что массовая скорость стефановского течения на поверхности частицы определяется химическим превращением твердой частицы в газообразные компоненты

$$(\rho_g U)_s = j_{CO_2,s} + j_{CO,s} - j_{O_2,s} - j_{N_2,s} = \frac{M_C}{M_{O_2}} (k_1 + 2k_2) P_v \rho_g n_{O_2,s}. \quad (15)$$

Обозначим безразмерную скорость стефановского течения на поверхности частицы

$$\eta_s = \frac{(\rho_g U)_s r_s}{\rho_g D} \approx \frac{U_s r_s}{D} = \frac{U_s}{\beta}, \quad \beta = \frac{D}{r_s}, \quad (16)$$

где β — коэффициент массообмена неподвижной частицы, м/с.

Тогда из (15) и (16) следует, что безразмерная скорость стефановского течения

$$\eta_s = \frac{M_C}{M_{O_2}} \frac{(k_1 + 2k_2)}{\beta} P_v n_{O_2,s}. \quad (17)$$

Для нахождения зависимостей температуры газа и концентраций газообразных компонент от радиальной координаты ($r_s < r < \infty$) необходимо решить уравнения теплопроводности, диффузии и неразрывности

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\lambda_g\frac{\partial T_g}{\partial r}\right) &= \frac{\partial}{\partial r}(c_g\rho_gUr^2), \\ \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\rho_gD\frac{\partial n_j}{\partial r}\right) &= \frac{\partial}{\partial r}(n_j\rho_gUr^2), \\ U_s r_s^2 &= Ur^2\end{aligned}\quad (18)$$

с граничными условиями $T_g(r=r_s)=T_{g,s}=T$, $T_g(r=\infty)=T_{g,\infty}$,
 $n_j(r=r_s)=n_{j,s}$, $n_j(r=\infty)=n_{j,\infty}$ где $j=1$ для O_2 , $j=2$ — CO_2 , $j=3$ — CO , $j=4$ — N_2 .

Предполагая, что $D = \lambda_g / (c_g \rho_g)$, и, обозначив $\eta = \frac{U_s r_s^2}{Dr}$, решение (18) представим в виде

$$T_g = \frac{(T - T_{g,\infty}) \exp(-\eta) + T_{g,\infty} \exp(-\eta_s) - T}{\exp(-\eta_s) - 1}, \quad (19)$$

$$n_j = \frac{(n_{j,s} - n_{j,\infty}) \exp(-\eta) + n_{j,\infty} \exp(-\eta_s) - n_{j,s}}{\exp(-\eta_s) - 1}, \quad j = 1, 2, 3, \quad (20)$$

$$n_{N_2} = n_{N_2,\infty} \exp(-\eta).$$

Подставляя (20), записанное для кислорода ($j=1$), в (11), и, выражая $n_{O_2,s}$ через η_s , получим трансцендентное уравнение для определения безразмерной скорости стефановского течения η_s на поверхности пористой частицы

$$\left[1 + \frac{M_C}{M_{O_2}} \left(1 + \frac{k_2}{(k_1 + k_2)}\right) n_{O_2,\infty}\right] \exp(-\eta_s) - \frac{\beta}{(k_1 + k_2)P_v} \eta_s - 1 = 0.$$

Анализ этого выражения для $\eta_s < 1$, что имеет место для широкого диапазона параметров частицы и газа приводит к аналитическому выражению для безразмерной скорости стефановского течения на поверхности частицы

$$\eta_s = \frac{U_{s,k} \cdot P_v}{\beta + (k_1 + k_2)P_{sf} \cdot P_v}, \quad (21)$$

$$P_{sf} = 1 + \frac{U_{s,k}}{k_1 + k_2}, \quad P_v = 1 + \frac{k_v}{k_1 + k_2},$$

где $U_{s,k} = \frac{M_C}{M_{O_2}}(k_1 + 2k_2)n_{O_2,\infty}$ — скорость стефановского течения при про-

текании химических реакций в кинетической области для сплошной частицы.

Тогда для поверхностной концентрации кислорода с учетом (21) и (17) имеем

$$n_{O_2,s} = \frac{\beta}{\beta + (k_1 + k_2)P_{sf} \cdot P_v} n_{O_2,\infty}. \quad (22)$$

Плотность химического тепловыделения определим, подставив (22) в (10)

$$q_{ch} = (q_1k_1 + q_2k_2)\rho_g n_{O_2,\infty} P_v \left(\frac{(k_1 + k_2)P_v \cdot P_{sf}}{\beta} + 1 \right)^{-1}. \quad (23)$$

При протекании реакций в диффузионной области $\left(\frac{(k_1 + k_2)P_v \cdot P_{sf}}{\beta} \gg 1 \right)$, которая реализуется при высоких температурах частицы, плотность химического тепловыделения и суммарная скорость химического реагирования углерода

$$q_{ch} = (q_1k_1 + q_2k_2)\rho_g n_{O_2,\infty} \frac{\beta}{(k_1 + k_2)P_{sf}},$$

$$W_C = \frac{M_C}{M_{O_2}}(k_1 + 2k_2)\rho_g n_{O_2,\infty} \frac{\beta}{(k_1 + 2k_2)P_{sf}}$$

не зависят от параметров внутреннего реагирования пористой частицы.

Для плотности теплового потока, описывающего теплообмен частицы с газом, подставляя (19) в (5), с учетом (17) получим

$$q_{\lambda,sf} = \frac{\lambda_g}{r_s} (T - T_g) + U_s c_g \rho_g \left(\frac{T + T_g}{2} \right), \quad (24)$$

где $U_s = \frac{M_C}{M_{O_2}}(k_1 + 2k_2)P_v n_{O_2,s}$ — скорость стефановского течения на внешней поверхности пористой частицы.

С учетом (15) — (17) временные зависимости диаметра и плотности пористой частицы представим в виде

$$\frac{\partial (d)}{\partial t} = -2 \frac{\rho_g}{\rho} \frac{U_s}{P_v}, \quad d(t=0) = d_b, \quad (25)$$

$$\frac{\partial (\rho)}{\partial t} = -\rho_g \frac{6}{d} U_s \frac{(P_v - 1)}{P}, \quad \rho(t=0) = \rho_b. \quad (26)$$

Используя дифференциальные уравнения (25), (26) и (3) с учетом (4), (22), (23) проведем анализ закономерностей высокотемпературного тепломассообмена и химического реагирования пористой углеродной частицы, нагреваемой лазерным излучением. Расчеты проводились для различных значений начальных диаметров частиц и мощностей лазерного излучения $q_{\text{las}} = 8 \cdot 10^5, 1.9 \cdot 10^6$ Вт/м². В качестве объекта исследований принимался антрацит марки АШ при $T_g = 293\text{K}, T_w = 293\text{K}, n_{O_2, \infty} = 0.23, P = 1$ атм и при следующих теплофизических и термокинетических свойствах $q_1 = 12.343 \cdot 10^6, q_2 = 6.843 \cdot 10^6$ Дж/кг O₂; $k_{0,1} = 4.5 \cdot 10^4, k_{0,2} = 13 \cdot 10^4$ м/с; $E_1 = 140030, E_2 = 154000$ Дж/моль; $R = 8.31$ Дж/моль; $F_v = 3 \cdot 10^7$ м⁻¹; $D_v = 7.5 \cdot 10^{-8}$ м²/с; $\epsilon = 0.78; \sigma = 5.67 \cdot 10^{-8}$ Вт/м²/К⁴; $\rho = 750$ кг/м³; $c = 947$ Дж/кг/К.

Поведение $T(t), d(t), \rho(t)$ углеродной частицы в поле лазерного излучения при q_{las} , большем критического значения (рис.1), характеризуется сменой трех последовательных стадий [1]: 1. — выход на высокотемпературный режим (рис.1а, до т.М.), длительность этой стадии — период индукции (t_{ind}); 2. — высокотемпературная стадия — от т.М (максимальной температуры) до т.Е, в которой происходит критический переход на низкотемпературный режим окисления, длительность этой стадии определим как время горения (t_{bur}); 3. — низкотемпературный режим до полного окисления частицы (после т. Е).

Анализ временных зависимостей скоростей химических реакций по углероду внутри $W_{c,v}$ и на поверхности частицы $W_{c,s}$ (рис.1, в), отношения констант скоростей этих реакций $k_v/(k_1 + k_2)$ (рис.1, д) показывает, что роль внутреннего реагирования на первой стадии велика ($W_{c,v} > W_{c,s}$ и $k_v > k_1 + k_2$). В момент перехода на высокотемпературный режим $W_{c,v}$ достигает максимального значения, а затем уменьшается в результате снижения концентрации кислорода, интенсивно потребляемого в химических реакциях на поверхности частицы. На высокотемпературной стадии $W_{c,s}$ намного больше скорости химических превращений в порах частицы $W_{c,v}$. При этом $k_v \ll (k_1 + k_2)$. В высокотемпературном режиме, в результате химических реакций углерода с воздухом в порах, плотность частицы существенно уменьшается (больше, чем в 3 раза, рис.1, б).

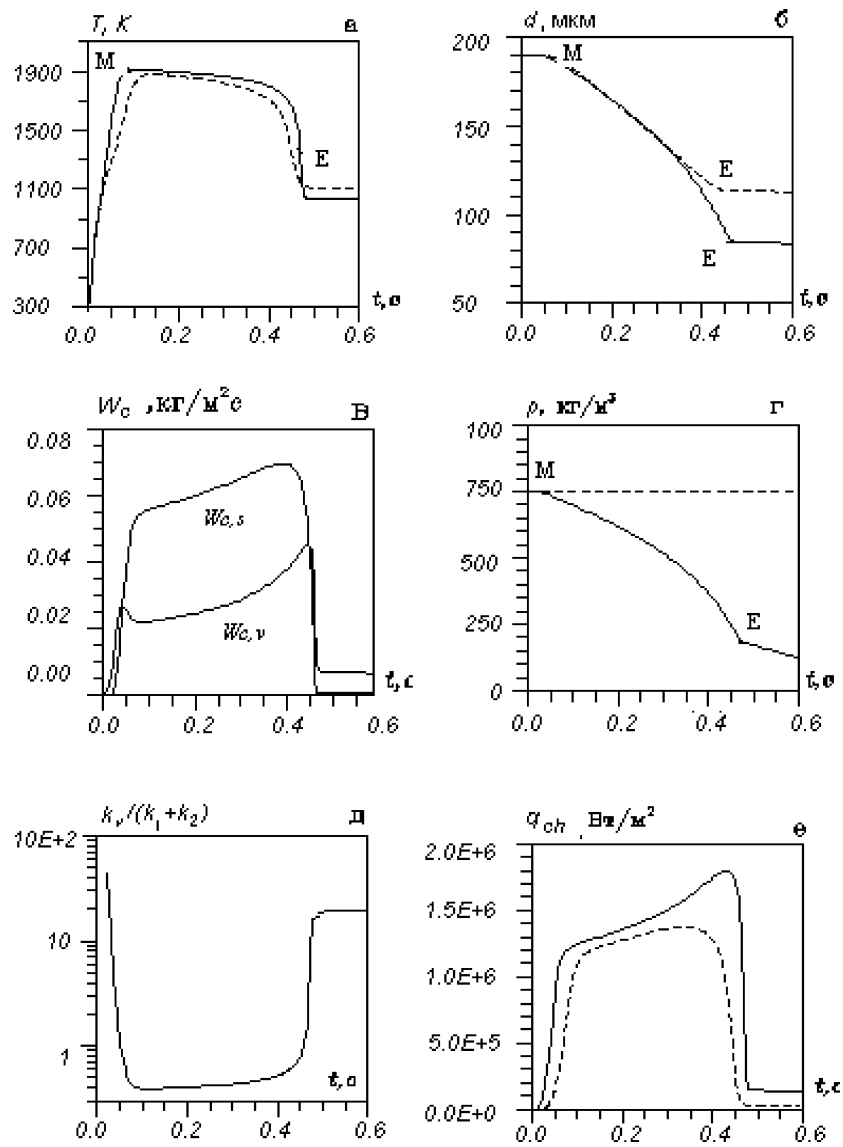


Рис.1. Временные зависимости T , d , $W_{c,s}$, $W_{c,v}$, ρ , $k_v/(k_1+k_2)$, q_{ch} для углеродной частицы $d_0=190\text{мкм}$, $q_{las}=8\cdot 10^5\text{ Вт/м}^2$, $T_g=T_w=293\text{К}$. Сплошная — с учетом, пунктир — без учета внутреннего реагирования

За счет дополнительного тепловыделения в порах частицы суммарная мощность химического тепловыделения q_{ch} возрастает (рис.1, е). Это приводит к уменьшению времени выхода на высокотемпературный режим (периода индукции), увеличению температуры горения T_{bur} (рис.1, а), и как следствие, к уменьшению критического диаметра частицы d_E , при котором происходит самопроизвольный переход на низкотемпературный режим тепло-массообмена (рис.1, б). При увеличении мощности лазерного излучения, нагревающего частицу, влияние внутреннего реагирования на указанные характеристики меньше (табл.1).

Неучет стефановского течения приводит к рассогласованию теоретических расчетов и экспериментальных данных по временным зависимостям температуры и диаметра углеродной частицы (рис.2).

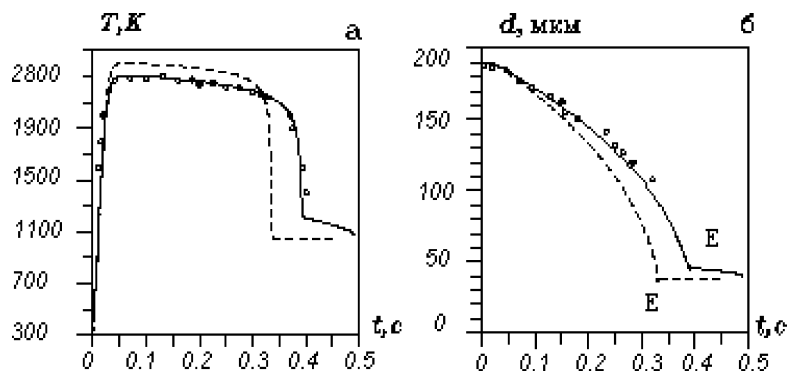


Рис. 2. Зависимости температуры и диаметра углеродной частицы $d_b=190\text{мкм}$ при $q_{las}=1.9\cdot 10^6\text{ Вт/м}^2$, $T_g=T_w=293\text{К}$. Сплошная — с учетом внутреннего реагирования и стефановского течения, пунктир — без учета стефановского течения, кружочки — эксперимент [3]

Критический диаметр частицы d_1 , ниже которого не происходит переход на высокотемпературный режим ТМО, для пористой частицы меньше, чем для сплошной ($d_{I_1} < d_{I_2}$, рис. 3, а), что является следствием дополнительного химического тепловыделения в порах (q_{ch} возрастает). Следовательно, для сохранения условия стационарности должен увеличиться и тепловой поток $q_{l,sf}$, а значит уменьшиться диаметр частицы. Увеличение мощности лазерного излучения существенно понижает значения критических диаметров d_1 и d_E (табл.1).

На зависимостях периода индукции от диаметра частицы при некотором $d=d_{min}$ наблюдается минимум (рис.3, а), что объясняется следующими причинами. Увеличение периода индукции для диаметров $d_b < d_{min}$ (ветка слева от d_{min}), является результатом увеличения теплового потока от частицы

при уменьшении ее диаметра. Рост t_{ind} справа от точки минимума определяется увеличением времени прогрева до температуры, при которой начинается самоускорение химической реакции.

Таблица 1

**Влияние внутреннего реагирования на период индукции t_{ind} , максимальную температуру горения T_{bur} , критические диаметры частицы, характеризующие ее воспламенение d_l и потухание d_E . $T_g=T_w=293K$, $d_b=190$ мкм
($k_v \neq 0$ — с учетом, $k_v = 0$ — без учета внутреннего реагирования)**

K_v	$q_{las}=8 \cdot 10^5, \text{Вт/м}^2$				$q_{las}=1.9 \cdot 10^6, \text{Вт/м}^2$			
	$t_{ind}, \text{с}$	$T_{bur}, \text{К}$	$d_E, \text{мкм}$	$d_l, \text{мкм}$	$t_{ind}, \text{с}$	$T_{bur}, \text{К}$	$d_E, \text{мкм}$	$d_l, \text{мкм}$
$k_v=0$	0.075	1880	114	147	0.019	2304	55	68
$k_v \neq 0$	0.042	1909	84	97	0.014	2308	46	55

Характер влияния внутреннего реагирования на длительность высокотемпературной стадии частиц меняется с увеличением их размера (рис.3, б). Время горения для пористых мелких частиц больше, чем для сплошных, для крупных — наоборот (зависимости $t_{bur}(d)$ с учетом и без учета внутреннего реагирования пересекаются). Данный результат является следствием того, что с учетом внутреннего реагирования критический диаметр d_E меньше, следовательно, время горения пористой частицы больше. Однако значительное понижение плотности крупных пористых частиц к моменту потухания (табл.2) приводит к увеличению времени их горения по сравнению со сплошной частицей.

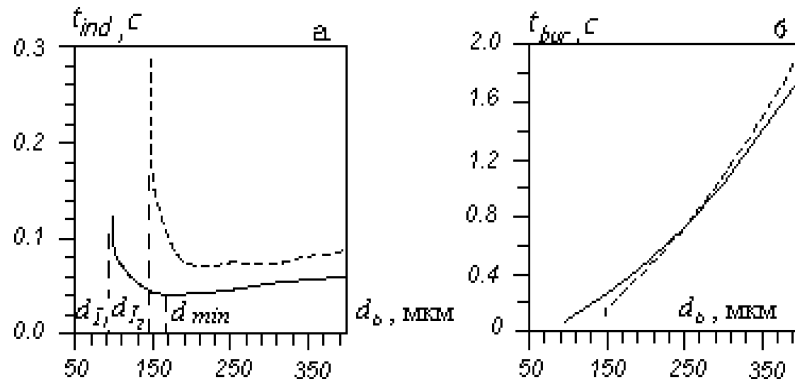


Рис. 3. Влияние внутреннего реагирования на период индукции (а) и длительность высокотемпературной стадии ТМО (б) в зависимости от начального диаметра частицы. $q_{las} = 8 \cdot 10^5 \text{Вт/м}^2$, $T_g=T_w=293K$. Сплошная — с учетом, пунктир — без учета внутреннего реагирования

Таблица 2

Значение критической плотности пористой частицы в момент потухания для различных начальных диаметров. $q_{\text{las}} = 8 \cdot 10^5 \text{ Вт/м}^2$, $T_g = T_w = 293 \text{ К}$, $\rho_g = 750 \text{ кг/м}^3$

$d_b, \text{мкм}$	100	190	300	400
$\rho_E, \text{кг/м}^3$	418	191	116	88

Плотность пористой частицы, при которой происходит ее самопроизвольное потухание, уменьшается с ростом начального диаметра и определяется значением d_E . Практически, это означает увеличение глубины реагирования с ростом диаметра частицы.

Таким образом, изучен механизм и выявлены закономерности временных зависимостей температуры, диаметра и плотности пористой углеродной частицы с учетом стефановского течения при интенсивностях лазерного излучения, выше критического значения. Доказана необходимость учета влияния внутрипористого реагирования и стефановского течения на критические условия, определяющие переходы на высоко- и низкотемпературные режимы теплообмена, а также на характерные времена — период индукции и время горения при различных диаметрах частицы и интенсивностях лазерного излучения. Впервые определены критические значения плотности и диаметра пористой углеродной частицы, при которых происходит ее самопроизвольное потухание.

Литература

1. Калинин В.В., Орловская С.Г., Калинин А.И., Дубинский А.В. Высоко- и низкотемпературный теплообмен углеродной частицы с воздухом при учете стефановского течения и теплопотерь излучением // ТВТ.-1996. — Т.34, №1. — С.83-91.
2. Калинин В.В., Садковский В.И., Орловская С.Г. Влияние внутреннего реагирования на критические условия теплообмена углеродных частиц // ИФЖ. — 1998. — Т.71, №5. — С.880-886.
3. Букатый В.И., Суторихин И.А. Высокотемпературное горение углеродных частиц в поле интенсивного лазерного излучения // ФГВ. — 1988. — Т.24, №3. — С.9-11.

В. В. Калінчак, С. Г. Орловська, О. М. Гулевата

Високотемпературний тепломасообмін вуглецевої частинки, що нагрівається лазерним випромінюванням, з урахуванням стефанівської течії на її поверхні

АНОТАЦІЯ

Розв'язана задача про тепломасообмін та хімічне перетворення пористої вуглецевої частинки з урахуванням стефанівської течії на її поверхні. З'ясовано закономірності часових залежностей температури, діаметра та густини пористої вуглецевої частинки, що нагрівається лазерним випромінюванням. Вперше визначено критичні значення діаметрів і густин пористої вуглецевої частинки, при яких відбувається самовільний перехід з високотемпературного до низькотемпературного режиму. Вивчено вплив внутрішнього реагування на характерні часи високотемпературного тепломасообміну і температуру горіння в залежності від діаметру пористої вуглецевої частинки при різних інтенсивностях лазерного випромінювання.

Kalinchak V. V., Orlovskaya S. G., Gylevataya O. N.

High-temperature heat- and mass- exchange carbonic particle with allowance for Stefan Flow on its surface, heated up by a laser radiation

SUMMARY

The problem about heat- and mass- exchange and chemical transformation of a porous carbonic particle with allowance for Stefan Flow on her surface is resolved. Are clarified time functions regularity of temperature, diameter and density of a porous carbonic particle, which is heated up with a laser radiation. Critical values diameters and density a porous carbonic particle for the first time are determined, at which one there is a spontaneous transition with high-temperature on a cold mode. The influencing interporous of reacting on reference times high-temperature heat- and mass- exchange combustion temperature is studied depending on diameter an porous carbonic particle at different intensities a laser radiation.

В. М. Игнатенко¹, И. М. Шпинарева¹, В. В. Ауров²

¹ *Одесский государственный политехнический университет*

² *Одесский государственный гидрометеорологический институт*

Стохастическая неустойчивость и диффузионная ионизация высоковозбужденных атомных систем в электромагнитном поле. Модели клеточных автоматов

С целью рассмотрения возможностей приложения клеточного автомата с окрестностью Марголуса к задаче стохастической динамики проведены тестовые расчеты процесса диффузии частиц с начальными условиями, близкими к дельта — функции, при помощи трехмерного клеточного автомата. С использованием клеточного автомата построена модель процесса ионизации высоковозбужденных атомных состояний сильным низкочастотным электромагнитным полем, в основе которого лежит стохастическая диффузия электрона по сильно возбужденным состояниям атома.

1. Большинство задач моделирования физических явлений связано с численным решением уравнений в частных производных, описывающих различные (конвективные, диффузионные и т.д.) процессы [1]. При численном решении искомых уравнений часто используются разностные схемы. Между тем иногда при решении достаточно простых дифференциальных уравнений возникают серьезные трудности, связанные со сложными граничными условиями, в частности, например, при решении уравнения диффузии в области со сложной границей (пористой средой), переходом от дискретной модели к непрерывной и т.д.. Один из эффективных методов решения указанных проблем состоит в использовании клеточных автоматов (см.[1-6]).

В последние годы значительный интерес вызвал феномен ионизации высоковозбужденных атомных состояний сильным низкочастотным электромагнитным полем (см.[7-13]). В его основе лежит диффузия электрона по сильно возбужденным состояниям атома. При этом нелинейные колебания электрона становятся стохастическими. Как машинные, так и аналитические расчеты дали оценку поля, критичного для возникновения стохастической неустойчивости. Как и любой стохастический процесс, искомую ионизацию можно описать в диффузионном уравнении при достаточно больших временах действия поля или же при усреднении по большому числу исходных положений классических орбит атома в пространстве. При этом, для того, чтобы стохастическое блуждание электрона захватывало много уровней (переход к хаотической динамике) необходимо выполнение условия для напряженности электрического поля $E > n^{-6}$ (n — главное квантовое чис-

ло) [7]. Экспериментально искомый феномен наблюдался для атома водорода из состояния с $n=60$ в поле частоты $\omega=9,9$ ГГц. Данная работа посвящена рассмотрению возможности применения клеточного автомата с окрестностью Марголуса к решению искомой диффузионной задачи с предварительным тестированием процесса диффузии частиц с начальными условиями, близкими к дельта — функции, при помощи трехмерного клеточного автомата.

2. В [2,5] для моделирования некоторых газодинамических процессов использовался клеточный автомат (с так называемой окрестностью Марголуса), в котором правила заданы особым образом (для трехмерного автомата): А) в качестве клетки клеточного автомата выбираются кубы; каждая клетка может находиться в одном из двух состояний: 1 — в ней имеется частица; 0 — в ней пусто; Б) массив клеток разбит на блоки $2 \times 2 \times 2$ двумя способами; на очередном шаге каждый из блоков поворачивается на $\pi/2$ (направление поворота выбирается при помощи генератора случайных чисел; случайным образом выбирается также одна из трех возможных осей поворота).

Применение двумерного автомата к моделированию диффузионных процессов продемонстрировало его высокую эффективность. Трехмерный клеточный автомат (см.[6]) до сих пор широко не использовался. Уравнение, описывающее его макроскопическое поведение, получается после применения к этому клеточному автомату метода усреднения. Следуя [6], приняв за единицу времени шаг клеточного автомата, а за единицу длины — размер его клетки, и перебрав все возможные сочетания поворотов блоков (с учетом направлений перемещения), можно получить, что за один шаг частица может переместиться вдоль каждой из координатных осей на расстояние 0,1 или 2 с вероятностями [8]:

$$P(\Delta x=0)=7/18, P(\Delta x=1)=7/18, P(\Delta x=2)=2/9$$

При этом вероятность попадания частицы в данную точку зависит только от ее положения в предыдущий момент времени, поэтому движение частицы вдоль оси x можно рассматривать как случайное блуждание. Подобное движение, как известно, описывается уравнением Смолуховского [1]:

$$\rho(t, x | t', x'') = \int \rho(t, x | t', x') \rho(t', x' | t'+\Delta t, x'') dx' \quad (1)$$

где $\rho(t, x)$ — плотность вероятности нахождения частицы в данной точке в данный момент времени ($\rho(t, x | t', x')$ — плотность соответствующей условной вероятности) t, x , и $t+\Delta t, x''$ — начальное и конечное, а t', x' — некоторое промежуточное положение частицы на отрезке времени Δt . Уравнение Смолуховского имеет физически осмысленное решение, удовлетворяющее дифференциальному уравнению вида:

$$\partial \rho / \partial t + \partial [A(x) \rho] / \partial x - \partial [B(x) \rho] / \partial x = 0 \text{ при } C_k = 0,$$

где

$$A = \lim \langle (x-x') \rangle / \Delta t, B = \lim \langle (x-x')^2 \rangle / \Delta t \neq 0, C_k(x) = \lim \langle (x-x')^k \rangle / \Delta t, k > 3$$

— суть моменты случайной величины x . Далее приближенно можно принять:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} f(x)/\Delta t = f(x) | \Delta t = 1$$

(т.е. x рассматривается как дискретная случайная величина). Тогда $A(x)$ и $B(x)$ определяются как:

$$A(x) = \sum \Delta x_i P(\Delta x_i), B(x) = \sum (\Delta x_i) P(\Delta x_i)$$

Уравнение, задающее закон изменения плотности вероятности распределения частиц по оси x , тогда имеет вид:

$$\partial \rho / \partial t = 23/18 \rho''_{xx} \quad (2)$$

По оси y, z частицы будут распределяться по такому же закону. Поскольку движение частиц рассматривалось как независимое случайное блуждание вдоль координатных осей, плотность частиц находится исходя из усреднения произведения плотностей вероятности по времени:

$$u(x, y, z) = \langle \rho(x) \rho(y) \rho(z) \rangle.$$

Используя (3), получаем:

$$\partial u / \partial t = \partial / \partial t [\langle \rho(x) \rho(y) \rho(z) \rangle] = \langle \rho t(x) \rho(y) \rho(z) \rangle +$$

$$\langle \rho(x) \rho t(y) \rho(z) \rangle + \langle \rho(x) \rho(y) \rho t(z) \rangle = 3/2 \Delta \langle \rho(x) \rho(y) \rho(z) \rangle = 23/18 \Delta u.$$

Для тестирования возможностей трехмерного клеточного автомата были выбрана следующая модельная задача. Моделировалась диффузия частиц, находящихся в начальный момент времени в малой области пространства (начальные условия близки к дельта — функции). На рисунке показано распределение частиц в момент времени $t=100$. При этом кривая гладкой функции, аппроксимирующей распределение частиц, с очень хорошей точностью совпадает с аналитическим решением данной задачи.

Теоретическое распределение

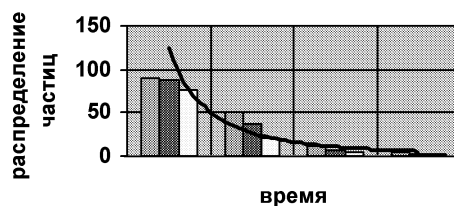


Рис. Распределение частиц в процессе диффузии с начальными условиями, близкими к дельта — функции

3. Рассмотрим теперь процесс ионизации высоковозбужденных атомных состояний сильным низкочастотным электромагнитным полем. Условие, при котором ионизация реализуется по диффузионному сценарию:

$$1/n^2 \gg \omega > En > 1/n^4 \quad (3)$$

Кинетическое уравнение, определяющее изменение во времени распределения атомов по энергетической оси, имеет вид:

$$\begin{aligned} dN(E,t)/dt = & -W_{em}(E \rightarrow E - \omega)N(E,t) - W_{abs}(E \rightarrow E + \omega)N(E,t) + \\ & + W_{em}(E + \omega \rightarrow E)N(E+,t) + W_{abs}(E - \omega \rightarrow E)N(E - \omega, t) \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $N(E,t)$ — вероятность нахождения атома в состоянии с энергией E ; W_{em}, W_{abs} — вероятности переходов в единицу времени с излучением или поглощением фотона частоты ω . Дифференциальная форма разностного уравнения (4):

$$\partial N(E,t)/\partial t = \partial/\partial E[\omega \partial N(E,t)/\partial E]\omega^2 \quad (5)$$

Начальное условие, исходя из физической сути задачи, выбирается в виде:

$$N(E,0) = \delta(E - E_0)$$

Исчезновению диффузионного сценария вследствие нарушения частотного условия (3) соответствует условие обращения в нуль потока вероятности по энергетической оси при $E=E_0$: $\partial N/\partial E|_{E_0} = 0$.

Отметим, что функция $N(E,t)$ должна иметь резкий максимум при $E=E_0$, т.е. электрон, заметно, удалившийся от начального состояния с энергией E_0 быстро переходит в непрерывный спектр. Это следует из быстрого увеличения скорости диффузии с уменьшением энергии связи E . Полная вероятность к моменту времени t определяется выражением:

$$W(t) = 1 - \int_0^{E_0} N(E,t)dE$$

Моделирование процесса диффузии, описываемого уравнением (5) проводилось при помощи описанного выше клеточного автомата. В качестве экспериментального примера брался эксперимент Коха и др. (см. [7]) по ионизации из высоковозбужденных состояний атома водорода с $n \sim 50$ полем радиочастотного диапазона (с напряженностью поля $E \sim 100$ В/см и частотой $\omega = 9,9$ ГГц). Численное моделирование при помощи клеточного автомата показало, что основные характеристики процесса ионизации, включая величину вероятности ионизации, зависимость вероятности от частоты, время диффузии и т.д. достаточно разумно описываются моделью клеточного автомата и находятся в разумном согласии со статистической природой диффузионного процесса. Укажем, например, что расчетное время диффузии составляет 10^{-8} с, расчетное значение напряженности критического поля составляет, по нашим оценкам, $E_{кр} = 13$ В/см, что соответствует эксперименту

Коха и др. $E_{кр}$ (эксп.)=10В/см, а также результату квазиклассической модели Делоне и др. $E_{кр}$ (теор.)=10В/см (см. [7]). В табл. 1 приведены рассчитанные нами значения вероятности ионизации (W2) атома Н в высоковозбужденном состоянии для различных значений частоты $\omega_o = \omega l_o^3$. Для сравнения приведены результаты более точного квантового расчета (W1) Кассати и др. (см.[7,8]). Важно отметить, что результаты обеих расчетов в общем согласуются друг с другом (за исключением значения $\omega_o=1,370$).

Данная задача представляет собой тот редкий пример, когда динамика переходов в атомном спектре определяется статистическими закономерностями. Еще больший интерес представляет собой моделирование искомого процесса в явлениях, связанных с селективным возбуждением высоких состояний (в задачах лазерного разделения изотопов, ядерных изомеров, бесстолкновительной фотодиссоциации молекул ИК полем и т.д.). В заключение отметим, что применение клеточных автоматов к решению целого ряда задач химической физики и физики горения, гидродинамики, статистической физики и стохастической динамики до сих пор детально и широко не проанализировано, однако искомые приложения представляются достаточно перспективными.

Таблица 1

Вероятность ионизации как функция частоты электромагнитного поля

ω_o	W1	W2
1,366	0,16	0,19
1,368	0,82	0,87
1,370	0,04	0,42
1,372	0,27	0,31
1,374	0,05	0,08
1,376	---	0,05

Литература

1. Квасников И.А. Термодинамика и статистическая физика. — М. МГУ, 1991.
2. Тоффоли Т., Марголус Н. Машины клеточных автоматов. — М., 1991.
3. Глушков В.М. Синтез цифровых автоматов. — К., 1962.
4. Глушков А.В. Клеточные автоматы и их применения. — К.: ISSEP, 1996.
5. Малинецкий Г.Г., Степанцов М.Е. Клеточные автоматы для расчета некоторых газодинамических процессов// Журн. Выч. мат.и мат. физики. — 1996. — Т.36, №5. — С.137-145.
6. Игнатенко В.М., Петрова Р.И., Хасаха Х. Клеточный автомат для расчета некоторых гидродинамических процессов// Метеорология и гидрология. — 1999. — Т.38. — С.131-134.

7. Делоне Н.Б., Крайнов В.П. Атом в сильном световом поле. — М.:Атомиздат,1984. — 230 с.
8. Benvenuto F., Casati G., Shepelyansky D.L. Rydberg Stabilization of atoms in strong fields: “magic”mountain in chaotic sea// Z.Phys.B. — 1994. — Vol.94. — P.481-486.
9. Dando P.A.,Monteiro T.S. Atoms in Static Fields: Chaos & Diffraction// Photonic, Electronic, Atomic Collisions.-Singapore: World Sci. Pub. — 1997. — P.621 — 630.
10. Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Ignatenko V.M., Prepelitsa G.P. Stochastic instability of multioscillator systems and highly excited atoms in electromagnetic field and chaotic dynamics of diatomic molecules in resonance high-intensity IR field // Proc. V International Conf. On Atomic and Molecular Physics. — Berlin (Germany). — 2001. — P.A313.
11. Glushkov A.V.,Ambrosov S.V., Shpinareva I.M. et al, Resonances in Quantum Systems in strong external fields: Consistent Quantum Approach//Journal of Technical Physics. — 1997. — Vol.38,N2. — P.215-218.
12. Shumlyansky I.I., Shevchuk V.G., Ignatenko V.M., Prepelitsa G.P. Atom of hydrogen in a strong uniform electric field: Modified operator perturbatio theory method// Науковий Вісник Ужгородського університету.Серія Фізика. — 2000. — Т.8,Ч.2. — С.372-375.
13. Glushkov A.V.,Dan'kov S.V., Prepelitsa G.P et al, QED Theory of nonlinear Interaction of the complex Atomic Systems with Laser field. Multiphoton Resonances// J. Techn. Phys. — 1997. — Vol.38, N2. — P.219-224.

В. М. Ігнатенко, І. М. Шпінарева, В. В. Ауров

**Стохастична нестійкість та дифузійна іонізація високозбуджених атомних систем у електро-магнітному полі.
Моделі клітинних автоматів**

АНОТАЦІЯ

З метою розгляду можливостей застосування клітинних автоматів з окілом Марголуса до задач стохастичної динаміки виконано тестовий розрахунок процесу дифузії частинок з початковими умовами, близькими до дельта-функції, за допомогою трьохмірного клітинного автомату. З його використанням побудовано модель процесу іонізації високозбуджених атомних станів сильним низькочастотним електромагнітним полем, в основі якого лежить стохастична дифузія електрону по сильно збудженим полем станам атому.

Ignatenko V. M., Shpinareva I. M., Aurov V. V.

Stochastic unstability and diffusion ionization of highly excited atomic systems in electromagnetic field. Models of cell automata

SUMMARY

The possibilities of cell automata with Margolus environment application for solution of the stochastic dynamics problems have been considered. The test calculations of the diffusion process of the particles with initial conditions in the form of delta-functions by means of the 3D cell automata are carried out. It is proposed the cell automata model for process of the ionization of highly excited atomic states by a strong low-frequency electromagnetic field (stochastic diffusion of electron on highly excited atomic states).

И. А. Флорко, Н. И. Полетаев, А. В. Флорко

*Институт горения Одесского национального университета
им. И. И. Мечникова, г. Одесса*

Теплообмен излучением в горящих дисперсных системах

В работе изучается вклад излучения в теплообмен с окружающей средой индивидуальных "субмикронных частиц оксидов металлов и их газозвесей. Измерены и вычислены на основе теории Ми факторы эффективности рассеяния и поглощения при температурах горения. Полученная информация является исходной при решении задач о переносе излучения в дисперсных системах. Проведены соответствующие расчеты для реальных газозвесей частиц. Результаты находятся в удовлетворительном согласии с данными экспериментов.

Введение

Интерес к исследованию излучательных характеристик пылевых пламен обусловлен важностью процессов лучистого теплообмена для решения проблем пожаровзрывобезопасности пылевоздушных систем, а также некоторыми технологическими аспектами горения дисперсных систем на основе твердых горючих, например, получением ценных целевых продуктов методами горения [1-2]. В настоящей работе проводится анализ результатов исследований влияния излучения на теплообмен с окружающей средой горящих одиночных частиц и газозвесей частиц металлов. В рассматриваемых процессах основными источниками излучения являются: 1).субмикронные частицы оксидов металла (диаметр менее 0.1 мкм), образующиеся при парофазном или газофазном горении частиц металла; 2).индивидуальная металлическая частица; 3).гавозвесь горящих частиц металлов. Очевидно, что для газозвесей лучистый теплообмен будет определяться как свойствами индивидуальных излучателей (частица металла, частица оксида), так и их коллективным эффектом, зависящим от концентрации частиц и размеров пылевого облака.

Целью исследований является выявление роли излучения в тепловом балансе горящих одиночных частиц металлов и их газозвесей, при образовании к-фазы продуктов сгорания, а также определение оптических характеристик зоны горения и частиц продуктов сгорания, указанных выше объектов.

Методика экспериментальных исследований

Спектральными и электрофизическими методами исследовалось горение одиночных частиц и газозвесей частиц Al и Mg. Для определения температуры конденсированной фазы в зоне горения, а также эффективной испускательной способности пламени использовался полицветовой метод [3] и оптический радиометр на основе пироэлектрического приемника МГ-30. Исследования проводились в диапазоне длин волн $\lambda=0,25\div 20$ мкм. Методика проведения электрофизических исследований горячей одиночной частицы магния описана в работе [4]. В качестве объекта для исследования горения газозвесей частиц Al и Mg использовался стационарный ламинарный двухфазный факел [5]. С помощью указанных методик была получена следующая исходная информация: интегральные и спектральные светимости, радиальные распределения световых потоков, экстинкция излучения, токи насыщения, инициируемые горящими частицами во внешних электрических полях, фотографии объектов. Расчеты коэффициентов экстинкции, факторов эффективности рассеяния и поглощения рассчитывались на основе теории Ми по методике [6].

Результаты экспериментов

1. Субмикронные частицы оксидов металлов

Оптические и излучательные характеристики индивидуальных субмикронных частиц, образующихся при горении, являются исходной информацией при расчетах световых потоков газозвесей таких частиц. Наиболее важными параметрами являются факторы эффективности рассеяния Q_s и поглощения Q_a . Последние представляют собой отношение сечений соответствующих процессов к геометрическому сечению самих частиц и могут быть рассчитаны на основе теории Ми, причем для субмикронных частиц в ИК-диапазоне (для значений дифракционного параметра $2\pi r/\lambda < 0,6/n$, n — показатель преломления), как будет показано ниже, можно пользоваться приближением Релея. Факторы эффективности рассеяния зависят от действительной части показателя преломления n , а поглощения от мнимой — χ . Известно, что n слабо зависит от температуры, что существенно повышает надежность рассчитываемых величин Q_s . Величина χ частиц, обладающих полупроводниковыми свойствами, является экспоненциально сильной функцией температуры. По этой причине в настоящее время нет надежного банка данных для мнимой части показателя преломления в области высоких температур. Отметим, кстати, что в соответствии с законом Кирхгофа, Q_a равен спектральной испускательной способности. Уже это обстоятельство обуславливает важность подобной информации.

В работах [7,8] были проведены измерения и расчеты величины Q_a в видимом и ближнем ИК — диапазонах длин волн для частиц MgO и Al₂O₃, которые позволили получить для субмикронных частиц MgO ($\lambda \leq 0,6$ мкм):

$$Q_a = 1.5 \cdot 10^9 \cdot l \cdot \exp(-37700/T), \quad (1)$$

где: l — характерный размер кубических частиц MgO в см.

С учетом зависимости Q_a от длины волны (в релеевском приближении $Q_a \sim \lambda^{-1}$) имеем:

$$Q_a = 10^5 \cdot l \cdot \lambda^{-1} \cdot \exp(-37700/T); \quad l, \lambda \text{ — измеряются в см.} \quad (2)$$

Выражение (2) верно для $\lambda \geq 0,8$ мкм (см. рис.1,2) и в приближении слабой зависимости мнимой части показателя преломления от длины волны.

Для частиц Al_2O_3

$$Q_a = 500 \cdot d, \quad (3)$$

где: d — диаметр частицы в сантиметрах (температурная зависимость для частиц Al_2O_3 не исследовалась).

Подставив в (1) $l=0.1 \cdot 10^{-4}$ см, $T=2600$ К и в (3) диаметр частиц Al_2O_3 , $d=0.1 \cdot 10^{-4}$ см получим для сравнения: MgO - $Q_a=0.01$ и для Al_2O_3 - $Q_a=0.005$.

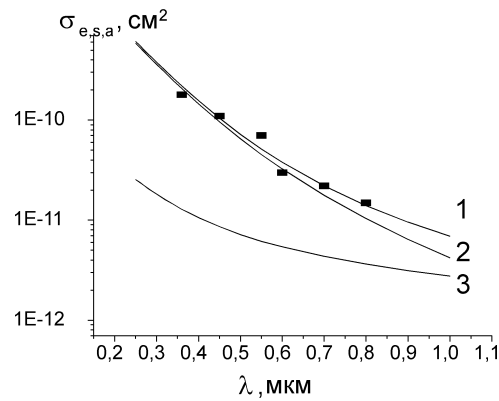


Рис.1. Осредненные по функции распределения частиц MgO по размерам сечения: 1 — экстинкции σ_e ; 2 — рассеяния σ_s ; 3 — поглощения σ_a ; точки — эксперимент (пересчитаны по формуле (6))

Поскольку газозвесь частиц является полидисперсной системой, реальный интерес представляют величины осредненные по функциям распределения. Такие осреднения были проведены для сечений ослабления (σ_e), рассеяния (σ_s) и поглощения (σ_a). Расчеты проводились согласно соотношению:

$$\sigma_{e,s,a} = \int Q_{e,s,a}(d) \cdot f(d) \cdot \pi \cdot \frac{d^2}{4} dd. \quad (4)$$

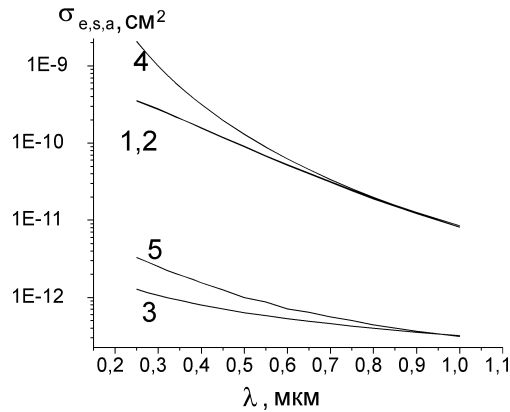


Рис.2. Осредненные по функции распределения частиц Al_2O_3 по размерам сечения процессов: 1 — экстинкции σ_e ; 2, 4 — рассеяния σ_s ; 3, 5 — поглощения σ_a ; 1,2,3 — расчеты на основе теории Ми; 4, 5 — в релейевском приближении

Функции распределения $f(d)$ получали в результате статистической обработки результатов дисперсного анализа частиц оксидов (по фотографиям, полученным с помощью электронного микроскопа). Установлено, что распределение $f(d)$ подчиняется логарифмически нормальному закону:

$$f(d) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi} \cdot d \cdot \sigma_0} \cdot \exp \left[-\frac{(\ln(d) - \ln(d_0))^2}{2\sigma_0^2} \right]. \quad (5)$$

Причем условия горения частиц металлов (одиночные частицы, пылевые пламена в широком диапазоне изменения параметров газозвеси) практически не влияют на дисперсный состав продуктов сгорания. Для частиц MgO и Al_2O_3 величины d_0 и σ_0 равны соответственно: (0,075 мкм, 0,35) и (0,08 мкм, 0,48). Факторы эффективности процессов рассчитывались на основе теории Ми. Результаты расчетов осредненных сечений представлены на рисунках 1 и 2, из которых видно, что с уменьшением длины волны сечения процессов резко увеличиваются. Причем определяющую роль в экстинкции излучения играет рассеяние и лишь в ИК — диапазоне для частиц MgO эффективность рассеяния и поглощения становятся сравнимыми. Для частиц Al_2O_3 роль поглощения, в силу малости мнимой части показателя преломления, незначительна, что приводит к слиянию зависимостей от длины волны сечений ослабления и рассеяния (см. рис.2). Кривые 4, 5 (рис.2) получены в релейевском приближении и фактически иллюстрируют условия его применимости. На рис.1 представлены также результаты измерения сечений

ослабления, полученных по результатам измерения оптических плотностей ($\beta \cdot L$) зоны горения одиночных частиц Mg согласно соотношению:

$$\sigma_e = \frac{(\beta \cdot L)}{N_k \cdot L}, \quad (6)$$

где L — ширина зоны горения, N_k — концентрация к-частиц [9].

Экспериментальные исследования светимости зоны горения частицы Mg позволили выявить роль излучения в тепловом балансе частицы окиси в процессе их роста. Можно показать, что доля энергии излученной частицей за время конденсации до среднекубического размера ($\langle l^3 \rangle$) по отношению к выделившейся при этом энергии конденсации определяется соотношением:

$$\eta_g = \frac{16\pi R r_k^2}{\frac{dn_k}{dt} \langle l^3 \rangle \rho q_k}, \quad (7)$$

где: ρ — плотность MgO, q_k — удельная теплота конденсации, R — интегральная светимость, r_k — радиус зоны конденсации, $\frac{dn_k}{dt}$ — скорость генерации К-частиц.

Радиусы зоны конденсации r_k и частицы металла r_0 связаны соотношением установленным экспериментально:

$$r_k = r_0 (P \cdot 10^{-5})^{1/3}. \quad (8)$$

Скорость генерации определялась по токам насыщения [4]. Интегральная светимость измерялась в диапазоне давлений $P=10^4 \div 10^5$ Па, и $\lambda=0,3 \div 20$ мкм (см. табл.1).

Выражение (7) позволило установить, что доля излучения в тепловом балансе для субмикронных частиц весьма существенна и растет с понижением давления от 0,5 до 0,8 (см табл.1; некоторое уменьшение величины η_g при $P=10^4$ Па связано, на наш взгляд, с ошибками экспериментов, а не с какими либо физическими особенностями). Тем не менее, на ранней стадии роста частиц, когда $Q_a \sim l \rightarrow 0$, роль молекулярного теплообмена в тепловом балансе растущей частицы является ведущей (для всех давлений). Отсутствие эффективного механизма теплообмена (молекулярного или лучевого) является одной из причин того, что при пониженных давлениях ($P \approx 3000$ Па) пламя становится совершенно прозрачным. Возникают затруднения со “сбросом” энергии выделяющейся при конденсации, частицы перегреваются и практически перестают расти.

Таблица 1

P, Па	10 ⁴	2·10 ⁴	5·10 ⁴	10 ⁵	Погр. эксп. %
$\frac{dn_k}{dt}, c^{-1}$	10 ¹¹	2·10 ¹¹	4·10 ¹¹	10 ¹²	30
R, Вт/см ²	0,14	0,7	3	9	10
η_p	0,5	0,8	0,7	0,5	40
N _k , см ⁻³	10 ⁹	10 ¹⁰	10 ¹¹	5·10 ¹¹	50
α	0,04	0,08	0,23	0,4	15
β	6	2	0,8	0,4	20

2. Одиночные частицы магния

Излучение горячей частицы магния имеет две составляющие. Это излучение газозвеси субмикронных частиц, образующихся в зоне конденсации паров окиси магния и излучение самой капли магния, покрытой окисной “шубой”. Измерения световых потоков из зоны конденсации и времен горения одиночных частиц магния массой 0.2г (диаметр частиц около 4 мм) при различных давлениях показали, что доля излучения, по отношению к общему тепловыделению прямо пропорциональна давлению (см. табл.1). Как видно из таблицы при атмосферном давлении (P=10⁵Па) частица магния излучает 40% энергии конденсации. При P= 10⁴ Па эта величина уменьшается до $\alpha=4\%$. Между тем, время горения τ , точнее величина τ/d^2 для исследуемых частиц Mg, является весьма слабой функцией P [10]. Иначе говоря, излучение из зоны конденсации продуктов горения является не существенным (для поддержания горения) в тепловом балансе горячей частицы магния и его роль сводится к теплотерям.

Для частиц с диаметром порядка нескольких мм вклад в суммарный лучистый поток окиси, оседающей на поверхности капли металла, оказался весьма значительным и увеличивающимся с понижением давления. Температура окисного покрытия относительно мала (T≈1400К), но из-за развитой поверхности велика испускательная способность ($\epsilon \approx 0,3$), что и обеспечивает ее относительно высокую светимость. В таблице 1 представлено отношение световых потоков от окисного покрытия и зоны конденсации, рассчитанное согласно соотношению

$$\beta = \frac{\epsilon \cdot \sigma \cdot T^4 \cdot r_o^2}{R \cdot r_k^2} . \quad (9)$$

Как видно и табл.1 вклад в общий световой поток окисного покрытия возрастает с понижением давления и при P=10⁴ Па становится определяющим. Аналогично можно показать, что энергия, излучаемая окисным покрытием превышает энергию, поглощаемую от зоны конденсации. Следовательно, излучение этой зоны не оказывает существенного влияния на тепло-

вой режим испарения частицы металла. Это означает, что парофазный режим горения частицы Mg поддерживается как за счет тепла конденсации части газообразной окиси конденсирующейся на поверхности горячей капли металла, так и за счет теплопроводности. Отметим также, что для крупных частиц Mg с течением времени роль излучения окисного покрытия возрастает из-за увеличения его размеров и приближения к нему зоны горения, приводящего к повышению температуры.

Таким образом, роль обеих составляющих теплового излучения парофазно горячей частицы металла сводится к теплотерям.

3. Ламинарные двухфазные факела Mg и Al

Выполнить исследования, аналогичные выше приведенным, для одиночной частицы алюминия технически очень сложно из-за очень высоких температур их воспламенения и горения. Для исследования горения алюминия можно использовать пламена газозвесей частиц — ламинарные диффузионные или предварительно перемешанные факела [5]. Результаты измерений светимостей зоны горения ламинарных диффузионных двухфазных факелов (ЛДФ) представлены в таблице 2. Отметим, что интегральная светимость факела Mg выше, чем факела Al, хотя температура первого на 400 ÷ 500К меньше, чем второго. Это связано с тем, что факторы эффективности поглощения для частиц MgO в 2-3 раза превышают таковые для Al₂O₃. В этом легко убедиться, исходя из соотношений (1, 3). Отметим также, что доля излучения в тепловом балансе ЛДФ факела Al зависит от концентрации горючего и не зависит от размера частиц горючего. Радиационные теплотери определялись по измеренной светимости и геометрическим параметрам факела, полученным фотографическим путем и из радиальных распределений световых потоков. Результаты представлены в таблице 2.

Таблица 2

C, кг/м ³	0,2 (Al)	0,4 (Al)	0,6 (Al)	0,6 (Al)	0,4 (Mg)	погр., %
T, К	2850	3100	3000	3080	2600	3
D ₀ (Me), мкм	5	5	5	14	5	—
R, Вт/см ²	0,75	5,2	4,2	3,9	6	10
η	0,12	0,45	0,25	0,2	0,43	20

Для пылевых пламен частиц металлов исследуемых масштабов (5-10 см — пылевая горелка, трубы, облака малого диаметра) роль излучения также сводится главным образом к теплотерям. Для зоны горения толщиной 1-2 мм фронт пламени можно считать оптически прозрачным и теплотери легко оцениваются на основе закона Стефана-Больцмана и результатов измерения или расчетов испускательной способности. Анализ светимостей факелов позволяет сделать вывод, что в основном излучают частицы окиси. Поэтому, в адиабатических условиях температура конденсированной фазы

была бы стабилизирована вблизи температуры фазового перехода (жидкость-газ), однако наличие теплотерь излучением приводит к существенно более низким температурам к — фазы (3200К для алюминия и 2600К для магния вместо 3900К и 3300К соответственно).

Анализ результатов экспериментов.

Результаты измерения и расчета экстинкции излучения показали, что ослабление излучения определяется практически рассеянием (см. рис.1,2), т.е. факторами эффективности рассеяния (Q_s) и концентрацией К-частиц. Величины Q_s зависят от действительной части показателя преломления и слабо изменяются с температурой. Фактически это означает, что параметром при расчете экстинкции, является лишь концентрация N_k . Как видно из рисунка 1, имеет место хорошее согласие между результатами расчетов и измерений, как по абсолютной величине, так и по зависимости от λ . Это гарантирует надежность результатов измерения концентрации К-частиц по поглощению излучения. Величина же N_k совместно с факторами эффективности поглощения определяют спектральную испускательную способность пламени в целом. Расчеты проводились с использованием теории Ми с учетом функции распределения частиц по размерам. Аналогичные вычисления проводились и для ЛДДФ алюминия. Полученные результаты использовались при расчетах спектральной испускательной способности ϵ_λ согласно соотношению[11]:

$$\epsilon_\lambda = K \cdot (K + 1,5 \cdot \text{cth}(K \cdot 0,5 \cdot \beta \cdot l))^{-1}; K = (3 \cdot \beta_a \cdot (\beta_{a+} \beta_s)^{-1})^{0,5} \quad (10)$$

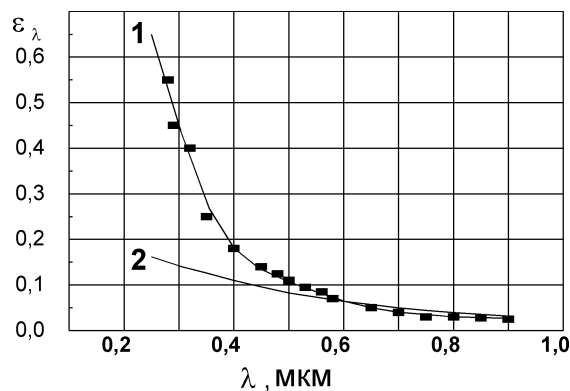


Рис. 3. Спектральная испускательная способность зоны горения одиночной частицы магния при атмосферном давлении: 1 — результаты экспериментов; 2 — расчет согласно выражению (8)

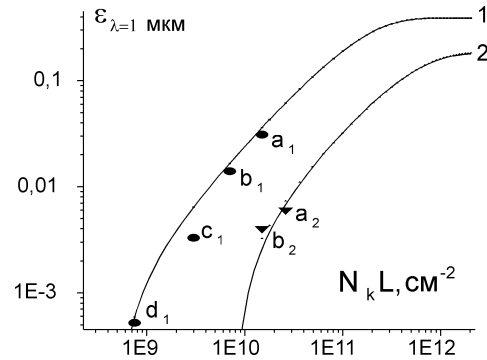


Рис. 4. Зависимость испускательной способности от произведения концентрации субмикронных частиц оксидов металлов N_k и протяженности газозвеси L : 1 — газозвесь частиц MgO ; 2 — газозвесь частиц Al_2O_3 . Точки — результаты экспериментов: a_1, b_1, c_1, d_1 — испускательная способность зоны конденсации частиц Mg при давлениях $P = 10^5; 5 \cdot 10^4; 2 \cdot 10^4; 10^4$ Па, соответственно; a_2, b_2 — испускательная способность фронта ЛДД факела Al для концентраций горючего 0,6; 0,4 Kg/m^3 , соответственно

Из рисунка 3 видно, что в видимом диапазоне длин волн результаты находятся в хорошем согласии. В УФ имеет место значительное расхождение данных. Одно из объяснений — размерный эффект [11]. Напомним, что результаты расчетов базировались на применимости законов теплового излучения, в частности, предполагалось, в соответствии с законом Кирхгофа, равенство факторов эффективности поглощения и спектральной испускательной способности частиц. Таким образом, нет оснований подвергать сомнению применимость традиционных методов описания переноса излучения в дисперсных системах. Понятно также и то, что это лишь приближение, которое может устраивать или нет в пределах ошибок экспериментов.

На рис.4 согласно соотношению (10) проведены расчеты спектральной испускательной способности для $\lambda=1$ мкм (вблизи виновского максимума) в зависимости от произведения концентрации k -частиц и ширины зоны горения- $N_k L$ (фактически от оптической плотности). Полученную величину можно использовать для оценки интегральной светимости. Там же представлены результаты измерения ϵ для частиц Mg при различных давлениях и ЛДД факела Al для различных концентраций горючего. При вычислениях использовались рассчитанные факторы эффективности рассеяния и поглощения. Как видно из рис.4 результаты расчетов и измерений находятся в удовлетворительном согласии, что свидетельствует о применимости при описании переноса излучения в рассеивающих, поглощающих и излучающих средах законов теплового излучения и теории Ми. Из рис.4 видно, что

для больших оптических плотностей газозвесей частиц MgO и Al_2O_3 величина ϵ выходит на уровни 0,4 и 0,2, соответственно. Действительно, при $\beta \cdot L \rightarrow \infty \epsilon \rightarrow K \cdot (K+1,5)^{-1}$, а при малых оптических плотностях – $\epsilon \sim \beta_a \cdot L$

Заключение

Проведенные измерения и расчеты позволили установить следующее.

1. Излучение играет весьма важную роль в тепловом балансе горящих систем, носит характер теплопотерь, а эффективность его зависит от внешних условий и параметров системы.

2. Субмикронные частицы оксидов металлов 50%-80% энергии, выделяющейся при конденсации газообразных продуктов сгорания, передают в окружающую среду за счет излучения. Тем не менее, на ранней стадии роста к - частиц роль излучения не существенна, что затрудняет процессы конденсации при пониженных давлениях.

3. Теория Ми позволяет получать надежную информацию о факторах эффективности рассеяния и поглощения при температурах горения.

4. В видимом и ИК — диапазонах длин волн излучение является тепловым, и хорошо описывается на основе известного уравнения переноса излучения в горящих дисперсных системах.

Работа выполнена при поддержке INTAS (Ref. №96-2334).

Литература

1. Агеев Н.Д., Вовчук Я.И., Горошин С.В., Золотко А.Н., Мержанов А.Г., Фурсов А.П., Шевцов В.И. Способ получения ультрадисперсного порошка оксида металла. №4936888/26(041343) от 16 мая 1991.
2. Ламинарный диффузионный двухфазный факел. / Агеев Н.Д., Буйновский С.Н., Вовчук Я.И., Горошин С.В., Золотко А.Н. // Первый Всесоюзный симпозиум по макрокинетики и химической газодинамике.- Алма-Ата. 1984. Т.2.С 353.
3. Флорко А.В., Белинский Н.И., Козицкий С.В. Скоростной спектральный прибор для исследования излучательных характеристик дисперсных продуктов сгорания. //Физика аэродисперсных систем.1985. Вып.28. Киев-Одесса. Вища школа. С 88-92.
4. Золотко А.Н., Козицкий С.В., Флорко А.В. Импульсный метод исследования электрических характеристик заряженных частиц продуктов сгорания. // Физика аэродисперсных систем. 1984. Вып.26. Киев — Одесса. Вища школа. С 79-83.
5. Агеев Н.Д., Вовчук Я.И., Горошин С.В., Золотко А.Н., Полетаев Н.И. Стационарное горение газозвесей твердых горючих // Физика горения и взрыва. 1990. Т.26. №6. С 54-62.
6. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М.: Мир. 1986. 660 с.

7. Флорко А.В., Головки В.В., Скогорев В.Г. // Коэффициенты эффективности рассеяния и поглощения частиц MgO при температурах горения. Физика горения и взрыва. 1989. Т.25. №3. С. 28-32.
8. Флорко А.В., Шарф И.В. Оптические характеристики субмикронных частиц Al₂O₃ при температурах горения в видимом и инфракрасном диапазонах длин волн // Тезисы докладов XVI конференции стран СНГ по вопросам испарения, горения и газодинамики дисперсных систем. Одесса. 1993.
9. Флорко А.В., Головки В.В. Особенности зарождения и роста κ-фазы при горении одиночных частиц магния // Реофизика и теплофизика неравновесных систем. Материалы Международной школы-семинара. Часть 2. Минск. 1991. С 103-107.
10. Флорко А.В., Козицкий С.В., Мацко А.М. Исследования горения одиночных частиц магния при пониженных давлениях // Физика горения и взрыва. 1986.Т.22. №2. С 35-40.
11. Оцирик М.М. Сложный теплообмен. М.: Мир, 1976. 616 с.
12. Петров Ю.П. Физика малых частиц. М.: Наука, 1982. 359 с.

І. А. Флорко, М. І. Полтаєв, О. В. Флорко

Теплообмін випромінюванням у палаючих дисперсних системах

АНОТАЦІЯ

В роботі вивчається внесок випромінювання в теплообмін з навколишнім середовищем індивідуальних субмікронних часток оксидів металів та їх газозависів. Знайдено та обчислено на основі теорії Мі фактори ефективності розсіювання та поглинання при температурах горіння. Отримана інформація є вихідною при рішенні задач про перенос випромінювання в дисперсних системах. Проведено відповідні розрахунки для реальних газозависів часток. Результати знаходяться в задовільній згоді з даними експериментів.

Florko I. A., Poletaev N. I., Florko A. V.

Radiation Heat-Exchange in Burning Disperse Systems.

SUMMARY

This work examines the contribution of radiation heat-exchange of individual sub-micron particles of metal oxides and their gas-mixtures with environment. Based on the Mie theory, the effective factors of dispersion and adsorption at burning temperatures were measured and calculated. The received information is a basic one for the problem solutions about radiation transfer in disperse systems. The appropriated calculations for real gas-mixtures were made. Results are in the satisfactory agreement with the data of experiments.

С. В. Коваль¹, Н. И. Кускова²

¹ Учебно-научный центр ОНУ им. И.И.Мечникова (г. Николаев)

² Институт импульсных процессов и технологий НАН Украины
(г. Николаев)

Теплофизические характеристики жидких металлов

Описаны оптические методы измерения температуры и радиуса расширяющейся цилиндрической проволоки при пропускании через нее импульса тока плотностью $j \sim 10^{11}$ А/м². Получены температурные зависимости плотности и удельной теплоемкости жидких никеля и меди. Проведено сравнение полученных данных с результатами других авторов.

Вступление

Решение широкого класса прикладных задач приводит к необходимости использования теплофизических характеристик жидких металлов. Одним из широко используемых методов исследования свойств жидких металлов является электрический взрыв проводника (ЭВП) [1-4]. Большой интерес к этому методу обусловлен широким диапазоном параметров вещества (температура, плотность, давление) и скоростей протекающих процессов, реализующихся при ЭВП. Нагревание проводника мощными импульсами тока приводит к фазовым превращениям металла. При некоторых режимах электрического взрыва цилиндрические проводники однородны по сечению до начала кипения, и осевые неустойчивости в них не развиваются [5,6], что позволяет использовать его для нахождения неизвестных температурных зависимостей теплофизических характеристик жидких металлов.

1. Диагностика микросекундного электрического взрыва проводников

Измерение интегральных параметров электрического взрыва проводника (тока $I(t)$, напряжения $U(t)$, радиуса $a(t)$ и температуры проводника $T(t)$) позволяет исследовать эволюцию термодинамического состояния и высокотемпературных теплофизических характеристик металлов.

Основными средствами для измерения высоких ($T > 10^3$ К) температур служат оптико-электронные системы. В данной работе для исследования высокотемпературных состояний металлов был использован пирометр спектрального отношения. Оптическая система пирометра спектрального отношения, предназначенная для регистрации и спектральной фильтрации света, находится вне камеры, в которой происходит взрыв проводника. Изоб-

ражение нагреваемого током проводника фокусируется в плоскость диафрагмы, вырезающей ограниченный участок, поток излучения от которого коллимируется и направляется на оптический разделительный кубик, формирующий два оптических канала. Каждый из каналов имеет фотодетектор (18ЭЛУ-ФМ), преобразующий импульсы излучения (в видимом и инфракрасном диапазоне) в электрические сигналы. Выходные сигналы детекторов и изменения электрических характеристик $I(t)$, $U(t)$ регистрировались одновременно двумя двухлучевыми запоминающими осциллографами С8-17. Спектральная фильтрация света каждым из оптических каналов осуществлялась интерференционным светофильтром. Для расширения диапазона измеряемых температур было использовано 6 интерференционных светофильтров, длины волн λ_i которых в максимуме пропускания охватывали всю область спектральной чувствительности фотодетекторов (от 400 до 700 нм), а ширины пропускания $\Delta\lambda_i \sim 10$ нм.

Тепловое состояние объекта можно охарактеризовать условной температурой — интегральной цветовой температурой, определяемой выражением [7,8]

$$\frac{\int_{a_i^*}^{b_i^*} \varepsilon(\lambda, T) r(\lambda, T) \psi_{1j}(\lambda) d\lambda}{\int_{a_j^*}^{b_j^*} \varepsilon(\lambda, T) r(\lambda, T) \psi_{2j}(\lambda) d\lambda} = \frac{\int_{a_i^*}^{b_i^*} r(\lambda, T_{ic}) \psi_{1i}(\lambda) d\lambda}{\int_{a_j^*}^{b_j^*} r(\lambda, T_{ic}) \psi_{2j}(\lambda) d\lambda}, \quad (1)$$

где $\varepsilon(\lambda, T)$ — излучательная способность;

$r(\lambda, T)$ — спектральная плотность излучения черного тела;

T_{ic} — интегральная цветовая температура;

ψ_{1j}, ψ_{2j} - аппаратные функции каналов пирометра;

$(a_i^*, b_i^*) = (\lambda_i - 0.5\Delta\lambda_i, \lambda_i + 0.5\Delta\lambda_i)$ — рабочий интервал i -го интерференционного светофильтра.

Интегральная цветовая температура T_{ic} — это такая температура черного тела, при которой отношение сигналов двух спектральных каналов пирометра, визированного на объект, равно отношению аналогичных сигналов пирометра, визированного на черное тело [7].

Для того, чтобы иметь возможность находить интегральную цветовую температуру объекта в интервале от 10^3 до 10^4 К (большем, чем рабочий диапазон формулы Вина), для определения спектральной плотности излучения абсолютно черного тела была использована формула Планка

$$r(\lambda, T) = \frac{C_1}{\lambda^5} \left[\exp\left(\frac{C_2}{\lambda T}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (2)$$

где C_1 и C_2 — постоянные формулы Планка.

2. Методика расчета

Интегральная цветовая температура находилась методами численного интегрирования из уравнения

$$\frac{b_1(\lambda_i)}{b_2(\lambda_j)} = S_{ij} \frac{\int_{a_i^*}^{b_i^*} r(\lambda, T_{ic}) \Psi_{1i}(\lambda) d\lambda}{\int_{a_i^*}^{b_i^*} r(\lambda, T_{ic}) \Psi_{2j}(\lambda) d\lambda}, \quad (3)$$

где b_i — сигнал i -го канала пирометра;

S_{ij} — коэффициент относительной градуировки чувствительностей каналов пирометра (для каждой пары светофильтров), полученный из (3) при калибровке, выполненной с помощью лампы накаливания СИРШ 8,5-200-1.

Применение пирометра спектрального отношения позволяет рассчитывать расширение проводника, так как при нахождении T_{ic} по отношению полученных сигналов b_1/b_2 исключается влияние расширения, тогда как каждый из сигналов содержит информацию об изменении площади излучающего участка проводника, вырезанного диафрагмой.

Тогда выражение, определяющее отношение радиуса в любой момент времени к начальному радиусу, имеет вид

$$\frac{a(t)}{a(t^0)} = \frac{b(\lambda_i, t)}{b(\lambda_i, t^0)} \cdot \frac{f(T_{ic}^0)}{f(T_{ic})}, \quad (4)$$

где

$$f(T) = \int_{a_i^*}^{b_i^*} r[\lambda, T_{ic}(t)] \cdot \Psi_{1i}(\lambda) d(\lambda),$$

$$T_{ic}^0 = T_{ic}(t^0).$$

3. Результаты экспериментальных исследований

Реализация методик определения эволюции температуры и расширения жидкого проводника, нагреваемого импульсным током, и синхронного определения тока и напряжения позволяет рассчитать температурные зависи-

мости таких характеристик жидкого металла, как плотность γ и удельная теплоемкость c . Удельная теплоемкость рассчитывалась по формуле

$$c = \frac{IU}{m(dT/dt)}, \quad (5)$$

где m — масса проводника.

Проведены исследования однородного подводного электрического взрыва [9] медных и никелевых цилиндрических проводников в следующем диапазоне параметров:

начальный радиус $a_0 = (1-2) \cdot 10^{-4}$ м, длина проводника $l = (5-11) \cdot 10^{-2}$ м, индуктивность $L = (4-6) \cdot 10^{-6}$ Гн, емкость $C = 6 \cdot 10^{-6}$ Ф, начальное напряжение $U_0 = (5-30) \cdot 10^3$ В.

Плотность тока имела величину $j \approx 10^{11}$ А/м².

Получены температурные зависимости плотностей меди и никеля в диапазоне от температуры плавления до температуры кипения, которые приведены на рисунках 1а и 1б. Проведено сравнение полученных результатов с известными из работ [1,2,10,12].

На рисунках 2а и 2б приведено сравнение полученных в эксперименте зависимостей удельных теплоемкостей меди и никеля от температуры с данными работ [10-13].

Выводы

Проведенные эксперименты и применение для определения интегральной цветовой температуры и радиуса расширяющегося проводника предложенных авторами расчетных методов явились эффективным средством получения достоверной информации. Благодаря усовершенствованиям методики расчета (учет конечности ширины пропускания интерференционных фильтров и аппаратных функций каналов пирометра, использование вместо формулы Вина формулы Планка и численных методов) удалось значительно уменьшить погрешность определения как термодинамических параметров (температура, объем), так и теплофизических характеристик жидких металлов.

Сравнение полученных температурных зависимостей плотности для твердой и жидкой меди, а также плотностей и теплоемкостей твердых меди и никеля показало достаточно хорошее совпадение с известными результатами. Температурные зависимости теплоемкостей жидких меди и никеля, а также плотности жидкого никеля получены впервые.

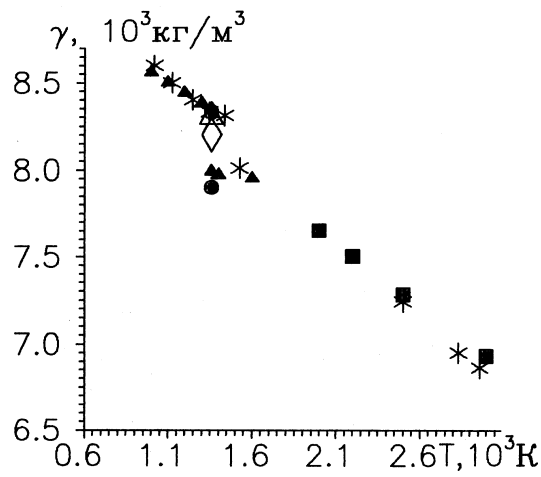


Рис. 1а. Температурная зависимость плотности меди
 * — наши данные, ■ — [1], ● — [2], ▲ — [10], △ — [11], ◇ — [12]

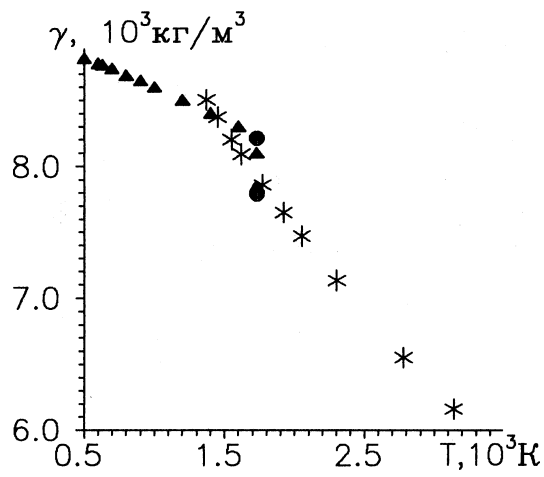


Рис. 1б. Температурная зависимость плотности никеля
 * — наши данные, ● — [2], ▲ — [10]

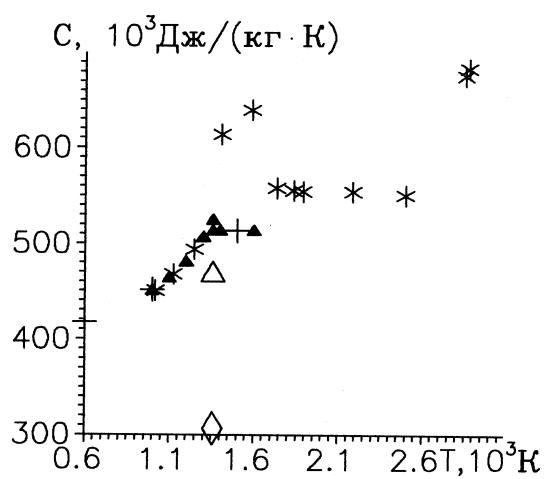


Рис. 2а. Температурная зависимость удельной теплоемкости меди
 * — наши данные, ▲ — [10], △ — [11], ◇ — [12], + — [13]

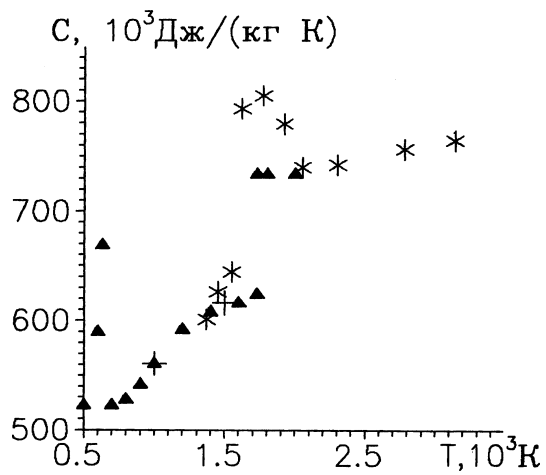


Рис. 2б. Температурная зависимость удельной теплоемкости никеля
 * — наши данные, ▲ — [10], + — [13]

Список литературы

1. Gathers G.R. Dynamic methods for investigating thermophysical properties of matter at very high temperatures and pressures// Rep. Prog. Phys. 1986. 49. P. 341-396.
2. Лебедев С.В., Савватимский А.П. Металлы в процессе быстрого нагревания электрическим током большой плотности // Успехи физич. наук.-1984. — Т. 144, в.2. — С.215-250.
3. Коваль С.И., Кускова Н.И., Ткаченко С.И. Исследование механизма электрического взрыва проводников и теплофизических характеристик жидких металлов//Теплофиз. высок. температур. — 1997. Т. 35, № 6, — С.876-879.
4. Коваль С.В., Кускова Н.И. Исследование динамики жидкого проводника при однородном электрическом взрыве //Письма в журн. технич. физики. — 1995. Т. 21, в. 6. — С. 36-40.
5. Кускова Н.И., Ткаченко С.И. Исследование радиальной однородности жидкого расширяющегося проводника, нагреваемого импульсом тока// Письма в журн. технич. физики. — 1996. Т. 22, в. 10. — С.30-34.
6. С.В.Коваль, Е.В.Кривицкий, Г.Б.Раковский. Исследование высокотемпературных свойств металлов методом подводного электрического взрыва проводников. Николаев. — (Препринт ПКБЭ АН УССР; № 7). 1989, 32 с.
7. Снопко В.Н. Анализ методик определения цветовой температуры широкополосным пирометром с кремниевым и германиевым фотодиодами// Измерит. техника. — 1992, № 9, — С.37-39.
8. Kuskova N.I., Tkachenko S.I., Koval S.V. Investigation of the Heating Dynamics and Properties of Liquid Tungsten// Intern. Journ. of Thermophysics. — 1998, Vol.19, N.1. — P.341-345.
9. Коваль С.В., Кускова Н.И., Ткаченко С.И. Экспериментальное и теоретическое исследование динамики электрического взрыва проводников и теплофизические характеристики жидких металлов. (Препринт ИИПТ АН Укр., № 27). 1996, 53 с.
10. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Справочник. М.: Металлургия. 1989. — 384 с.
11. Кнопфель Г. Сверхсильные импульсные магнитные поля. — М.:Мир, 1972. — 391с.
12. Hixson R.S. and Winkler M.A. Thermophysical Properties of Solid and Liquid Tungsten// Intern. Journ. Thermophys. — 1990, V. 11. — P.709-718.
13. Физические величины: Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. — 1232с.

С. В. Коваль, Н. І. Кускова

Теплофізичні характеристики рідких металів

АНОТАЦІЯ

Описано оптичні методи вимірювання температури і радіуса циліндричного дроту, що розширюється, при пропусканні через нього імпульса струму густиною $j \sim 10^{11}$ А/м². Отримано температурні залежності густини і питомої теплоємності рідких нікеля і міді. Проведено порівняння отриманих даних з результатами інших авторів.

Koval S. V., Kuskova N. I.

Thermophysical properties of liquid metals.

SUMMARY

The optical methods have been described for temperature measuring and determination radius of an expanding cylindrical wire to which a current pulse with density $j \sim 10^{11}$ A/m² has been applied. The temperature dependences of density, and specific heat of liquid nickel, and copper have been obtained. The data obtained have been compared with other known data.

А. Ю. Поповский¹, Б. А. Алтоиз², Е. В. Пыжов²

¹ *Одесская государственная морская академия*

² *Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова*

Учет аппаратной функции в задачах исследования неоднородных прослоек оптическими методами

Рассмотрены способы анализа результатов и учета погрешностей в задачах исследования структуры тонких прослоек гетерогенных систем оптическими методами. Исследуется влияние конечной ширины светового зонда. Разработан и апробирован алгоритм, создано программное обеспечение для обработки экспериментальных зависимостей. Корректность и достоинства предложенных методов проиллюстрированы на модельных примерах.

1. Введение

При исследовании пространственно неоднородных, в частности, дисперсных систем широко используется метод зондирования. Преимуществом сканирования оптическим зондом (метода, основанного на явлениях рассеяния, поглощения, интерференции и др.) является экспрессность, точность и аппаратная простота при изучении аэрозолей, эмульсий и суспензий, возможность определения и неразрушающего контроля физических свойств гетерогенных систем, например, таких их элементов, как тонкие и сверхтонкие газовые, жидкие и твердофазные прослойки. В случаях, когда на результатах измерения последних может сказаться соотношение между геометрией зонда (его формой, размерами) и неоднородностью областей зондирования и сканирования, необходим учет конечных размеров зонда и анализ погрешности метода. Для прослойки неоднородность области зондирования может быть связана с изменением ее геометрии (например, толщины), и (или) структуры прослойки, переменных по области сканирования [1,2].

Примером, одновременно сочетающим оба фактора, являются субмикронные переменные по толщине прослойки мезо- и немезогенных жидкостей, гетерогенные, ввиду наличия в них надмолекулярной структуры — пристенных ориентационно упорядоченных, т.н. эпитропно-жидкокристаллических (ЭЖК) слоев [3,4]. В исследованиях таких объектов необходимо корректное определение зависимости экстинкции собственных электронных полос поглощения в функции толщины прослойки. Поэтому в спектральной методике оптических исследований ЭЖК последовательно используется как прецизионное измерение профиля клиновидных зазоров, так и установление особенностей абсорбции света в прослойках жидкостей, заполняющих их.

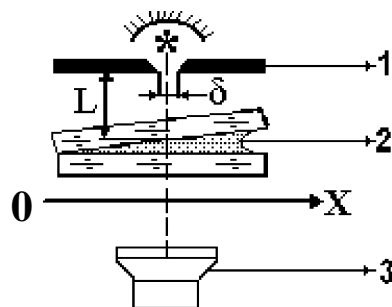


Рис. 1. Схема метода сканирования световым зондом слоя жидкости переменной толщины. 1 — щелевая диафрагма, 2 — исследуемый слой, 3 — ФЭУ

Исследование поглощения сверхтонких прослоек проводилось в работах [5,6], где изучались электронные спектры поглощения пленок НЖК: плоскопараллельных смачивающих [5] и ограниченных двумя прозрачными подложками — окнами [6]. Поскольку процедура создания и контроля однородности набора сверхтонких плоскопараллельных прослоек постоянной толщины представляется достаточно сложной, то более предпочтительно исследовать прослойки переменной толщины, на что впервые указано в [7]. В [8] методика клиновидного слоя использовалась для измерения спектров молекулярных кристаллов при гелиевых температурах, а в [9] симметричные прослойки создавались в зазоре между подложкой и плосковыпуклой линзой.

В [4] описана методика спектральных исследований прослоек жидкости переменной толщины, образуемых в специальном образом подготовленной т.н. “клиновидной” кювете. Сканирование прослойки по толщине производилось узким световым зондом, путем перемещения ее в направлении OX — перпендикулярном падающему свету (см. рис.1), с последующей фотоэлектрической регистрацией сигнала. Предварительная интерферометрия зазора позволяла установить его топографию, а после заполнения его исследуемым препаратом, проводилось повторное сканирование на длине волны максимума полосы собственного электронного поглощения. Отклонения от закона Бугера позволяли рассчитать изменение параметра ориентационного порядка S в слое в зависимости от толщины пленки.

При мысленной редукции зонда к бесконечно малой ширине (т.е. в предположении, что изменение толщины прослойки в пределах ширины зонда существенно меньше ее толщины) интенсивность проходящего света с учетом эффектов интерференции и поглощения может быть определена по формуле:

$$I(x) = I_0 \cdot \exp[-\mu \cdot d(x)] \left\{ 1 + r^2 \cdot \exp[-\mu \cdot d(x)] + 2r \cdot \cos[4\pi \cdot d(x)/\lambda] \right\}. \quad (1)$$

Здесь: I_0 — величина интенсивности падающего света, r — коэффициент отражения на межфазной границе (для границы стекло-воздух $n \approx 1.5$), μ — линейный коэффициент поглощения слоя, λ — длина волны сканирующего монохроматического зонда, $d(x)$ — толщина клиновидного слоя для данного положения x центра зонда.

В случае воздушного зазора $\mu \approx 0$, $r = (n-1)^2 / (n+1)^2 \approx 0.04$, т.е. основными являются интерференционные эффекты, поэтому получаем:

$$I_1(x) = I_0 \cdot \{1 + 2r \cdot \cos[4\pi \cdot d(x)/\lambda]\}. \quad (1a)$$

При сканировании заполненного зазора на длине волны, соответствующей максимуму электронной полосы, основной вклад вносит эффект поглощения света, поэтому выражение (1) приобретает вид:

$$I_2(x) = I_0 \cdot \exp[-\mu \cdot d(x)]. \quad (1b)$$

Конечная ширина светового зонда обуславливает попадание в регистрирующее устройство света, проходящего одновременно через участки различной толщины. Величина систематической погрешности зависит от уклона клиновидного зазора, степени его нелинейности и распределения энергии по ширине зонда — $K(x, x_0)$. Вид аппаратной функции $K(x-x_0)$ определяется дифракционными эффектами, т.е. зависит от ширины δ щелевой диафрагмы, расположенной перед кюветой (см. рис.1), расстояния L до исследуемого слоя, а также от характера преломления лучей на границах раздела сред. Поэтому регистрируемая функция $f(x)$ связана с “идеальной” $I(x)$ соотношением:

$$f(x_0) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x-x_0) \cdot I(x) dx. \quad (2)$$

Явный вид аппаратной функции $K(x-x_0)$ может быть определен экспериментально. Для этого следует просканировать ячейку, часть которой закрыта непрозрачным экраном с границей ориентированной перпендикулярно оси ОХ. При этом прямоугольная ступенька (в случае бесконечно узкого зонда) “размывалась” в соответствии с формулой:

$$f_e(x) = I_0 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} K(x-y) F(y) dy, \quad (3)$$

где $F(y)$ является масштабированной функцией Хевисайда — $F(y) = c \cdot 1\{y-x_0\}$, а x_0 соответствует границе экрана. Дифференцирование (3), с последующей нормировкой и аппроксимацией гладкой функцией позволяло определить функцию зонда (см. рис.2). В качестве первого приближения в качестве аппроксимирующей функции выбиралась гауссова функция, дисперсия которой составляла 0.15 мм.

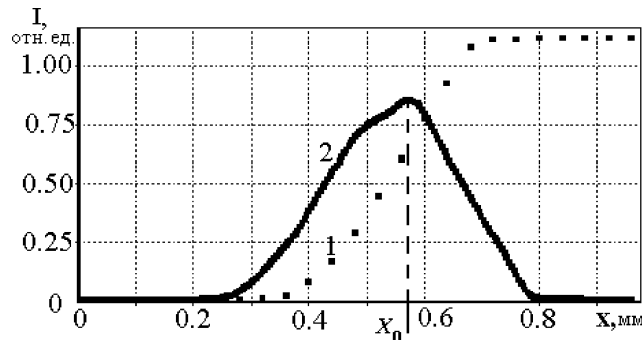


Рис. 2. Экспериментальное определение $f_c(x)$ -1 и $K(x-x_0)$ — 2, x_0 — соответствует краю экрана

Задача восстановления вида $I(x)$ сводится к решению интегрального уравнения Фредгольма первого рода (2) с ядром $K(x-x_0)$. Поскольку (2) фактически является уравнением свертки, то используя процедуры прямого и обратного преобразования Фурье несложно получить:

$$I(x) = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) \cdot K^{-1}(\omega) \exp(-i\omega x) d\omega. \quad (4)$$

2. Метод решения задачи

Задачи определения вида функции $I(x)$ по экспериментально измеренной зависимости $f(x)$ рассматривались ранее в задачах нелинейной диагностики плазмы [13], фильтрации сигналов связи [14], выявления тонкой структуры абсорбционных спектров [13], восстановления оптических изображений [15]. Поскольку точное решение (2) в большинстве случаев невозможно, то разработан ряд приближенных методов.

При сравнительно небольшом уровне шума (коэффициент вариации погрешностей $V \leq 3\%$) и не очень значительном “размытии” регистрируемой аппаратной функции эффективным оказывается [14] применение итерационного метода Ван-Циттерта — Бургера, основная идея которого заключается в разложении обратного оператора K^{-1} в ряд Неймана

$K^{-1} = I + \sum_{n=1}^{\infty} [I + K]^n$, где I — единичный оператор. Тогда (4) может быть преобразовано к виду:

¹ Точка x_0 соответствует положению центра светового зонда, при этом стационарность функции $K(x, x_0)$ относительно сдвига предполагает выполнение условия изоплантисма $K(x, x_0) = K(x - x_0)$

$$I(x) = f(x) + \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) [K^{-1}(\omega) - 1] d\omega. \quad (5)$$

Второе слагаемое — это сравнительно небольшая поправка, расчет которой можно провести, используя приведенное разложение. Тогда для решения, учитывающего N членов ряда, получаем формулу:

$$I(x) = I^{(N)}(x) = (N+1) \cdot f(x) + \sum_{m=1}^N C_{N+1}^{m+1} \cdot (-1)^N \cdot [K^{(N)}(x) \otimes f(x)], \quad (6)$$

где:

$$K^{(1)}(x) = K(x), \dots, K^{(N)}(x) = K^{(N-1)} \otimes K(x). \quad (7)$$

Соотношения (6) — (7) позволяют реализовать алгоритм итерационного метода:

Правая часть (2) всегда известна приближенно — из-за случайного шума приборов, а также шума, связанного с рассеянием на микро неоднородностях поверхностей раздела, т.е. регистрируемая функция содержит аддитивную помеху $v(x)$ и может быть представлена в виде $f(x) = f_1(x) + v(x)$, где $f_1(x)$ — “точное” значение функции $f(x)$. Тогда решение обратной задачи представляется как:

$$I(x) = \frac{1}{2\pi} \cdot \left[\int_{-\infty}^{\infty} f_T(\omega) \cdot K^{-1}(\omega) \exp(-i\omega x) d\omega + \int_{-\infty}^{\infty} v(\omega) \cdot K^{-1}(\omega) \exp(-i\omega x) d\omega \right], \quad (8)$$

где второе слагаемое представляет собой ошибку точного решения уравнения с приближенной правой частью. Расхождение этого интеграла происходит за счет высоких частот². Поэтому сколь угодно малые ошибки в процессе редукции усиливаются и накладываются на восстановленный сигнал, так что выигрыш от компенсации систематической погрешности нивелируется из-за возрастания случайных ошибок. Применительно к итерационному методу неустойчивость решения заключается в том, что хотя начальные поправки к нулевому приближению $f(x)$ являются достаточно малыми, но в дальнейшем они быстро растут (\sim номеру итерации N), обнаруживая все более резкие колебания, т.е. в восстанавливаемом сигнале появляются “пики” и “провалы”, обусловленные присутствием помех в регистрируемой функции $f(x)$.

Для уменьшения влияния шумов необходимо ограничивать число после-

² Действительно, высокочастотные составляющие функции $f(x)$, которые возникают из-за наличия помехи, делятся на малые числа $K(\omega)$ (поскольку $K(\omega) \rightarrow 0$ при $\omega \rightarrow \infty$), и в случае наличия в помехе «белого» шума, дают в решении бесконечно большие осцилляции.

довательных итераций, что эквивалентно “срезанию” высокочастотных гармоник сигнала. При этом метод устранения неустойчивости является эвристическим, т.е. заключается во внесении в алгоритм некоторой априорной нетривиальной информации.

3. Результаты и их обсуждение

Для регуляризации поставленной некорректной обратной задачи проделывался модельный эксперимент — “истинные” (редуцированные к бесконечно узкому зонду) зависимости вида (1а) и (1б) считались известными. При этом функция интерферограммы (1а) вычислялась при условии:

$$d(x) = \begin{cases} d_1, & x \leq x_1 \\ a \cdot (x - x_1)^2 + b \cdot (x - x_1) + d_1, & x > x_1 \end{cases} \quad (9)$$

Значения коэффициентов а и b выбирались в соответствии с реально получаемыми в экспериментах значениями уклонов клина и его нелинейности, а d_1 имеет смысл усредненной величины зазора в области оптического контакта стекол подложки — “нулевой зоны”. Конечность величины d_1 (обычный диапазон значений составлял ~ 0.008- 0.025 мкм) связана с качеством полировки кварцевых подложек. Для проведения расчетов в модели было выбрано $x_1=2$ мм, $d_1=0,015$ мкм.

Вид зависимости (1б) определялся, в соответствии с обнаруженным ранее [9], существованием ЭЖК фазы:

$$I_2(x) = \begin{cases} I_0, & x \leq x_1; \\ I_0 \cdot \exp[-\mu_1 \cdot d(x)], & x_1 < x \leq x_2; \\ I_0 \cdot \exp[-\mu_1 \cdot d(x_2)] \cdot \exp[-\mu_2 \cdot d(x)], & x > x_2 \end{cases} \quad (10)$$

Коэффициент μ_2 описывал поглощение объема препарата, а поглощение в пристенном слое μ_1 рассчитывалось по формуле: $\mu_1 = \mu_2 \cdot (1 - S)$, где S — величина параметра порядка для немезогенов ароматического ряда. Координата точки x_2 определялась из условия: $d(x_2)=2 d_s$, где d_s -толщина однослойного упорядоченного слоя.

В модельной зависимости предполагалось: $\mu_1=12$ мкм⁻¹, $\mu_2=27$ мкм⁻¹, $2 d_s=133$ нм. Вначале “истинные” зависимости $I_1(x)$ и $I_2(x)$ “размывались” функцией зонда, в соответствии с (3), затем в них вводился случайный шум $v(x)$ -того же порядка величины, что и наблюдаемый в эксперименте. При последующем восстановлении исходные функции $I_1(x)$ и $I_2(x)$ представляли критерий того, какими должны получаться окончательные результаты.

Было установлено, что “размывание” с учетом конечной ширины зонда и введение шума в функцию $I_1(x)$ (при симметричном виде аппаратной функции) практически не приводило к смещению абсцисс всех (кроме возможно

первого) ее экстремумов, а лишь существенно изменяло координату x_1 начала клина. Координаты экстремумов являлись опорными для установления профиля клиновидного зазора в соответствии с очевидным соотношением $d(x_n) = n \cdot \lambda / 4$, где $d(x_n)$ — толщина прослойки в месте n -ного экстремума. Отсутствие смещения экстремумов в результате наложения аппаратной функции на исследуемую обуславливало искажение определяемого по интерферограмме профиля зазора лишь в самой узкой его части ($d < \lambda/4$). Поэтому порядок восстановления был следующим:

- на участке $x_1 < x < x_3$ функция $f_1(x) = [f(x) + v(x)]$ аппроксимировалась рядом Фурье с ограниченным числом слагаемых. Коэффициенты ряда вычислялись методом наименьших квадратов;
- производилось восстановление полученной гладкой функции в соответствии с процедурой Ван Циттерта. При этом число итераций подбиралось таким, чтобы максимально приблизить положение точки x_1 к ее истинному значению, а также, чтобы максимально приблизиться к величине параметров I , I_{\max} , I_{\min} (обычно 8-10).

На рис. 3 представлены профили клиновидного зазора в тонкой его части, определенные по интерферограммам для исходной точной функции $I_1(x)$, “испорченной” влиянием зонда и шумом функции $f_1(x)$ и восстановленной функции $I_1^*(x)$. Величина d_0 , представляющая толщину клиновидного зазора в области оптического контакта стекол — “нулевой зоны” может быть оценена экспериментально путем измерения величины экстинкции. Повышение уровня шума и уширение функции зонда $K(x-x_0)$ определяет возрастание величины x_1 — координаты той точки, начиная с которой профиль зазора, определенный по восстановленной функции, практически совпадает с исходным.

В отличие от осциллирующей функции $I_1(x)$ явный вид кривой поглощения $I_2(x)$ являлся неизвестным, что обусловило иной прием регуляризации задачи. Дело в том, что аппроксимация кусочно-дифференцируемой функцией приводила в ходе процедуры восстановления к нарастанию погрешностей в месте разрыва производной функции, а аппроксимация одной гладкой функцией обуславливала “заглаживание” излома и потерю линейности графиков в полулогарифмических координатах. Поэтому перед началом процедуры восстановления функции $I_2(x)$ экспериментальная зависимость разделялась на 4 участка — в соответствии с видом функции $\text{Ln} I_2 = f(d)$. Первый соответствовал нелинейному участку от границы нулевой зоны до выхода графика на линейность, соответствующую участку однородного пристенного слоя; второй соответствовал участку квазиоднородного пристенного слоя, третий — границе между пристенным слоем и изотропной жидкостью, а четвертый — поглощению объемной жидкой фазы. При этом границы участков выбирались в зависимости от конкретной геометрии эксперимента. Следует отметить, что в исходной модели участки 1 и 3 отсутствовали, однако искажение как профиля клина, так и характера регистрируемой

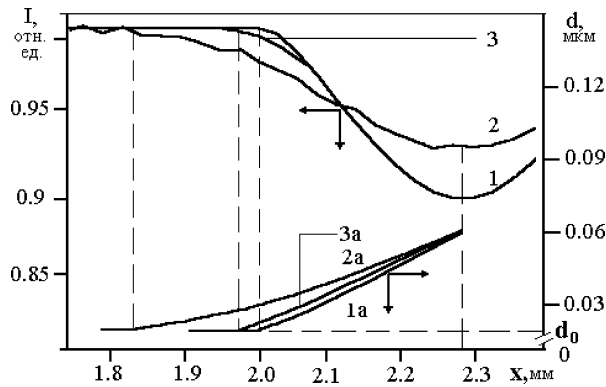


Рис. 3. Зависимость $I(x)$, определяемая по незаполненному клиновидному зазору. 1 — исходная модель, 2 — толщина зависимость интенсивности сигнала с учетом конечности ширины зонда и наличия случайного шума, 3 — результат восстановления сигнала. 1a, 2a, 3a — профили зазора, найденные по данным зависимостям.

толщиной зависимости экстинкции приводили в реально измеренной зависимости к их появлению.

Далее процедура восстановления “истинной зависимости поглощения” проводилась в соответствии со следующими этапами:

1. В полулогарифмических координатах строилась зависимость $\ln I_2 = f(d)$ и по графику определялись коэффициенты поглощения и координата фазовой границы ЭЖК — объемная жидкость (толщина ЭЖК фазы), как абсцисса пересечения двух аппроксимирующих прямых. Значения толщин d вычислялись по реальной зависимости (2a), представленной на рис. 3. Были определены параметры второго (диапазон $33 \div 115 \text{ нм}$, $\mu_1 = 12.9 \text{ мкм}^{-1}$) и четвертого участков (диапазон $> 145 \text{ нм}$, $\mu_1 = 24.7 \text{ мкм}^{-1}$), а также координата точки пересечения прямых — 139 нм . Эти данные заметно отличаются от параметров, заложенных в исходной модели.

2. Зависимость $\ln I = f(d)$ перестраивалась, с учетом того, что значения толщин вычислялись по восстановленной зависимости (3a). При этом параметры участков оказались равными — второго ($12,3 \text{ мкм}^{-1}$) и четвертого ($26,5 \text{ мкм}^{-1}$), но при этом диапазоны толщин оставались без изменения, и точка перелома продолжала оставаться смещенной в область больших толщин.

3. Экспериментальная зависимость $I_2(x)$ в диапазонах толщин участков 1-2 и 3-4 аппроксимировалась двумя полиномами и полученные таким образом гладкие функции подвергались процедуре восстановления. Построение восстановленной зависимости в полулогарифмических координатах позволило уточнить границы участков. Протяженности участков 1 и 3 уменьша-

ются (но не становятся равными нулю), положение точки пересечения аппроксимирующих прямых соответствует 132 нм, а нижняя граница участка однородного пристенного слоя становится равной 25 нм.

При реализации описанной методики установлено, что изменение в достаточно широких пределах величины уклона клина, а также параметров функции зонда не существенно влияют на результаты численного моделирования, что свидетельствует об устойчивости решения задачи. Разработанный алгоритм позволяет значительно снизить величину систематической погрешности и уточнить характер ориентационно упорядоченной структуры (толщину ЭЖК фазы, степень ее однородности и т.п.), которая существует в пристенном слое. Однако, предложенная методика пока не позволяет уточнить как особенности структуры, существующей в первых монослоях у подложки (квазисмектической ЭЖК фазы [4]), которая обуславливает нелинейность кривой поглощения $LnI_2=f(d)$ в области пристенного слоя, так и принципиально важный вопрос о “резкости” фазовой границы раздела ЭЖК — изотропная (объемная) жидкость. В дальнейшем нами планируется проведение работ, которые позволят проанализировать характер изменения упорядоченности на обеих межфазных границах, вычленив из результатов измерения дихроизма поглощения фактор конечности ширины светового зонда.

Литература

1. Алтоиз Б.А., Поповский А.Ю. Метод клиновидной кюветы в исследованиях ориентационно упорядоченных пристенных слоев, сформированных вблизи непрозрачных подложек // Вісник ОДУ, сер. Фізико-математичні науки, 1999, т.4, вып. 4, с.22-26.
2. Царгородская А.Б., Алтоиз Б.А., Поповский А.А.. Исследование ориентационной упорядоченности пристенных слоев нитробензола, образованных на металлической поверхности // Физика аэродисперсных систем, 1998, вып. 38, с. 104-107.
3. Алтоиз Б.А., Михайленко В.И., Поповский Ю.М., Поповский А.Ю. Электронно-колебательные спектры нитробензола в растворах жидкой фазе и ориентационно-упорядоченных пристенных слоях // Изв. Академии наук, сер. химич., №7, с. 1273-1277, 1995.
4. Altoiz B.A., Popovskii Yu.M., Popovskii A.Yu. The structure of orientationally ordered boundary layers of liquids. //Molecular Materials, 1995, 5, pp.113-122.
5. John L West, Gregory R., Magyar et al. Dichroic UV absorption of thin liquid crystal films // Appl. Phys. Lett., 1995, 2.,p. 347.
6. Wu S.T. J. Mean electronic resonant wavelength of liquid crystals // Appl.Phys. 1988, 64, 2, pp. 815-826.
7. Бахшиев Н.Г. Введение в молекулярную спектроскопию. Л., 1971, 367с.
8. Делюков А.А., Климушева Г.В. Особенности поглощения света в неко-

- торых молекулярных кристаллах // Современные проблемы спектроскопии молекулярных кристаллов. К. Наукова думка, 1976, с. 106-109.
9. Хрипунов П.К., Альперович Л.И. Оптические характеристики органических жидкостей в ультрафиолетовой области спектра // ЖПС, 1973, **18**, вып.6, с. 1066-1069.
 10. Преображенский Н.Г. Неустойчивые задачи диагностики плазмы. Наука, Новосибирск, 1982, 235 с.
 11. Василенко Г.И. Теория восстановления сигналов. М.: Советское радио, 1978, 272с.
 12. Раутиан С.Г. Реальные спектральные приборы // УФН, 1958, **66**, вып. 3, с. 475-517.
 13. Фриден Б. В кн. Обработка изображений и цифровая фильтрация. М.: Мир, 1979, с. 193-270.

Б. А. Алтоіз, О. Ю. Поповський, Є. В. Піжов

**Урахування апаратної функції в задачах дослідження прошарків
змінної товщини оптичними засобами**

АНОТАЦІЯ

Розглянуто засоби аналізу результатів та врахування похибок у завданнях дослідження структури тонких прошарків гетерогенних систем оптичними засобами. Досліджується вплив кінцевої ширини світлового зонду. Розроблено алгоритм та створено програмне забезпечення для обробки експериментально одержаних залежностей. Коректність та достойність запропонованих методів проілюстровано на модельних прикладах.

Altoiz B. A., Popovskii A. Yu., Pizhov E. V.

**The account of a device function in the problems of nonuniform interlayers
studying by optical methods**

SUMMARY

The analysis of experimental results has been done and the account of errors in problems of studying of thin interlayers structure by optical probe has been considered. The influence of a finite width of light probe has been explored. The algorithm has been developed and the program maintenance for processing experimental dependencies has been created. Correctness and advantages of the methods offered have been demonstrated for model examples.

С. В. Амбросов

Одесский государственный политехнический университет

Моделирование оптимальной схемы опторазрядного разделения газов

Предложен эффективный подход к моделированию оптимальных схем опторазрядного разделения газов, базирующийся на комплексном использовании моделей элементарных атомных процессов, оптимальных лазерных воздействий, теории оптимального управления и аппарата матрицы плотности. Приведены результаты численного расчета оптимальной схемы разделения изотопов Rb.

К числу перспективных методов разделения газов, изотопов относится метод многоступенчатого возбуждения и ионизации атомов [1-3]. Селективное возбуждение атомов газа реализуется на первом этапе посредством резонансного лазерного излучения, затем проводится ионизация возбужденных частиц, требующая в классических схемах либо мощного лазерного излучения либо приложения электрического поля. Альтернативным механизмом на второй стадии может быть использование действия столкновительной ионизации (действие электронного удара, ион-атомных столкновений и т.д.). Следует подчеркнуть, что такой способ естественно реализуется средствами современной плазмотронной техники. Хотя многие из искомых процессов достаточно адекватно, по крайней мере, на качественном уровне описываются упрощенными простыми соотношениями (см.[1,2]), тем не менее полная, последовательная количественная теория этих процессов еще отсутствует. Новым перспективным направлением здесь представляется моделирование оптимальных схем опторазрядного разделения газов (изотопов). Данная работа посвящена поиску и моделированию оптимальных схем опторазрядного разделения газов и изотопов на основе комплексного использования моделей элементарных атомных процессов, оптимальных лазерных воздействий, аппарата матрицы плотности. В практической реализации схем селективной фотоионизации лазерным излучением, как правило, смесь буферного и разделяемых газов (изотопов) движется поперек зоны электрического разряда, причем разрядная зона облучается внешним электромагнитным полем, резонансным одному из выбранных изотопов [1]. Буферный газ определяет характеристики разряда (температуру T , концентрацию частиц n). В зоне разряда изотопы ионизируются, после чего ионы выводятся из зоны разряда и собираются одним из физико-химических методов. В силу различия коэффициентов диффузии ионы при перпендикулярном скорости течения газа в движении достигнут окружающих стенок быстрее, чем атомы с

дальнейшей локализацией благодаря процессу конденсации. Время ионизации соответствует времени пролета атома через зону действия электромагнитных полей и равно: $\tau = t_f = L/v$ (L — размер облучаемой зоны; v — скорость потока частиц). Если излучение насыщает резонансный переход и реализуется столкновительный механизм ионизации возбужденных атомов, то условие ионизации резонансной компоненты имеет вид: $1/nS'(T) > L/v = t_f$, где S' — коэффициент ионизации возбужденных атомов в столкновении. Указанные параметры удовлетворяют следующим типичным значениям: $L = 1 \text{ cm}$, $v = 10^4 \text{ cm} / \text{c}$, $n = (10^{11} - 10^{13}) \text{ cm}^{-3}$. Этап оптимизации модели опторазрядного разделения состоит в поиске оптимальной формы электромагнитного импульса резонансного излучения, обеспечивающую \max ионизованных частиц в схеме разделения газов (одна из возможных формулировок). Процесс разделения изотопов (газов) описывается следующей системой уравнений (см. [1,4]):

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_0 &= -W_1(\rho_0 - \rho_1) + \rho_1 / T_1 + K_1 \rho_0 \rho_1 \\
 \dot{\rho}_1 &= W_1(\rho_0 - \rho_1) - \rho_1 / T_1 - R\rho_1 - K_1(\rho_0 \rho_1 - \rho_1 \rho_0) \\
 \dot{\rho}'_0 &= -W'_1(\rho'_0 - \rho'_1) + \rho'_1 / T_1 + K_1 \rho_0 \rho'_1 \\
 \dot{\rho}'_1 &= W'_1(\rho'_0 - \rho'_1) - \rho'_1 / T_1 - R\rho'_1 - K_1(\rho_0 \rho'_1 + \rho_1 \rho'_0) \\
 \dot{n} &= R\rho_1 - n(K_2^{(0)} \rho'_0 + K_2^{(1)} \rho'_1) + n'(K_2^{(0)} \rho_0 + K_2^{(1)} \rho_1) - n / \tau \\
 \dot{n}' &= R\rho'_1 - n'(K_2^{(0)} \rho_0 + K_2^{(1)} \rho_1) + n(K_2^{(0)} \rho'_0 + K_2^{(1)} \rho'_1) - n' / \tau
 \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь ρ_0, ρ'_0 — концентрации атомов каждой из изотопических модификаций в основном состоянии; ρ_1, ρ'_1 — в возбужденном состоянии; n, n' — концентрации их ионов; коэффициенты K_1 и K_2 соответственно определяют скорость процесса резонансной передачи энергии возбуждения ($K_1 = \sigma_w v_t$; σ_w — сечение Вайскопфа, v — скорость атомов) и скорость процесса перезарядки ($K_2 = \langle \sigma_{ch}(v_i) v_i \rangle$; σ_{ch} — сечение резонансной перезарядки вытягиваемых ионов, v — их скорость относительно нейтральных атомов).

Усреднение в формуле для K_2 проводится по распределению вытягиваемых атомов. Поскольку в шкале энергий расстояние от возбужденного уровня до границы ионизации меньше, чем от основного, то константы скорости перезарядки для возбужденных и невозбужденных нейтральных атомов могут заметно различаться. Величины W_1, W'_1 в (1) — вероятности радиационных переходов, относящиеся каждая к своей изотопической компоненте и определяемые формулами:

$$W_1 = I_1 \sigma_1(\omega) / \hbar \omega_1 = I_1 (16\pi / c T_2) (\mu_{01} / 2\hbar)^2 [(1/T_2)^2 + (\omega - \omega_{01})^2]^{-1}$$

$$W'_1 = I_1 \sigma'_1(\omega) / \hbar \omega_1 = I_1 (16\pi / c T_2) (\mu_{01} / 2\hbar)^2 [(1/T_2)^2 + (\omega - \omega'_{01})^2]^{-1} \quad (2)$$

где I_1 — интенсивность поля резонансного излучения, T_2 — время поперечной релаксации, остальные обозначения стандартные. Поскольку рассматривается механизм столкновительной ионизации, удобно провести замены: $W_2 \rightarrow S'n/\gamma$, $\tau \rightarrow \gamma z/v$, $E_f = \sigma_{12} \bar{w}_0 / v d \hbar \omega_{21}$, где z — пространственная координата вдоль потока, d — поперечные размеры облучаемой зоны. Типичные значения: $S'n = 10^4 c^{-1}$, $\gamma = 10^4 c^{-1}$, $t_f = 4 \cdot 10^{-4} c$, $E_f = 2,5$. Аналитическое решение нелинейной системы (1) найти не удастся, поэтому задача решается численно. Система (1) может быть сведена к линейной при условии, что лазерное излучение воздействует на наиболее редкий из двух изотопов и концентрация этого изотопа мала. Кроме того предполагается выполнение условий, при которых вероятность резонансного обмена меньше скорости ионизации, т.е.: $W_2 > \sigma_w v_t N$, где N — концентрация сталкивающихся атомов) и время вывода ионов из облака нейтральных атомов меньше времени перезарядки, т.е. $N \sigma_{ch} d < 1$. В этом случае решение системы (1) существенно упрощается. В качестве примера рассмотрим схему опторазрядного разделения изотопов рубидия Rb [1,4]. На 1 ступени используется излучение лазера с длиной волны 7950Å (возбуждение в состоянии $5p^2 P_{1/2}$); Для паров Rb при $100^\circ C$ (давление 10^{-4} торр.) сечение возбуждения $\sigma_1 = 10^{-11} cm^2$, сечение столкновительной ионизации $\sigma_2 = 10^{-13} cm^2$. При опторазрядном разделении изотопов оптимальной будет схема в случае, если атом возбуждается лазерным излучением до состояния, имеющего вероятность распада вследствие столкновительной ионизации большую, чем вероятность радиационного распада. На рис. 1 приведены результаты численного моделирования оптимальной формы лазерного импульса в задаче опторазрядного разделения Rb лазерным излучением со столкновительной ионизацией, а также типичное поведение заселенностей основного (кривая 1) и возбужденного (кривая 2) состояний. Искомые результаты практически совпадают с данными, соответствующими сценарию ионизации импульсным электрическим полем. Такой расчет был выполнен в [4] с использованием достаточно простой модели скоростных уравнений. Сформулированный в данной работе подход в отличие от [4] является более адекватным и последовательным и позволяет выйти за пределы использованных выше приближений

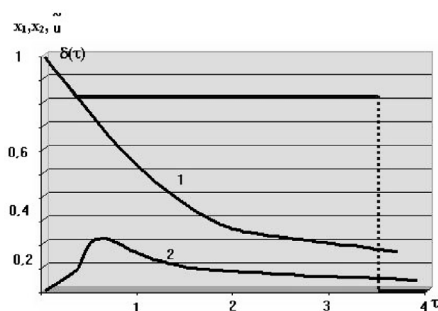


Рис. 1. Результаты численного моделирования процесса опторазрядного разделения изотопов Rb электромагнитным излучением со столкновительной ионизацией: δ -пунктир — оптимальная форма лазерного импульса, кривые 1 и 2 — соответствуют заселенностям основного и возбужденного состояний.

Для искомой схемы опторазрядного разделения изотопов Rb δ -импульс обеспечивает максимально возможный уровень возбуждения верхнего состояния и далее паразитные процессы типа спонтанной релаксации, резонансной передачи возбуждения и резонансной перезарядки за малое время не могут заметно изменить степень достигнутого возбуждения. В результате эффективность и оптимальность всей схемы опторазрядного разделения увеличивается. В случае не выполнения выше указанных условий оптимальный режим лазерного воздействия будет содержать в конце так называемый пассивный участок управления, впервые предсказанный для схемы классической фотоионизации в модели КШШ [2]. Его появление связано с конечной скоростью ионизации и следующей отсюда неэффективностью вклада энергии в резонансный канал в конце процесса. Перераспределение энергии излучения по координате z позволяет устранить вредную для процесса опторазрядного разделения роль обратных вынужденных и спонтанных радиационных переходов. Результаты расчета оптимального режима воздействия приведены на рис. 1. Отметим, что полученная оптимальная форма интенсивности резонансного излучения справедлива и для ситуации, когда ионизация возбужденных атомов осуществляется дополнительным лазерным излучением или внешним электрическим полем [1,4,5].

Литература

1. Летохов В.С. Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах. — М.:Наука,1997. — 480с.
2. Краснов И.В., Шапарев Н.Я., Шкедов И. Оптимальные лазерные воздействия. — Новосибирск, 1993. — 92с.

3. Карлов Н.В., Орлов А.И., Петров Ю.Н., Прохоров А.М. Лазерное управление диффузионным истечением газов в вакуум сквозь преграды с развитой поверхностью // Изв. АН СССР. Сер. Физика. — 1985. — Т.49, №4. — С.500-505.
4. Ambrosov S.V., Shpinareva I.M. Selective Ionization of Atoms by Electric and Light Field. Autoionization Rydberg Resonances in Heavy Atoms. Optimal Isotope-Separation Selective Molecular Vibration Levels Excitation Schemes// Proc. 32nd Europhysics Conference EGAS. — Vilnius (Lithuania). — 2000. — P.197.
5. Shpinareva I. New Quantum Mechanical Method to Calculation of Auto ionization Resonance in Heavy Atoms in Electric Field: Gd,Tm. Optimal Schemes of Selective Ionization of Atoms by Electric, Laser field// Proc.5th European Workshop “Quantum Systems in Physics & Chemistry”. — Uppsala (Sweden). — 2000. — P.131.

С. В. Амбросов

Моделивання оптимальної схеми опторозрядного поділення газів

АНОТАЦІЯ

Запропоновано ефективний підхід до моделювання оптимальних схем опторозрядного поділення газів, який базується на комплексному використанні моделей елементарних атомних процесів, оптимальних лазерних дій, теорії оптимального управління, апарата матриці густини. Приведені результати чисельного моделювання оптимальної схеми поділення ізотопів Rb.

Ambrosov S. V.

Modeling of optimal schemes for the gases optical discharge separation

SUMMARY

It is developed an effective approach to modeling of the optimal schemes for the gases optical discharge separation, which is based on the complex use of the elementary atomic processes models, optimal laser actions models, density matrices formalism. The results of numerical calculation for optimal scheme of the Rb isotopes separation process are presented.

А. А. Мочалов, С. С. Коваль

*Украинский государственный морской технический университет,
г. Николаев*

Математическая модель кристаллизации сплава в буферной области слитка

Разработана математическая модель неравновесной кристаллизации двухкомпонентного сплава, с использованием фазовой диаграммы равновесия. Рассмотрен процесс образования твердой фазы в буферной области слитка. Установлена зависимость процесса кристаллизации от параметров восходящего потока центральной области слитка. Результаты компьютерного эксперимента позволяют объяснить появление центров кристаллизации, с дальнейшим развитием равноосных кристаллов.

На этапе формирования слитка протекает множество физических, химических, диффузионных и других процессов, влияющих на формирование большинства характеристик затвердевшего металла. Условия кристаллизации и затвердевания литых материалов определяют величину переохлаждения сплава, зарождение центров кристаллизации, форму и распределение кристаллов в отливке, ликвацию примесей и развитие дендритной неоднородности. В этот момент в объеме слитка возникают устойчивые гидродинамические поля, образование которых обусловлено возникновением естественно-конвективного движения металла в пограничном слое. На границе нисходящего потока теплового пограничного слоя и восходящего потока центральной области слитка возникает буферная область (рис.1). При течении между двумя противоположными потоками возникают правильно чередующиеся вихри с правым и левым вращением и осями перпендикулярными направлению потока. Так как металл в данной области претерпевает интенсивное перемешивание, то распределенные теплофизические параметры можно заменить среднеинтегральными по выделенному объему. Таким образом образование вихря вовлекает слои жидкой фазы с различными температурами и концентрациями, вследствие этого в буферной области, не вовлеченной в теплообмен, возможна ситуация при которой будут появляться свободные равноосные кристаллы (появление центров кристаллизации, с дальнейшим образованием равноосных кристаллов).

Существующие теории [1] предполагают, что в тепловом пограничном слое возможно появление центров кристаллизации, с дальнейшим развитием равноосных кристаллов. Однако данные теории не могут дать четкого месторасположения буферной области, а также количественную характери-

стику температурного и концентрационного полей в данной области. Целью данной работы является: создание математической модели описывающей процесс возникновения твердой фазы в буферной области слитка, а также исследование влияния параметров восходящего потока центральной части слитка на процессы, протекающие в рассматриваемой области.

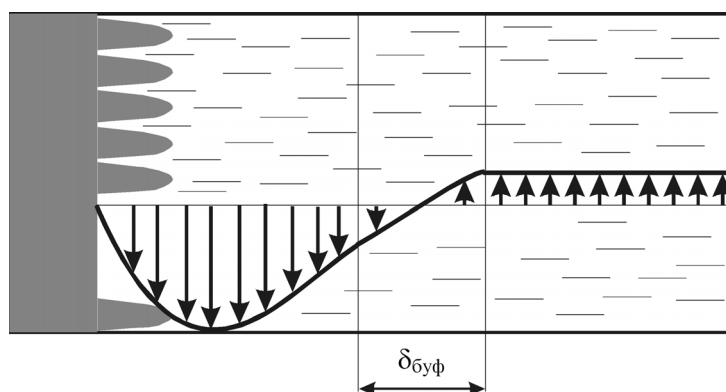


Рис. 1. Схема выделения буферной области

Из объема буферной области выделим элемент со следующими геометрическими размерами

$$x_{буф} \times y_{буф} \times z_{буф},$$

где $x_{буф} = y_{буф} = z_{буф} = \delta_{буф} = 2 \Delta y n_v$ — толщина выделенного элемента буферной области;

n_v — количество элементов теплового пограничного слоя, в которых скорость естественно-конвективного движения меньше скорости восходящего потока центральной области слитка.

Интенсивность перемешивания жидкой фазы в буферной области намного выше, чем в области конвективного движения, поэтому распределенные теплофизические параметры заменим среднеинтегральными по объему.

Рассмотрим массовый расход жидкого металла, поступающего в буферную область

$$m'_{буф} = \bar{v}_e f_e \bar{\rho}'' , \quad (1)$$

где \bar{v}_e — среднерасходная скорость восходящего потока; $f_e = \frac{1}{2} \delta_{буф} z_{буф}$ — площадь сечения на входе в выделенный элемент; $\bar{\rho}''$ — плотность жидкой фазы.

Массовый расход жидкой фазы, вытекающего и буферной области, можно выразить так:

$$m''_{\text{буф}} = \bar{v}_{np} f_{np} \bar{\rho}'' , \quad (2)$$

где \bar{v}_{np} — среднерасходная скорость конвективного потока теплового пограничного слоя; $f_{np} = \frac{1}{2} \delta_{\text{буф}} z_{\text{буф}}$ — площадь сечения на выходе из выделенного элемента.

Изменение концентрации в единицу времени, согласно закону сохранения массы [2], равно разности массовых расходов вдоль координатных осей выделенного элемента буферной области, умноженных на соответствующие концентрации компонента жидкой фазы. Тогда уравнение изменения концентрации примеси в буферной области, со временем, с учетом (1) и (2) запишется так:

$$m'_{\text{буф}} C'_{\text{буф}} - m''_{\text{буф}} C''_{\text{буф}} = \frac{d(M_{\text{буф}}^{\text{ж}} C''_{\text{буф}})}{d\tau} , \quad (3)$$

где $C'_{\text{буф}}, C''_{\text{буф}}$ — концентрация компонента жидкой фазы на входе и выходе из выделенного элемента; $M_{\text{буф}}^{\text{ж}}$ — масса жидкой фазы.

Преобразуем полученное выражение, с учетом уравнения неразрывности [3]:

$$\chi_{\text{буф}} (C'_{\text{буф}} - C''_{\text{буф}}) = \frac{C''_{\text{буф}} - C_S}{C_L - C_S} \frac{dC''_{\text{буф}}}{d\tau} - C''_{\text{буф}} \frac{d\varepsilon''_{\text{буф}}}{d\tau} , \quad (4)$$

где $\chi_{\text{буф}} = \frac{\bar{v}_6}{2\delta_{\text{буф}}}$ — характеристический коэффициент, учитывающий влияние восходящего потока на процессы, протекающие в буферной области, C_S, C_L — концентрация солидус и ликвидус, определяемая по фазовой диаграмме равновесия сплавов [4]. $\frac{d\varepsilon''_{\text{буф}}}{d\tau}$ — скорость выделения относительного количества твердой фазы [5].

Решим уравнение (4) относительно $\frac{dC''_{\text{буф}}}{d\tau}$

$$\frac{dC''_{\text{буф}}}{d\tau} = \frac{C_L - C_S}{2C''_{\text{буф}} - C_S} \left(\chi_{\text{буф}} (C'_{\text{буф}} - C''_{\text{буф}}) + \right. \\ \left. + C''_{\text{буф}} \frac{(C_L - C''_{\text{буф}}) \frac{dC_S}{dT''_{\text{буф}}} + (C''_{\text{буф}} - C_S) \frac{dC_L}{dT''_{\text{буф}}}}{(C_L - C_S)^2} \frac{dT''_{\text{буф}}}{d\tau} \right). \quad (5)$$

Рассмотрим тепловые потоки, связанные с буферной областью. Тепловой поток, входящий в выделенный элемент, обусловленный восходящим движением жидкой фазы в центральной области, согласно [6], можно выразить так:

$$Q'_{\text{буф}} = c^{\text{ж}} \bar{v}_s f_s \bar{\rho} T'_s \quad (6)$$

где $\rho^{\text{ж}}$ — удельная теплоемкость жидкой фазы; T'_s — температура жидкого металла центральной области слитка.

Тепловой поток, выходящий из буферной области, в направлении движения конвективного потока пограничного слоя

$$Q''_{\text{буф}} = c^{\text{ж}} \bar{v}_{np} f_{np} \bar{\rho} T''_{\text{буф}}, \quad (7)$$

где $T''_{\text{буф}}$ — температура жидкой фазы буферной области.

Количество тепла, выделяющееся при фазовом переходе в буферной области в единицу времени, согласно [6], выразим следующим образом:

$$\frac{dQ_{\text{буф}}}{d\tau} = r \frac{dM^T_{\text{буф}}}{d\tau} = r M_{\text{буф}} \frac{d\varepsilon''_{\text{буф}}}{d\tau}, \quad (8)$$

где r — скрытая теплота фазового перехода; $M^T_{\text{буф}}$ — масса закристаллизовавшегося металла в буферной области; $M_{\text{буф}}$ — масса буферной области.

Для определения температуры выделенного объема буферной области запишем уравнение изменения энтальпии, согласно закону сохранения энергии [2]

$$\frac{d(M_{\text{буф}} c^{\text{ж}} T''_{\text{буф}})}{d\tau} = Q'_{\text{буф}} - Q''_{\text{буф}} + \frac{dQ_{\text{буф}}}{d\tau}. \quad (9)$$

Преобразуем выражение (9) с учетом (6), (7), (8)

$$M_{\text{буф}} c^{\text{ж}} \frac{dT_{\text{буф}}''}{d\tau} = c^{\text{ж}} \bar{v}_e f_e \bar{\rho}'' T_e' - c^{\text{ж}} \bar{v}_{np} f_{np} \bar{\rho}'' T_{\text{буф}}'' + r M_{\text{буф}} \frac{d\varepsilon_{\text{буф}}''}{d\tau}. \quad (10)$$

Решим полученное уравнение (10) относительно $\frac{dT_{\text{буф}}''}{d\tau}$

$$\frac{dT_{\text{буф}}''}{d\tau} = \left(\chi_{\text{буф}} (T_e' - T_{\text{буф}}'') - \frac{r}{c^{\text{ж}}} \frac{1}{C_L - C_S} \frac{dC_{\text{буф}}''}{d\tau} \right) / \left(1 - \frac{r}{c^{\text{ж}}} \frac{(C_L - C_{\text{буф}}'') \frac{dC_S}{dT_{\text{буф}}''} + (C_{\text{буф}}'' - C_S) \frac{dC_L}{dT_{\text{буф}}''}}{(C_L - C_S)^2} \right). \quad (11)$$

Для того замкнуть систему уравнений (5), (11), дополним ее начальными и граничными условиями по концентрации и температуре.

$$T_{\text{буф}}''|_{\tau=0} = T_0, \quad C_{\text{буф}}''|_{\tau=0} = C_0, \quad \varepsilon_{\text{буф}} = 0.$$

Результаты численного эксперимента, проведенного на базе данной математической модели для сплава Fe + 0,2%, для которого $r = 2,717 \cdot 10^5 \text{ Дж/кг}$; $\rho = 6,55 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$; $c^{\text{ж}} = 840 \text{ Дж/К}$; $T_L = 1800 \text{ К}$; $T_S = 1755 \text{ К}$ (где T_L — температура ликвидус, T_S — температура солидус)[7] представлены на рис.2.

В результате компьютерного эксперимента установлено, что при соответствующих теплофизических параметрах восходящего потока центральной области в буферной области возможно выделение твердой фазы в виде равноосных кристаллов, что подтверждает теорию [1]. Представленная модель неравновесной кристаллизации двухкомпонентного сплава позволяет исследовать влияние параметров слитка на процессы, протекающие в буферной области слитка. Установлено, что геометрические параметры кристаллизующейся системы, а также степень развития конвективных потоков в объеме слитка, определяемые характеристическим параметром $\chi_{\text{буф}}$, оказывают существенное влияние на интенсивность выделения твердой фазы в буферной области (рис.3). Так при увеличении значения $\chi_{\text{буф}}$, время переходного процесса уменьшается. Конечная температура, концентрация компонента в твердой и жидкой фазах и относительное количество твердой фазы при этом остаются неизменными.

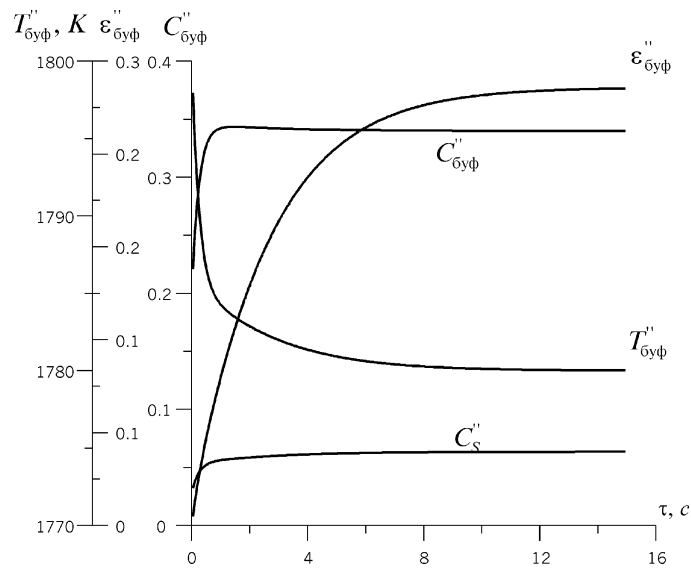


Рис. 2. Изменение во времени концентрации компонента в жидкой фазе $C''_{буф}$, и твердой фазе C''_S , температуры жидкой фазы $T''_{буф}$ и относительного количества твердой фазы $\epsilon''_{буф}$ в буферной области ($C'_{буф} = 0,34\%$, $C''_{буф} = 0,2\%$, $T'_{буф} = 1780$ K, $T''_{буф} = 1800$ K, $\chi_{буф} = 5$)

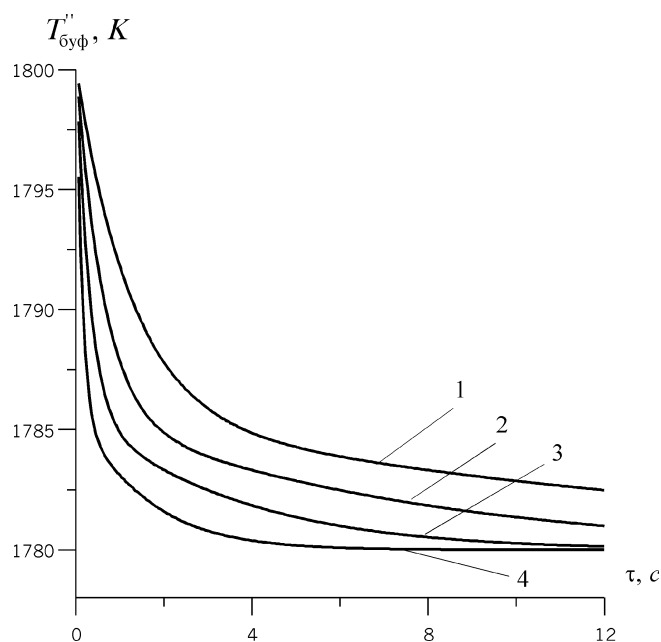


Рис. 3. Зависимость температуры буферной области от параметров центральной области (1 – $\chi_{буф}=1$; 2 – $\chi_{буф}=4$; 3 – $\chi_{буф}=6$; 4 – $\chi_{буф}=9$)

Полученные результаты численного эксперимента позволяют оценить скорость выделения твердой фазы, что необходимо при разработке оптимальных алгоритмов управления процессом кристаллизации. Представленная модель может использоваться как элемент при создании комплексной модели неравновесной кристаллизации сплавов.

Литература

1. Ефимов В.А., Эльдарханов А.С. Физические методы воздействия на процессы затвердевания сплавов. М.: Металлургия, 1995. 272 с.
2. Сивухин Д.В. Термодинамика и молекулярная физика. М.: Наука, 1990. 592с.
3. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М.: Наука, 1974. 712 с.
4. Оно А. Затвердевание металлов. М.: Металлургия, 1980. 152 с.

5. Мочалов А.А., Коваль С.С. Математическая модель неравновесной кристаллизации двухкомпонентного сплава (укр.) // Науковий вісник Миколаївського державного педагогічного університету. Випуск 1, 1999, С. 249-252.
6. Лыков А.В. Теория теплопроводности. М.: Высшая школа, 1967. 600с.
7. Геллер Ю.А., Рахштадт А.Г. Материаловедение. М.: Металлургия, 1984, 384с.

О. О. Мочалов, С. С. Коваль

**Математична модель кристалізації сплаву
в буферній зоні злитку**

АНОТАЦІЯ

Розроблено математичну модель нерівноважної кристалізації двохкомпонентного сплаву, з використанням фазової діаграми рівноваги. Розглянуто процес утворення твердої фази в буферній області злитку. Встановлено залежність процесу кристалізації від параметрів висхідного потоку центральної області злитку. Результати комп'ютерного експерименту дозволяють пояснити появу центрів кристалізації, з подальшим розвитком рівновісних кристалів.

Mochalov A., Koval S.

**The mathematical model of alloy crystallization
in the buffer region of ingot**

Summary

The mathematical model describing crystallization in buffer region, characterized by instability parameters, using double-phase diagram is developed. The dependencies of crystallization parameters on upward flow parameters of ingot central region are computed. The segregation process of solid phase in buffer region is studied. The results of numerical simulations and experimental information are well consistent.

УКД 551.577

С. К. Асланов

Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова

Решение задачи Рэлея о неустойчивости тонких струй для стадии их распада

На основе уравнений баланса массы и энергии построена теория для приближенного описания распада на капли тонкой струи жидкости, истекающей из отверстия. Главным фактором служит действие сил поверхностного натяжения. Произведенный математический анализ позволил однозначно оценить относительную величину среднего диаметра образующихся капель и расстояний между ними. Полученные результаты хорошо согласуются с известными экспериментальными наблюдениями и значением длины волны Рэлея из линейной теории неустойчивости струи. Подобным образом построена теория образования пузырьков при распаде газовой струи, истекающей внутри жидкости. Учет эффекта сжимаемости газа и адиабатичности процесса позволяет получить хорошее согласие с соответствующим результатом Рэлея из линейной теории неустойчивости.

1. Тонкая струя достаточно текучей жидкости, выбрасываемая из круглого отверстия в окружающую атмосферу за счет перепада давлений, даже при небольших скоростях своего движения, пройдя определенное расстояние, начинает распадаться на разрозненные массы. Образующиеся из них капли после ряда деформационных пульсаций своей поверхности вдоль направления истечения принимают сферическую форму. Указанное явление находит широкое применение в различных технических устройствах и лабораторной практике. Рэлей [1] подошел к объяснению рассматриваемого феномена с позиций решения задачи о возмущениях цилиндрической поверхности струи, разделяющей газообразную и жидкую среду. В качестве главного источника установленной им неустойчивости были приняты силы поверхностного натяжения. Жидкость предполагалась идеальной и несжимаемой, а эффект силы тяжести для горизонтально истекающей струи не учитывался. Действие сил поверхностного натяжения приводит к прогрессивному нарастанию случайного локального уменьшения диаметра струи относительно своего среднего значения $2a$, что сопровождается соответствующим вытеснением жидкости и образованием соседних утолщений струи. В результа-

те формируется регулярное чередование пережатий и разбуханий первоначально равновесной круглой цилиндрической конфигурации жидкого столба. Утонощённые участки, постепенно вытягиваясь в длину, разрываются с образованием мелких капелек, а утолщенные — превращаются в большие (основные) капли, разделенные одинаковыми промежутками. С позиций линейного анализа малых осесимметричных возмущений струи $\sim F(r) \cdot \exp(ikz + \omega t)$, $\lambda = 2\pi/k$ было показано [2], что максимальному темпу их нарастания отвечает длина волны $\lambda_* = 4,51 \times (2a)$.

Исходя из опытных наблюдений Савара [3], Плато [4] дал следующую оценку для длины волны начинающегося регулярного распада струи на капли: $\lambda_p = 4,38 \cdot (2a)$. Последнее хорошо согласуется с фоторегистрациями дальнейших экспериментов по распаду тонких струй слабо вязких жидкостей [5]. Наряду со средним расстоянием L между образующимися каплями, эти наблюдения фиксируют в среднем значение их диаметра $2R \leq 2 \cdot (2a)$.

В [6] была обоснована возможность построения теории распада тонких струй жидкости достаточной текучести. В настоящей работе полностью реализована эта попытка аналитического расчета самого процесса регулярного распада струи, позволившая определить величину $2R$ диаметра образующихся капель, которая количественно согласуется с известными экспериментальными наблюдениями [5], а также величину расстояний L между каплями, близкую к λ_p и λ_* . Поскольку своего наибольшего развития гидродинамическая неустойчивость столба истекающей жидкости будет достигать на его конце, рассмотрим процесс отрыва капли, образующейся на последнем из повторяющихся по длине струи циклов пережатия — разбухания, который заштрихован на Рис.1 (сплошными линиями схематически изображена равновесная конфигурация струи, а пунктиром — ее возмущенное состояние). Считая такой процесс регулярным, применим к этому контрольному объему уравнения баланса массы и энергии. Жидкость предполагается несжимаемой и невязкой, так что для небольших скоростей истечения, близкого к горизонтальному, главное внимание можно сосредоточить на действии сил поверхностного натяжения. На нелинейной стадии развития волнообразных осесимметричных отклонений поверхности струи от первоначальной цилиндрической в среднем формы следует ожидать появления разницы Δl в длине участков ее пережатия и разбухания (l). С точностью до мелких промежуточных капелек **К**, образующихся при разрыве перемычки, общая исходная масса последнего цикла струи пойдет на формирование основной отрывающейся капли диаметра $2R$, изображенной на Рис.2. После этого под влиянием поверхностного натяжения оставшийся конец струи **АВ** опять примет первоначально предполагаемую полусферическую форму. В результате баланс массы запишется в виде

$$(2l + \Delta l)\pi a^2 = (4/3)\pi R^3. \quad (1)$$

Энергия, приобретенная за счет суммарной работы сил поверхностного натяжения по пережатию струи на всем участке **ABCD**, будет затрачиваться на работу образования основной капли, т.е. ее разбухания от исходного диаметра $2a$ до окончательного — $2R$ за счет притока вытесненной жидкости. Локальное напряжение поверхностного натяжения $\sigma_r = \sigma/r$ на цилиндре радиуса r порождает для промежутка **BC** полного схлопывания (разрыва) перемычки струи (Рис.2) силу, постоянную в течение всего промежутка стягивания, так что величина соответствующей работы выразится $W_1 = 2\pi\sigma a(l + \Delta l)$. На участке **AB** окончания рассматриваемого цикла величина работы вытеснения жидкости выразится интегралом

$$W_2 = 2\pi\sigma \int_0^a \left(a - \sqrt{a^2 - x^2} \right) dx = 2\pi\sigma \left(1 - \frac{\pi}{4} \right) a^2.$$

На участке **CD** вытеснение жидкости будет происходить вплоть до поверхности формирующейся капли, так что величина соответствующей работы представляется аналогично

$$\begin{aligned} W_3 &= 2\pi\sigma \int_{-R}^{-\sqrt{R^2 - a^2}} \left(a - \sqrt{R^2 - x^2} \right) dx = \\ &= 2\pi\sigma \left\{ a \left(R - \sqrt{R^2 - a^2} \right) + \frac{1}{2} \left[a\sqrt{R^2 - a^2} - R^2 \left(\frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{1 - (a/R)^2} \right) \right] \right\}, \end{aligned}$$

если отсчет координаты x производить от центра капли. Локальное поверхностное напряжение на сфере $2\sigma_r$ приводит к следующей величине работы разрастания капли

$$W_4 = \int_a^R 2\sigma_r \cdot 4\pi r^2 dr = 4\pi\sigma(R^2 - a^2).$$

В результате обсуждаемый баланс энергии с точностью до осевой деформации капли запишется в виде $W_1 + W_2 + W_3 = W_4$. Исключая из последнего $b = l/R$ с помощью (1), получим уравнение для определения η :

$$f(\eta, \varepsilon) = 0; \quad q = 1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon + 1}; \quad \eta = \frac{a}{R}; \quad \varepsilon = \Delta l / 2l; \quad \mu = \sqrt{1 - \eta^2}; \quad (2)$$

$$f(\eta, \varepsilon) = \left(3 - \frac{\pi}{4} \right) \eta^3 + \eta^2 + \frac{\eta}{2} \left(\arcsin(\mu) - \eta \cdot \mu - 4 - \frac{\pi}{2} \right) + \frac{2}{3} q.$$

Так как экспериментальные наблюдения [2] свидетельствуют об относительной вытянутости ($\Delta l > 0$) участка пережатия струи, для параметра ε допустимы исключительно положительные значения $\varepsilon > 0$ ($q > 1$), т.е. $\varepsilon = 0$ ограничивает снизу возможное расположение кривой $\xi = f(\eta, \varepsilon)$ на плоскости (η, ξ) .

В последнем случае она принимает минимальное ($f_\eta = 0$, $f_{\eta\eta} > 0$) значение $\xi_m = f(\eta_*, 0) \cong -0,05$ при $\eta = \eta_* \cong 0,53$, так что условие $\xi > \xi_m$ остается справедливым для любого фиксированного $\varepsilon > 0$. Вследствие численной малости величины ξ_m сравнительно со значениями $\xi > 2/3$ на концах пригодного интервала $0 < \eta < 1$ изменения η , уравнение (2) имеет два близких корня, которые сливаются в $\eta = \eta_*$, когда минимум кривой $\xi = f(\eta, \varepsilon)$ в предельном случае $\varepsilon = \varepsilon_*$ попадает непосредственно на ось $\xi = 0$, и одновременное выполнение $f = f_\eta = 0$ определяет: $\eta = \eta_* \cong 0,53$, $\varepsilon_* \cong 0,081$ ($q = q_* \cong 1,075$).

Остается убедиться в том, что построенная на базе законов сохранения массы и энергии теория распада струи находится в согласии с законом сохранения импульса, который добавит третье уравнение для определения величин η, ε, l . Под действием сил поверхностного натяжения на участке пережатия струи (Рис.1) происходит выдавливание жидкости в формирующуюся каплю. Это сопровождается на участке выпучивания противодействием аналогичного эффекта со стороны образующейся капли. На цилиндрической части втяжения (Рис.2) с промежуточным радиусом r поверхностное напряжение дает на единицу длины струи постоянную силу $2\pi r(\sigma/r) = 2\pi\sigma$ и на весь участок силовое воздействие $2\pi\sigma(2l + \Delta l)$. Сюда добавляется силовой эффект на части сферы **AB**, в качестве упрощенной оценки которого используется среднее интегральное цилиндрическое представление сферы, что дает: $2\pi\sigma a$.

Этой совокупности противостоит поверхностное натяжение какого-то промежуточного состояния r' раздувающейся сферической капли перед ее отрывом: $4\pi(r')^2(2\sigma/r') = 8\pi\sigma r'$, где $a \leq r' \leq R$. Значит, вначале пока r' близко к a перетекающая из перетяжки жидкость ускоряется, а затем тормозится. Последняя линейная зависимость позволяет принять в качестве средней оценки для силового баланса значение $r' = (R + a)/2$. Тогда, отвлекаясь от деталей течения жидкости, в рамках развитого квазистатического подхода можно получить дополнительное соотношение в виде $2 + \eta = b(1 + 2\varepsilon)$, если использовать уравнение баланса массы (1). Исключение с его помощью величины q из (2) дает следующее уравнение:

$$\left(4 - \frac{\pi}{4}\right)\eta^3 + 3\eta^2 + \frac{1}{2}\eta\left(\arcsin\sqrt{1-\eta^2} - \eta\sqrt{1-\eta^2} - 4 - \frac{\pi}{2}\right) = 0,$$

решение которого полностью подтверждает найденное выше значение $\eta_* \approx 0,53$.

Если учесть эффект образования мелких промежуточных капелек при разрыве перемычки струи, то к правой части уравнения баланса массы (1) следует добавить величину их объема. Последнее повлечет за собой некоторое возрастание значения $q(\varepsilon)$ и соответственно общий подъем кривых $\xi = f(\eta, \varepsilon)$ над нижней границей $\xi_m < 0$. Поэтому преимуществом реализации будет обладать узкая окрестность параметра $\varepsilon \leq \varepsilon_*$ вблизи его предельного значения $\varepsilon = \varepsilon_*$ ($q = q_*$), которое может быть использовано в качестве оценки величины среднего размера образующихся капель. Тем более, что такое предельное значение по существу служит условием минимальной затраты энергии поверхностного натяжения на отрыв элемента массы с конца струи и образования сферической капли. Полученное в результате этого значение их диаметра $2R = 2a/\eta_* \cong 1,89 \times 2a$ хорошо согласуется с известными результатами экспериментальных регистраций для тонких струй слабо вязких жидкостей [5]. По найденным значениям η_* , ε_* из уравнения (1) определяется $b = b_* \cong 2,195$, позволяющее оценить среднее расстояние между основными каплями распадающейся струи:

$L = 2l + \Delta l = \frac{b_*}{\eta_*}(1 + \varepsilon_*) \times 2a \cong 4,48 \times 2a$. Последнее очень близко выше приведенной длине волны Рэлея λ_* [1,2] и хорошо согласуется с результатами экспериментов [5] и с оценкой λ_p , данной Плато [4].

2. К объяснению регулярного распада на пузырьки тонкой газовой струи, которая истекает внутри жидкости, Рэлей [7] подошел с аналогичных позиций линейной неустойчивости периодических возмущений вдоль круглой цилиндрической поверхности раздела жидкость-газ. Для длины волны максимальной неустойчивости было найдено значение $\lambda_* = 6,48 \times (2a)$.

Аналитическая теория для описания самого процесса распада струи и образования пузырьков газа построена ниже опять-таки на основе уравнений баланса массы и энергии применительно к объему волнообразного концевго цикла струи. Причем, на нелинейной стадии развития возмущений деформационный цикл утрачивает свою симметрию, так что аналогично случаю жидкости протяженность участка пережатия струи получает приращение $\Delta l > 0$ (Рис. 1). Осуществляется квазистатический подход, при котором главное внимание сосредоточено на действии сил поверхностного натяжения. Однако,

теперь в законах сохранения необходимо учесть эффект сжимаемости газа, который считается идеальным. В результате этого в уравнении (1) баланса массы справа добавится множитель $\beta = \rho_s / \rho_c$, где ρ_c — исходная плотность газа в струе перед отрывом пузырька и ρ_s — плотность в окончательно сформировавшемся сферическом пузырьке. Считая быстрый процесс отрыва пузырьков с конца струи адиабатическим, можно выразить этот множитель следующим образом: $\beta = (p_s / p_c)^{1/\gamma}$, $\gamma = C_p / C_v$ — отношение теплоемкостей в газе. При квазистатическом подходе давление в тонкой струйке p_c и в пузырьке p_s можно считать преимущественно формирующимся за счет действия сил поверхностного натяжения окружающей их жидкости, т.е. принять соответственно $p_s = 2\sigma / R$ и $p_c = \sigma / a$, или $\beta = (2\eta)^{1/\gamma}$.

В уравнении баланса энергии при вычислении работы разрастания пузырька W_4 следует добавить еще одно слагаемое, выражающее работу расширения газа: $\langle p \rangle \cdot \Delta V$. Формирование пузырька на конце цилиндрической струи происходит через промежуточное продолговатое тело цилиндрической формы, закругленное на его концах. Диаметр этого тела изменяется между $2a$ и $2R$, так что для оценки среднего давления в газе $\langle p \rangle$ за счет сил поверхностного натяжения примем равновесное состояние цилиндра среднего радиуса $(1/2)(a + R)$, т.е. $\langle p \rangle \approx 2\sigma / [R(1 + \eta)]$. Относительное изменение плотности газа выразится в виде: $\Delta V = (4/3)\pi R^3(1 - \eta^3)(\beta - 1)$. В результате окончательно получим уравнение с параметром ε типа (2), в котором функция $f(\eta, \varepsilon)$ будет иметь теперь следующий вид:

$$f(\eta, \varepsilon) = (3 - \pi/4)\eta^{3-1/\gamma} + \eta^{2-1/\gamma} + (1/2)\eta^{1-1/\gamma}[\arcsin(\mu) - \eta\mu - 4 - \pi/2] + \frac{4}{3}\eta \frac{1 - \eta^3}{1 + \eta} (\eta^{-1/\gamma} - 2^{1/\gamma}) + \frac{2}{3} 2^{1/\gamma} q. \quad (3)$$

Математический анализ этого уравнения $f = 0$ для случая двухатомного газа (например, воздуха): $\gamma = 1,4$ в области допустимого изменения параметра $\varepsilon > 0$ и искомой величины $0 < \eta < 1$ обнаруживает наличие двух близких корней. Функция $f(\eta, \varepsilon)$ при любом фиксированном ε имеет для $\eta = \eta_* = 0,46$ минимум, который даже при предельном значении $\varepsilon = 0$ является малым по величине: $-0,044$. При $\varepsilon = \varepsilon_* = 0,076$ оба корня уравнения $f = 0$ совпадают и равны η_* , так что в области $\varepsilon > \varepsilon_*$ решение отсутствует. Значит, параметр асимметрии ε заключен в узком диапазоне $0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_*$. Это позволяет принять $\eta = \eta_*$ и $\varepsilon = \varepsilon_*$ для получения средних оценок характерных величин изучаемого явления.

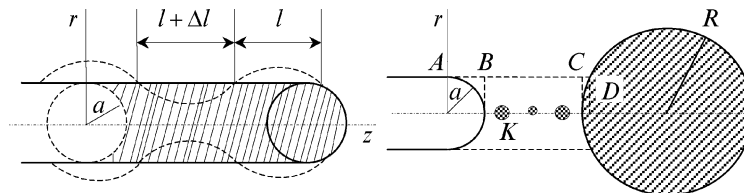


Рис. 1

Рис. 2

Для диаметра регулярно образующихся пузырьков находим

$$2R \approx 2,17 \times 2a, \text{ для расстояния между ними: } L = \frac{2}{3} \frac{(2\eta_*)^{1/\gamma}}{\eta_*^3} \approx 6,45 \times 2a.$$

Последнее хорошо согласуется с результатом Рэлея [7] для длины волны λ_* максимальной неустойчивости, полученным с позиций линейной теории возмущений.

Список литературы

1. Lord Rayleigh. On the Instability of jets // Proc.Lond.Math.Soc., 1879, v.10, p.4-10.
2. Стрэтт Дж.В. (Рэлей). Теория звука. Т. 2. — М.: ГИТТЛ, 1955. 455с.
3. Savart M. // Ann. de Chimie — 1883, v. 53. P. 337.
4. Plateau J. Statique experimentale et theorique des liquides soumis aux seules forces moliculaires. Paris. 1873.
5. Прандтль Л. Гидроаэромеханика. М.: ИИЛ, 1949. 520с.
6. Aslanov S. The theory of drops formation along disintegration of thin liquid jet // Journ. Aerosol Sc., 1999, v. 30, Suppl. 1. P. 333 — 334.
7. Lord Rayleigh. On the instability of cylindrical fluid surfaces // Phil. Mag., 1892, v. 34, p.177.

С. К. Асланов

Розв'язок задачі Рэлея про нестійкість тонких струменів рідини для стадії їх розпадання на окремі краплі

АНОТАЦІЯ

На основі рівнянь балансу маси та енергії побудована теорія для наближеного опису розпадання на краплі тонкого струменя рідини, що витікає з отвору. Головним фактором є дія сил поверхневого натягу. Здійснений математичний аналіз дозволив однозначно оцінити відносну величину серед-

нього діаметру краплинок, що утворюються, та відстаней між ними. Отримані результати добре погоджуються з відомими експериментальними спостереженнями та значенням довжини хвилі Релея з лінійної теорії нестійкості струменя. Аналогічним чином побудована теорія утворення бульбашок при розпаді газового струменя, що витікає у рідину. Урахування ефекту стисливості газу та адіабатичності процесу дозволяє отримати добре погодження з відповідним результатом Релея з лінійної теорії нестійкості.

S. K. Aslanov

**The decision of Rayleigh's problem on instability of thin liquid jets
for the stage of splitting into isolated drops**

SUMMARY

Theoretical approximate description of thin liquid jet splitting into drops during flowing out a hole on the basis of mass and energy balance equations is presented. Influence of surface tension has been considered as a main factor. Mathematical analysis has permitted to determine unambiguously ratio of forming drops medium value to distance between them. The results obtained are in good agreement with experimental data and Rayleigh's wavelength value. Theory of bubbles formation during gaseous jet splitting in liquid medium is constructed in a similar way. Taking into account gas compressibility and adiabatic character of the process has led to a better agreement with corresponding Rayleigh's results derived from linear instability theory.

А. В. Затовский, М. В. Левин, В. Лисы*

Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова, г. Одесса

** Университет П. Шафарика, г. Кошице (Словакия)*

Кинетика разбавленных полимеров с учетом вязкого последействия

Проведено обобщение уравнения Зимма для вектора положения звена полимера, учитывающее эффекты вязкого последействия. Построен тензор Озеена на основе нестационарного уравнения Навье-Стокса. После процедуры предварительного усреднения тензора получено немарковское уравнение для временной корреляционной функции компонент фурье-разложения положения звена цепи. Вязкое последействие существенно сказывается на дальневременной асимптотике корреляционной функции фурье-амплитуд фрагментов цепи — временная асимптотика имеет дробностепенной характер вместо традиционной экспоненциальной. Время релаксации и коэффициент диффузии макромолекулы как целого такие же, как и в модели Зимма.

При построении теории кинетических явлений разбавленных растворов полимеров во многих случаях исходят из представления о макромолекуле как наборе бусинок, связанных в цепь. Динамику такой полимерной молекулы моделируют броуновским движением бусинок. Анализ динамических свойств раствора полимеров в модели Зимма [1] основан на учете силы трения Стокса, действующей на бусинку, и возмущения поля скорости растворителя за счет движения соседних бусинок, так что гидродинамическое взаимодействие описывается тензором Озеена. Расчет этого тензора в модели Зимма проведен с использованием линеаризованных уравнений Навье-Стокса для стационарного движения растворителя. В приближении предварительного усреднения тензора Озеена в уравнении Зимма это приводит к экспоненциальной временной релаксации [1,2] корреляционных функций нормальных мод полимерной цепи, соответствующей Марковскому процессу броуновского блуждания [3]. В общем случае на каждую частицу модельной цепочки полимера действует сила, зависящая от относительной скорости частицы и растворителя во все предшествующие моменты времени (сила трения Бусине), а тензор Озеена следует использовать с учетом эффектов вязкого последействия. Для невзаимодействующих броуновских частиц влияние вязкого последействия приводит к существенно иной, алгебраической, а не экспоненциальной асимптотике временной корреляционной функции динамических переменных [4,6], отражающей коллективные свойства корреляционных функций молекул жидкости [7].

Нами проведено обобщение уравнения Зимма для радиуса-вектора положения произвольного звена полимера, учитывающее эффекты вязкого последствия. В первую очередь это относится к расчету тензора Озеена на основе нестационарного уравнения Навье-Стокса. После процедуры предварительного усреднения тензора получено немарковское уравнение для временной корреляционной функции компонент фурье-разложения положения звена цепи. Вязкое последствие существенно сказывается на дальнейшей асимптотике корреляционной функции фурье-амплитуд фрагментов полимерной цепи — временная асимптотика имеет дробнотепенной характер вместо традиционной экспоненциальной. Максимальное же время релаксации и коэффициент диффузии макромолекулы как целого такие же, как и в модели Зимма.

Уравнение броуновского движения n -го звена полимерной цепи имеет вид [1]

$$M \frac{d^2 \vec{x}_n}{dt^2} = -\xi \left(\frac{d\vec{x}_n}{dt} - \vec{v}(\vec{x}_n) \right) - \frac{\partial u}{\partial \vec{x}_n} + \vec{f}_n. \quad (1)$$

Здесь \vec{x}_n — вектор положения звена цепи (бусинки) массы M , первый член справа — сила трения Стокса для бусинки радиуса b с учетом увлечения полем скорости растворителя в точке нахождения этой бусинки за счет движения соседних звеньев полимерной цепи (гидродинамическое взаимодействие),

$$u = \frac{3k_B T}{2a^2} \sum_{n=2}^N (\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1})^2 \quad (2)$$

эффективный потенциал взаимодействия между звеньями средней длины a , \vec{f}_n — гауссова случайная сила с нулевым средним значением. В простейшем случае броуновское движение рассматривается как Марковский случайный процесс, так что $\xi = 6\pi b \eta$ (η — вязкость растворителя), и возбуждаемое бусинками течение стационарно. Учет вязкого последствия в несжимаемом растворителе приводит к интегро-дифференциальному уравнению Вольтера, и в представлении Фурье вместо ξ следует использовать известное выражение [4]

$$\xi^\omega = 6\pi b \eta \left[1 + \chi b + \frac{1}{9} (\chi b)^2 \right], \quad \chi = \sqrt{-i\omega/\nu}. \quad (3)$$

Здесь $\text{Re} \chi > 0$ и $\nu = \eta/\rho$ — кинематическая вязкость растворителя. Поскольку растворитель — несжимаемая вязкая жидкость, и возбуждаемое полимерной цепью течение медленное, то уравнения Навье-Стокса можно записать в линеаризованном виде

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -\nabla p + \eta \Delta \vec{v} + \vec{\phi}, \quad \text{div } \vec{v} = 0, \quad (4)$$

где p — давление и $\vec{\phi}$ — внешняя сила в расчете на единицу объема, действующая на растворитель вблизи \vec{x}_n . Внешней силой служит выражение [2,8]

$$\vec{\phi}(\vec{x}, t) = \sum_n \left(-\frac{\partial u}{\partial x_n} + \vec{f}_n \right) \delta(\vec{x} - \vec{x}_n). \quad (5)$$

В представлении Фурье по времени решение уравнений (4) легко находим в виде проекций на декартовы оси

$$v_{\alpha}^{\omega}(\vec{r}) = \int d\vec{r}' H_{\alpha\beta}^{\omega}(\vec{r} - \vec{r}') \phi_{\beta}^{\omega}(\vec{r}'). \quad (6)$$

Здесь введено Фурье-преобразование нестационарного тензора подвижности Озеена:

$$H_{\alpha\beta}^{\omega}(\vec{r}) = A \delta_{\alpha\beta} + B \frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r^2},$$

$$A = \frac{1}{8\pi\eta r} \left[e^{-y} - y \left(\frac{1-e^{-y}}{y} \right)' \right], \quad B = \frac{1}{8\pi\eta r} \left[e^{-y} + 3y \left(\frac{1-e^{-y}}{y} \right)' \right], \quad (7)$$

где $y = r\chi$ и штрихом обозначены производные по y . В частном случае $\omega = 0$

$$H_{\alpha\beta}^0(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi\eta r} \left(\delta_{\alpha\beta} + \frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r^2} \right)$$

и совпадает с результатом Зимма. Теперь можно записать решение задачи о возмущении поля скорости растворителя за счет движения полимерной цепи в виде

$$v_{\alpha}(\vec{x}, t) = \sum_n \int_{-\infty}^t dt' H_{\alpha\beta}(\vec{x} - \vec{x}_n, t - t') \left(-\frac{\partial u(t')}{\partial x_{n\beta}} + f_{n\beta}(t') \right). \quad (8)$$

Новое уравнение движения для n -го звена полимерной цепи в континуальном пределе по дискретной переменной запишем в такой же форме, как и в модели Зимма, но в представлении Фурье

$$-i\omega x_\alpha^\omega(n) = \int_0^N dm H_{\alpha\beta nm}^\omega \left[\frac{3k_B T}{a^2} \frac{\partial^2 x_\beta^\omega(m)}{\partial m^2} + f_\beta^\omega(n) \right]. \quad (9)$$

Здесь

$$H_{\alpha\beta nm}^\omega = \frac{\xi^\omega}{-i\omega M + \xi^\omega} H_{\alpha\beta}^\omega(x_n - x_m), \quad m \neq n,$$

$$H_{\alpha\beta nm}^\omega = \frac{1}{-i\omega M + \xi^\omega} \delta_{\alpha\beta}, \quad m = n. \quad (10)$$

За счет зависимости тензора Озеена от разности $\vec{x}_n - \vec{x}_m$ уравнение является нелинейным и аналитическое решение вряд ли возможно. Воспользуемся приближением предварительного усреднения, заменив выражения (10) средними по равновесной функции распределения. Если ограничиться состояниями, близкими к равновесию, то парная функция распределения имеет вид [8]

$$P(\vec{x}_n - \vec{x}_m) = \left(\frac{3}{2\pi a^2 |m-n|} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left\{ -\frac{3}{2a^2} \frac{(\vec{x}_n - \vec{x}_m)^2}{|m-n|} \right\},$$

так что

$$\begin{aligned} \langle H_{\alpha\beta}^\omega(x_m - x_n) \rangle_0 &= \\ &= \left(\frac{3}{2\pi a^2 |m-n|} \right)^{\frac{3}{2}} \int d\vec{r} \exp \left[-\frac{3}{2a^2} \frac{r^2}{|m-n|} \right] \left[A(r) \delta_{\alpha\beta} + B(r) \frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right] = \\ &= \frac{\delta_{\alpha\beta}}{6\pi\eta} \left\langle \frac{e^{-\chi r}}{r} \right\rangle_0. \end{aligned} \quad (11)$$

Будем искать решение уравнения (9) с учетом (11) в виде суперпозиции мод смещений (в виде ряда Фурье по переменной n)

$$x_n^\omega = y_0^\omega + 2 \sum_{p=1}^{\infty} y_p^\omega \cos \frac{\pi p n}{N}, \quad (12)$$

$$y_p^\omega = \frac{1}{N} \int_0^N dn \cos \frac{\pi p n}{N} x_n^\omega, \quad p=0, 1, 2, \dots \quad (12a)$$

Из (9) с учетом (11) имеем

$$-i\omega y_{p\alpha}^\omega = \sum_{q=0}^{\infty} h_{\alpha\beta pq}^\omega \left(-\frac{6\pi^2 k_B T q^2}{Na^2 M} y_{q\beta}^\omega + f_{q\beta}^\omega \right), \quad (13)$$

где

$$h_{\alpha\beta pq}^\omega = \frac{1}{N^2} \int_0^N dn \int_0^N dm \cos \frac{\pi pn}{N} \cos \frac{\pi qm}{N} \langle H_{\alpha\beta nm}^\omega \rangle_0 \quad (14)$$

и \vec{f}_q^ω определяется таким же, как и в (12а), преобразованием. Тензор Озеена после усреднения зависит лишь от разности $m-n$, и диагонален по декартовым индексам, т.е. $\sim \delta_{\alpha\beta}$. При больших значениях q матрица $h_{\alpha\beta pq}^\omega$ практически диагональна по индексам Фурье-преобразования, т.е. $\sim \delta_{pq}$, доказательство этого не отличается от случая $\omega = 0$ [2]. Если же p и q порядка единицы, то недиагональные элементы тоже малы по сравнению с диагональными. Поэтому главным членом матрицы (10) будет диагональный, так что после интегрирования получим

$$h_{\alpha\beta pq}^\omega = \frac{\delta_{\alpha\beta} \delta_{pq}}{\lambda_q^\omega}, \quad (q \neq 0),$$

$$\frac{1}{\lambda_q^\omega} = \frac{1}{\pi \eta a \sqrt{3\pi N q}} \frac{\xi^\omega}{-i\omega M + \xi^\omega} \frac{1 + \chi_q}{1 + (1 + \chi_q)^2}, \quad \chi_q = \sqrt{\frac{-i\omega N}{3\pi \nu q}} a. \quad (15)$$

Если в этом выражении пренебречь массой движущейся бусинки, положив $M=0$, и вязким последствием, то получим результат Зимма. При $q=0$ непосредственно из определения находим

$$\lambda_0^\omega = \sqrt{\frac{3\pi N}{32}} (-i\omega M + \xi^\omega). \quad (15a)$$

Таким образом, моды разложения положения элемента полимерной цепи ортогональны и связаны с действующей силой соотношением

$$y_{q\alpha}^\omega = \frac{f_{q\alpha}^\omega}{-i\omega \lambda_q^\omega + \gamma_q}, \quad \gamma_q = \frac{6\pi^2 k_B T}{Na^2} q^2. \quad (16)$$

Введем временные корреляционные функции нормальных мод

$$\Psi_q(t) = \langle \bar{y}_q(t) \bar{y}_q(0) \rangle, \quad (17)$$

где угловыми скобками обозначено статистическое усреднение по реализации случайных сил. Для спектральной плотности корреляционной функции нормальных мод

$$\Psi_q^\omega = \langle \bar{y}_q(t) \bar{y}_q(0) \rangle^\omega \quad (18)$$

с использованием флуктуационно-диссипативной теоремы [5] имеем

$$\Psi_q^\omega = \frac{k_B T}{\pi \omega} \operatorname{Im} \frac{1}{-i\omega \lambda_q^\omega + \gamma_q} = \operatorname{Re} \frac{k_B T}{\pi \gamma_q} \frac{\lambda_q^\omega}{-i\omega \lambda_q^\omega + \gamma_q}. \quad (19)$$

Это выражение с учетом зависимости λ_q^ω из (15) от частоты можно представить в виде правильной дроби, в числителе которой многочлен четвертой степени по $\sqrt{-i\omega}$, а в знаменателе — многочлен шестой степени. Пусть α_l — простые корни многочлена знаменателя. В этом случае после разложения на простейшие дроби будем иметь

$$\Psi_q^\omega = \operatorname{Re} \sum_{l=1}^6 \frac{A_l}{\sqrt{-i\omega} + \alpha_l} = \operatorname{Re} \sum_{l=1}^6 A_l \left(\frac{1}{\sqrt{-i\omega}} - \frac{\alpha_l}{\sqrt{-i\omega}(\sqrt{-i\omega} + \alpha_l)} \right). \quad (20)$$

Здесь A_l коэффициенты разложения, явный вид которых легко определяется, но выписывать их не будем. Пользуясь результатом (19) легко убедиться, что $\sum_l A_l = 0$. Возвращаясь в t -представление, находим

$$\Psi_q(t) = -\pi \operatorname{Re} \sum_{l=1}^6 A_l \alpha_l w(i\alpha_l \sqrt{t}), \quad (21)$$

где $w(z)$ — хорошо изученная на комплексной плоскости функция Крампа [9]. Отсюда сразу же следует

$$\Psi_q(t=0) = \frac{k_B T}{\gamma_q}.$$

Асимптотическое представление при больших по модулю значениях аргумента функции Крампа позволяет найти главный вклад дальневременной корреляционной функции нормальных мод

$$\Psi_q(t) \approx -\operatorname{Re} i \sum_{k=0} \Gamma\left(k + \frac{1}{2}\right) \sum_{l=1}^6 A_l \alpha_l \left(\frac{1}{i\alpha_l \sqrt{t}} \right)^{2k+1}. \quad (22)$$

Как и выше, используя явный вид спектральной плотности (19), находим

$$\sum_{l=1}^6 \frac{A_l}{\alpha_l^2} = 0,$$

и первый неисчезающий вклад является дробно-степенным, в отличие от традиционной экспоненты

$$\Psi_q(t) = -\operatorname{Re} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \sum_{l=1}^6 \frac{A_l}{\alpha_l^4} \left(\frac{1}{t}\right)^{5/2}. \quad (23)$$

Сумма по корням снова легко рассчитывается по явному виду спектра. Таким образом, вязкое последствие существенно влияет на временную зависимость корреляционных функций Фурье-амплитуд фрагментов полимерной цепи.

Так как $\vec{y}_0(t)$ — радиус-вектор центра масс полимерной цепи

$$\vec{y}_0(t) = \frac{1}{N} \int_0^N \vec{x}(t, n) dn,$$

то коэффициент диффузии центра масс цепи определяется соотношением

$$D_c = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6t} \langle [\vec{y}_0(t) - \vec{y}_0(0)]^2 \rangle.$$

С учетом (18) имеем [5]

$$D_c = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{3t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} (1 - \cos \omega t) \Psi_{q=0}^{\omega}.$$

Интегрирование с функцией (15a) после предельного перехода приводит к результату

$$D_c = \frac{8k_B T}{3\eta \sqrt{6\pi^3 N a}},$$

что совпадает с выражением для коэффициента диффузии полимерного клубка в модели Зимма. Наконец, время релаксации q — той моды в нашем подходе можно определить в виде интеграла

$$\tau_q = \int_0^{\infty} \Psi_q(t) dt = \frac{(a\sqrt{N})^3 \eta}{k_B T q \sqrt{3\pi q}},$$

и тоже совпадает с результатом, опирающимся на модель Зимма [1,2].

Литература

1. Doi M., Edwards S.F. The theory of polymer dynamics. Oxford: Clarendon Press, 1986. 460 p.
2. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Статистическая физика макромолекул. М.: Наука, 1989. 342 с.
3. Chandrasechar S. Stochastic problems in physics and astronomy// Rev. Mod. Phys. 1943. V.15. P. 1-89.
4. Владимирский В., Терлецкий Я. Гидродинамическая теория поступательного броуновского движения // ЖЭТФ. 1945. Т.15. С. 258-264.
5. Гитерман М.Ш., Герценштейн М.Е. К теории броуновского движения и возможности его использования для исследования критического состояния вещества// ЖЭТФ. 1966. Т.50. С. 1084-1095.
6. Затовский А.В. К теории вращательного броуновского движения// Известия ВУЗов.Физика.1969. В.10. С.13-17.
7. Фишер И.З., Затовский А.В., Маломуж Н.П. Гидродинамическая асимптотика корреляционных функций вращательного движения молекул в жидкости// ЖЭТФ. 1973. Т.65. С. 297-306.
8. Akcasu A.Z., Benmouna V., Han C.C. Interpretation of dynamic scattering from polymer solutions// Polymer. 1980. V.21. P. 866-890.
9. Карпов К.А. Таблицы функций $w(z)$ в комплексной области. М.: АН СССР, 1954.

О. В. Затовський, М. В. Левін, В. Ліси

Кінетика розбавлених полімерів з врахуванням в'язкої післядії

АНОТАЦІЯ

Проведено узагальнення рівняння Зімма для вектора положення ланки полімера з врахуванням в'язкої післядії. Побудовано тензор Озеена на основі нестационарного рівняння Нав'є-Стокса. Одержано немарківське рівняння для часової кореляційної функції компонент фур'є-розкладу положення ланки ланцюга. Показано, що в'язка післядія суттєво впливає на далекочасову асимптотику кореляційної функції фур'є-амплітуди фрагментів ланки — часова асимптотика має дрібностепеневий характер замість традиційно експоненціальної. Час релаксації і коефіцієнт дифузії макромолекули як цілого такі ж, як і в моделі Зімма.

Zatovsky A.V., Levin M.V., Lisy V.

Dilute polymer kinetics with the viscous aftereffect

SUMMARY

The generalization of Zimm equation for a polymer link position vector is conducted of taking into account the viscous aftereffect. Oseen tensor is constructed on the basis of non stationary Navier-Stockes equation. Nonmarkov equation for the time correlation function of the Fourier components of the polymer link position is obtained. The viscous aftereffect essentially tells upon the long-time asymptotic — it becomes the fractional-power function instead of traditionally exponential one. Molecular relaxation time and diffusion coefficient rest as such as at Zimm model.

В. Ф. Гетманец¹, В. М. Заславский², А. П. Федчук³, Е. М. Барняк⁴

¹ Физико-технический институт низких температур, г. Харьков,

² Одесская государственная академия пищевых технологий, г. Одесса,

³ Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова, г. Одесса,

⁴ Одесский государственный медицинский университет, г. Одесса

Режимы течения жидкой двуокиси углерода в капилляре при фазовых переходах

Исследован механизм возникновения и распространения капиллярного канала в монолитном блоке двуокиси углерода. Получены результаты по изменению геометрии канала и расхода жидкости со временем при фазовом переходе.

Введение

Известно, что работа сублимационных систем зависит от вещества, которое позволяет термостатировать объекты от долей ватта до нескольких десятков ватт. Установлена взаимосвязь от имеющихся неоднородностей в твёрдом хладагенте и теплопроводностью блока при изменении подводимых к сублимационной системе тепловых нагрузках. Выработанные ранее физические представления таковы, что зарождающиеся капиллярные каналы в твёрдом блоке CO_2 , приводят к перетеканию жидкости из области кристаллизации в область сублимации. По мере движения жидкости в капилляре цилиндрической формы, проходят процессы плавления, кристаллизации, сублимации. Необходимость изучения режимов течения жидкой CO_2 в канале, сопровождающиеся фазовыми переходами очевидна.

В данной работе рассматривается влияние режимов течения жидкости на процессы намораживания CO_2 в каналах цилиндрической формы. Для подтверждения указанных физических представлений рассмотрим фазу намораживания жидкости на стенках капиллярного канала.

При рассмотрении течения жидкости в цилиндрическом канале радиуса R_o , на стенках происходит намораживание жидкости в виде твердой монолитной фазы. Толщина намораживаемого слоя равна $R_o - R(x)$, где $R(x)$ — уравнение поверхности раздела фаз в цилиндрической системе координат. Уравнение поверхности $R(x)$ определяется из условия Стефана на подвижной границе раздела при $r = R(\tau, x)$:

$$\rho_T \cdot r_s \cdot \frac{\partial R}{\partial \tau} = \alpha_T \cdot (T_{жс} - T_s) + \lambda_T \cdot \left(\frac{\partial T_T}{\partial r} \right)_R, \quad (1)$$

где ρ_T — плотность намораживаемой твердой фазы; r_3 — удельная теплота кристаллизации жидкости; τ — текущее время; α_T — коэффициент теплоотдачи; $T_{жс}$ — температура жидкости в ядре потока; T_3 — температура замерзания; λ_T — коэффициент теплопроводности твердой фазы; $T_T = T_T(x, r)$ — температура намороженного слоя. Предполагается, что все теплофизические характеристики $\rho_T, r_3, \alpha_T, \lambda_T$ — являются постоянными величинами, определяемые при среднем значении температуры. Распределение температуры намороженного слоя описывается уравнением теплопроводности:

$$\frac{\partial^2 T_T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial T_T}{\partial r} = 0, \quad (2)$$

причем на поверхности раздела $T_T = T_3$ при $r = R(\tau, x)$. При решении уравнения (2) получим

$$T_T = a(x) \cdot \ln r + b, \quad (3)$$

где $a(x) = \frac{(T_c - T_3) \cdot x}{(\ln R_o - \ln R) \cdot \xi}$, $b(x) = T_3 - a \cdot \ln R(x)$. Здесь температура $T_T = T_T(\tau, r, x)$ определялась в квазистационарном приближении. Учитывая соотношение (3) уравнение (1) представляется следующим образом:

$$\rho_T \cdot r_3 \cdot \frac{\partial R}{\partial \tau} = \alpha_T \cdot (T_{жс} - T_3) + \lambda_T \cdot \frac{\dot{a}(x, R)}{R} \quad (4)$$

Данное уравнение относительно $R = R(\tau, x)$ следует решать, учитывая начальные условия при $\tau = 0$:

$$R = R_o, \quad T_{жс} = T_{жс}(x, r) \quad (5)$$

Температуру жидкости в канале определяется с помощью уравнения теплового баланса. Рассмотрим элементарный объём жидкости, движущейся в капиллярном канале (рис.1). Изменение количества тепла этого объёма равно $dQ = c_p \cdot G \cdot \Delta T_{жс}$, где c_p — теплоёмкость жидкости; $G(x)$ — расход жидкости. С другой стороны изменение количества тепла определяется полным тепловым потоком на границе канала, формируемым за счёт теплоотдачи и

теплоты кристаллизации $dQ = \left(-\alpha \cdot (T_{жс} - T_3) + r_D \cdot \rho_T \cdot \frac{\partial R}{\partial \tau} \right) \cdot \Delta S$, где

$\Delta S = 2 \cdot \pi \cdot R \cdot \Delta x$ — боковая поверхность элементарного объёма. В результате получим выражение вида

$$c_p \cdot G(x) \cdot \frac{dT_{жс}}{dx} = 2 \cdot \pi \cdot R \cdot \left(-\alpha \cdot (T_{жс} - T_3) + r_D \cdot \rho_T \cdot \frac{dR}{dt} \right). \text{ После преобразо-}$$

вания $\frac{dT_{жс}}{dx} = \frac{2 \cdot \pi \cdot \lambda_T}{c_p \cdot G(x)} \cdot a(x, R)$. Данное уравнение решается при условии, что на входе при $x=0$

$$T_{жс} = T_{жс}^0 \quad (6)$$

Расход жидкости, текущей в сужающемся канале, определяется из уравнения движения. Выделим объём жидкости малой длины dx , ограниченный входным S_1 и выходным S_2 сечениями (рис.2). Применим для рассматриваемого объёма жидкости теорему о движении центра масс: $\sum F^e$, где $M\bar{a}_c = \bar{R}^e$. Так как движение жидкости равномерное, то ускорение центра масс выделенного объёма равно нулю $a_c = 0$, следовательно, сумма проекций всех внешних сил, приложенных к указанному объёму, на ось x капиллярного канала должна быть равна нулю. Такими внешними силами являются:

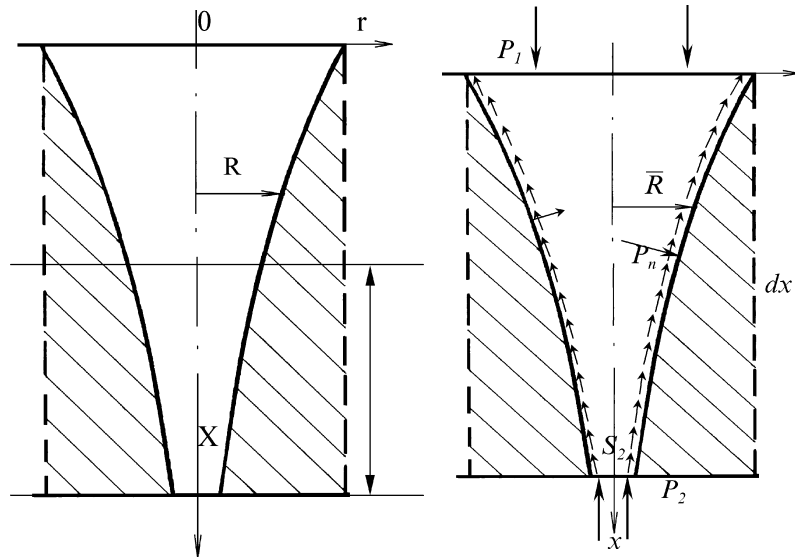


Рис. 1. Схема течения жидкости в канале

Рис. 2. Объём жидкости, ограниченный входным S_1 и выходным S_2 сечениями малой длины x

- силы давления P_1 и P_2 в сечениях S_1 и S_2 , нормальные к этим сечениям (при этом $P_1 = p_1 \cdot S$ и $P_2 = p_2 \cdot S$);
- силы тяжести (вес рассматриваемого объёма $G = \rho \cdot g \cdot dx \cdot S_{cp}$);

– силы реакции стенок сужающегося канала капилляра \bar{R} , причем эту силу можно разложить на составляющие вдоль канала и нормальную реакцию: $\bar{R} = \bar{T} + \bar{P}_n$, где \bar{T} – сила сопротивления; \bar{P}_n – равна гидродинамической силе давления на стенку канала со стороны жидкости.

Так как длина рассматриваемого объема dx мала, то сужением канала можно пренебречь. Сила сопротивления T направлена по оси канала x в сторону, обратную течению. Она равна $T = \tau \cdot P_s \cdot dx$, где τ – касательное напряжение (сила трения, приходящаяся на единицу поверхности); P_s – периметр смоченного канала. В результате преобразований уравнение движения жидкости примет вид:

$$-\frac{dp}{dx} - \frac{2p}{R} \cdot \frac{dR}{dx} + \rho \cdot g - \frac{2 \cdot \tau}{R} = 0 \quad (7)$$

где $\tau = \lambda_{mp} \cdot \frac{V^2}{8} \cdot \rho$, V – скорость движения жидкости, а λ при ламинарном

течении $\lambda_{mp} = \frac{64}{Re}$. Тогда $\tau = \frac{4 \cdot V \cdot \mu}{R}$. При турбулентном течении коэффициент сопротивления λ определяется формулой Блазиуса

$\lambda_{mp} = 0,33 \cdot Re^{-0,25}$, где $Re = \frac{2 \cdot R_0 \cdot V_{жс}}{v_{жс}}$ – число Рейнольдса. Тогда напря-

жение трения $\tau = \lambda \cdot \frac{V_{жс}^2}{8} \cdot \rho_{жс} = 0,033 \cdot \frac{v_{жс}^{0,25} \cdot \rho_{жс} \cdot V_{жс}^{1,75}}{R_0^{0,25}}$. Так как

$V_{жс} = \frac{G}{\pi \cdot R^2 \cdot \rho_{жс}}$, то $\tau = 0,0045 \cdot \frac{v_{жс}^{0,25} \cdot G^{1,75}}{\rho_{жс}^{0,75} \cdot R_0^{3,75}}$, где G – расход жидкости. При ламинарном режиме течения ($Re < 2 \cdot 10^3$) уравнение движения имеет вид:

$$-\frac{dP}{dx} - \frac{2p_{cp}}{R} \cdot \frac{dR}{dx} + \rho \cdot g - \frac{8 \cdot \mu \cdot V_{жс}}{R^2} = 0 \text{ или}$$

$$G = \frac{\pi \cdot R^4}{8 \cdot v} \cdot \left[\frac{\Delta P}{\xi} - \frac{P_1 + P_2}{R} \cdot \frac{dR}{dx} + \rho \cdot g \right] \quad (8)$$

где $\Delta P = P_1 - P_2$. При турбулентном течении ($Re > 2 \cdot 10^3$)

$$-\frac{dp}{dx} - \frac{2 \cdot p_{cp}}{R} \cdot \frac{dR}{dx} + \rho \cdot g - 0,009 \cdot \frac{v_{жс}^{0,25} \cdot G^{1,75}}{\rho_{жс}^{0,75} \cdot R^{4,75}} = 0 \quad (9)$$

откуда $G = 14,8 \cdot R^2 \cdot \sqrt[7]{\frac{\rho_{жс}^3 \cdot R^5}{\nu_{жс}} \left[\frac{\Delta P}{\xi} - \frac{P_1 + P_2}{R} \cdot \frac{dR}{dx} + \rho \cdot g \right]^4}$. В результате

подвижная граница намораживаемого слоя, распределение температуры и расхода жидкости при течении по капиллярному каналу определяется соответственно задачами (4), (5); (6), (7) и выражениями (8) или (9). Для того чтобы оценить вклад каждого из слагаемых в уравнения (4), (6), (8) и (9), приведем эти уравнения к безразмерному виду, введя следующие безразмерные величины:

$$\bar{R} = \frac{R}{R_0}, \quad \bar{x} = \frac{x}{\xi}, \quad \bar{P} = \frac{P}{P_0}, \quad \bar{\tau} = \frac{\tau}{\tau_0}, \quad \bar{G} = \frac{G}{G_0}, \quad \bar{T}_{жс} = \frac{T_{жс} - T_3}{T_\rho - T_3}.$$

Тогда уравнение (4) приобретает вид

$$\frac{\partial \bar{R}}{\partial \bar{\tau}} = -B_i \cdot \bar{T}_{жс} + \frac{\bar{x}}{\bar{R} \cdot \ln \bar{R}} \quad (10)$$

где B_i — число Био, определенное следующим образом:

$$B_i = \frac{\alpha_T \cdot R_0}{\lambda_T} \quad (11)$$

и $\tau_0 = \frac{\rho_T \cdot r_D \cdot R_0^2}{\lambda_T \cdot (T_3 - T_\rho)}$. Уравнение конвективного теплообмена (6) записывается как $\bar{G} \cdot \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{x}} = S_0 \cdot \frac{\bar{x}}{\ln \bar{R}}$, где $S_0 = \frac{2 \cdot \pi \cdot \lambda_T \cdot \xi}{c_p \cdot G_0}$, $G_0 = \frac{\pi \cdot R_0^4 \cdot p_1}{8 \cdot \nu \cdot \xi}$, а уравнение (8) для ламинарного режима течения примет следующий вид:

$$\bar{G} = R^{-4} \cdot \left(1 - \frac{1}{R} \cdot \frac{d\bar{R}}{d\bar{x}} + \frac{\rho \cdot g \cdot \xi}{p_1} \right).$$

Формула Пуазейля для расхода жидкости в круглой трубе для турбулентного режима течения жидкости примет вид:

$$\bar{G} = R^{-2} \cdot \sqrt[7]{R^{-5} \cdot \left[1 - \frac{1}{R} \cdot \frac{d\bar{R}}{d\bar{x}} + \frac{\rho \cdot g \cdot \xi}{p_1} \right]^4}, \quad G_0 = 14,8 \cdot R_0^2 \cdot \sqrt[7]{\frac{R_0^5 \cdot \rho_{жс}^3 \cdot p_1^4}{\nu_{жс} \cdot \xi^4}} \quad (12)$$

Для того, чтобы оценить значения безразмерных комплексов Nu , τ_ρ , S_0 и G_0 были проведены их расчёты при заданных теплофизических, геометрических данных для условий проводимых экспериментальных исследований. В предположении ламинарного характера течения жидкости в канале получим: $G_0 = 4,9 \cdot 10^{-5}$ кг/с. Число Рейнольдса соответственно равно $Re = 8,7 \cdot 10^3$, что соответствует турбулентному характеру течения. Поэтому по формуле (12) уточним $G_0 = 2,7 \cdot 10^{-5}$ кг/с и $Re = 4,8 \cdot 10^3$. Таким образом, для начальной стадии фазы намораживания, когда расход жидкости через капиллярный канал имеет

наибольшее значение, режим течения жидкости носит турбулентный характер. В дальнейшем с развитием фазы намораживания при сужении канала расход жидкости убывает и на завершающей стадии рассматриваемой фазы характер течения становится ламинарным (рис.3).

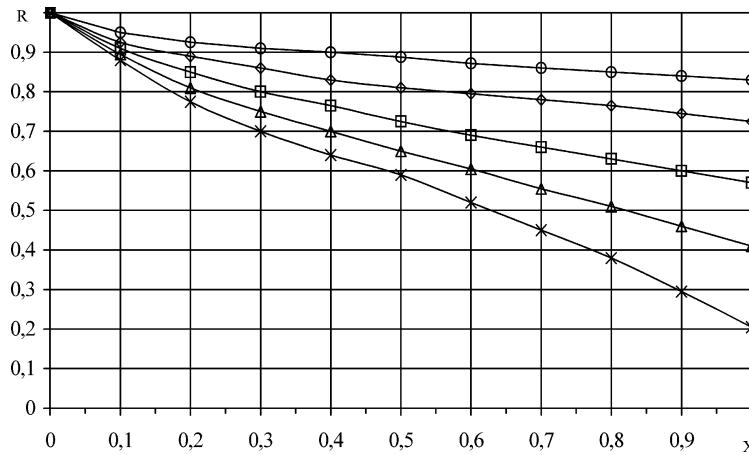


Рис. 3. Зависимость $R(\tau, x)$ от координаты x при различных значениях времени τ (\circ — 0,1; \diamond — 0,25; \square — 0,5; Δ — 0,75; \times — 0,95)

Число Нуссельта, учитывая формулу Михеева, соответственно равно:
 $Nu = \frac{\alpha_T \cdot R_0}{\lambda_{жс}} = 0,021 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^{0,43}$, тогда $B_i = Nu \cdot \frac{\lambda_{жс}}{\lambda_T} = 0,128$. Кроме того, для фазы намораживания температура жидкой фазы $T_{жс}$ мало отличается от криоскопической $\left(\left| \frac{T_{жс} - T_з}{T_\rho - T_з} \right| < 1 \right)$. На этом основании первым слагаемым уравнения (10) можно пренебречь, так как $B_i \cdot \bar{T}_{жс} \ll 1$ ($\bar{R} = \bar{R}(\tau, x)$). Поэтому уравнение раздела фаз при намораживании жидкости на стенке канала можно получить из решения дифференциальной задачи:

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{R}}{\partial \tau} = \frac{\bar{x}}{\bar{R} \cdot \ln \bar{R}} \\ \text{при } \tau = 0 \bar{R} = 1 \end{cases} \quad (13)$$

Поскольку $\bar{R} < 1$, то $\frac{\partial \bar{R}}{\partial \tau} < 0$, т.е. с течением времени радиус канала уменьшается и происходит намораживание твердой фазы на стенках капил-

лярного канала. Решение задачи (13) представляется следующей зависимостью: $\bar{R}^3 \cdot \left(\frac{1}{3} - \ln R \right) = \frac{1}{3} - 3\bar{x} \cdot \bar{\tau}$. Из данного соотношения следует, что закупорка канала при $\bar{x} = 1$ и $\bar{R} = 0$ происходит за время $\bar{\tau}_* = \frac{1}{9}$, или $\tau_* = \frac{\tau_o}{9}$.

Введем обозначение $\tau_1 = \frac{\bar{\tau}}{\bar{\tau}_*} = 9 \cdot \bar{\tau}$. Тогда $R^{-3} \cdot (1 - \ln R^{-3}) = 1 - \bar{x} \cdot \tau_1$. При расчетном исследовании были получены значения безразмерного радиуса канала вниз по потоку жидкости $R(\tau, x)$ от \bar{x} при разных значениях τ , представленные на рис. 3. Как показывает численный анализ уравнения (10) при увеличении $B_i \cdot \bar{T}_{жс}$ время закупорки капилляра τ_* возрастает, т.е. значение τ_* , определяемое соотношениями (11) и (13) является характерным только для завершающей стадии намораживания, когда средняя температура жидкости мало отличается от температуры кристаллизации.

Расход жидкости в сужающемся канале капилляра для ламинарного и турбулентного режимов течения определяется следующими соотношениями:

$$\bar{G}_\lambda = \bar{R}^4 \cdot \left(1 - \frac{1}{R} \cdot \frac{d\bar{R}}{dx} \right), \quad \bar{G}_T = \bar{R}^2 \cdot \sqrt{\bar{R}^5 \cdot \left[1 - \frac{1}{R} \cdot \frac{d\bar{R}}{dx} \right]^4}.$$

При этом учтено, что силами тяжести можно пренебречь в сравнении с силами давления $\left(\frac{\rho \cdot g \cdot \xi}{p_1} \ll 1 \right)$. Чтобы определить значение производной $\frac{d\bar{R}}{dx}$ при расчете расхода жидкой фазы $\bar{G} = \bar{G}(\tau, x)$, проводится аппроксимация функции $\bar{R} = \bar{R}(\tau, x)$:

$$\bar{R}(x) = a + b \cdot x^2 + c \cdot \exp(x) + d \cdot x^{0,5} \text{ при } \tau_1 = 0,25. \text{ Тогда}$$

$$\frac{d\bar{R}}{dx} = 2 \cdot b \cdot x + c \cdot \exp(x) + 0,5 \cdot d \cdot x^{-0,5};$$

$$\bar{R}(x) = a + b \cdot \exp(x) + c \cdot x^{0,5} + d \cdot \exp(-x) \text{ при } \tau_1 = 0,5. \text{ Тогда}$$

$$\frac{d\bar{R}}{dx} = b \cdot \exp(x) + 0,5 \cdot c \cdot x^{-0,5} - d \cdot \exp(-x);$$

$$\bar{R}(x) = a + b \cdot x^{1,5} + c \cdot \exp(x) + d \cdot x^{0,5} \text{ при } \tau_1 = 0,75. \text{ Тогда}$$

$$\frac{d\bar{R}}{dx} = 1,5 \cdot b \cdot x^{0,5} + c \cdot \exp(x) + 0,5 \cdot d \cdot x^{-0,5};$$

$$\bar{R}(x) = a + b \cdot x^{1,5} + c \cdot \exp(2,5) + d \cdot \exp(-x) \text{ при } \tau_i = 0,95. \text{ Тогда}$$

$$\frac{d\bar{R}}{dx} = 1,5 \cdot b \cdot x^{0,5} + 2,5 \cdot c \cdot x^{1,5} - d \cdot \exp(-x).$$

Определим расход жидкости, воспользовавшись ранее полученными соотношениями при условии, что $x=0, G_1=1, G_2=1$. В этом случае значения рас-

ходов G_1 и G_2 могут быть описаны зависимостями: $G_1 = R^4 \cdot \left(1 - \frac{1}{R} \cdot \frac{dR}{dx}\right)$ и

$$G_2 = R^2 \cdot \sqrt[7]{R^5 \cdot \left(1 - \frac{1}{R} \cdot \frac{dR}{dx}\right)^4} = R^{15/7} \cdot G_1^{4/7}.$$

Так как $\bar{G}_i = \frac{G_i}{G_0}$, то $G_1 = \bar{G}_1 \cdot G_0^t$ и $G_2 = \bar{G}_2 \cdot G_0^t$ (\bar{G}_1 и \bar{G}_2 — безразмерные расходы углекислоты).

На рис.4 приведён график $\bar{G} = \bar{G}(x)$ при различных значениях τ , построенный по результатам расчётов.

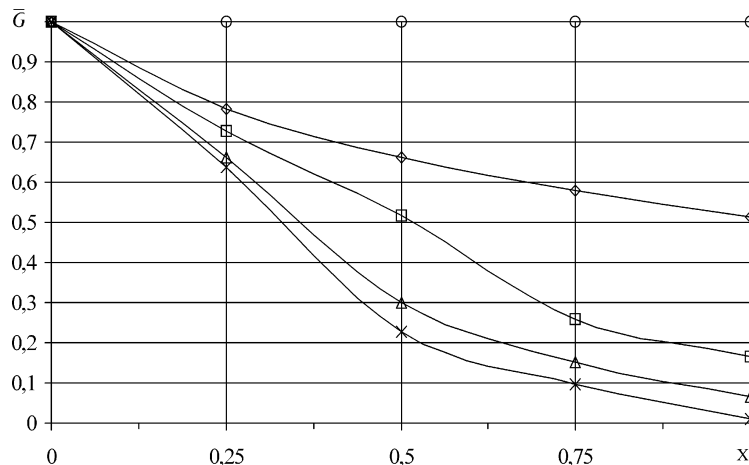


Рис. 4. Зависимость \bar{G} от координаты x при различных значениях времени τ (O — 0,1; ◇ — 0,25; □ — 0,5; Δ — 0,75; X — 0,95)

Выводы

Таким образом, можно сделать следующие выводы:

1. Рассмотрен механизм возникновения и распространения капиллярного канала в монолитном блоке твердой двуокиси углерода, по результатам

- чего принята геометрия капилляра (вершина конуса расположена в области сублимации).
2. Рассмотрены процессы намораживания жидкости в капиллярном канале и определено характерное время его закупорки τ_* .
 3. Рассмотрены режимы течения и установлена их зависимость от геометрических параметров капилляра.

Литература

1. Веркин Б.И., Гетманец В.Ф., Михальченко Р.С. Теплофизика низкотемпературного сублимационного охлаждения. — Киев: Наукова думка, 1980. — 232 с.
2. Михальченко Р.С., Гетманец В.Ф., Архипов В.Т. Особенности теплообмена в пористом твёрдом азоте // Инж.-физ. журн. — 1972. — Т.23, №3 — с.393-400.
3. Чумак И.Г., Гетманец В.Ф., Заславский В.М., Федчук А.П., Барняк Е.М. Экспериментальные исследования пористости двуокиси углерода лазерным рассеиванием // Холодильная техника и технология. — 1999. №4, с.30-34.
4. Карповский Е.Я., Гетманец В.Ф., Заславский В.М., Федчук А.П., Барняк Е.М. Расчёт эффективной теплопроводности твёрдой двуокиси углерода // Физика аэродисперсных систем. — 1998. — № 37. — С.108-113.

В. Ф. Гетманец, В. М. Заславский, О. П. Федчук, Е. М. Барняк

Режими течії рідкого двоокису вуглецю в капілярі при фазових переходах

АНОТАЦІЯ

Досліджено механізм виникнення і розповсюдження капілярного каналу у монолітному блоці двоокису вуглецю. Отримані результати по зміні геометрії каналу та розходу рідини з часом при фазовому переході.

Getmanec V. F., Zaslavskiy V. M., Fedtchouk O. P., Barnyak E. M.

The regimes of liquid carbon dioxide flows through capillar in processes of phase transitions

SUMMARY

The mechanism of origin and distribution of the capillary channel in the monolithic block of carbon dioxide was explored. The results on change geometry of the channel and rate of flow were obtained in due course at phase transition.

А. В. Кирилюк, А. В. Затовский

Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова, г. Одесса

О влиянии однородного электрического поля на спектр мессбауэровского поглощения броуновскими частицами с осевой симметрией

Рассмотрено влияние внешнего однородного электрического поля на ориентационное движение броуновских частиц и на спектры мессбауэровского поглощения. Найдено сечение резонансного поглощения гамма — квантов без отдачи атомами, вкрапленными в броуновские частицы. Вычислена эффективная ширина линии Мессбауэра и найдена ее зависимость от значения внешнего электрического поля.

Во многих работах резонансное поглощение γ — квантов без отдачи успешно применялось при исследовании диффузии броуновских частиц, макромолекул и атомов в жидкости, содержащих мессбауэровские ядра. Эти ядра могут являться или составной частью исследуемой жидкой системы, или же вкраплены в примеси. Связь между сечением резонансного поглощения γ — квантов ядрами в броуновских частицах с динамикой броуновского движения в жидкости исследовалась в работах [1-6]. Броуновское вращение сферических и эллипсоидальных частиц наряду с их поступательным движением учитывалось в работах [3-6].

В настоящей работе наряду с поступательным броуновским движением частиц учитывается их вращательное броуновское движение на основе модели диффузии эллипсоидальных частиц в пространстве углов Эйлера во внешнем электрическом поле. Рассматриваются лишь большие броуновские частицы, которые за время жизни мессбауэровского ядра в возбужденном состоянии поворачиваются в среднем на малый угол. Основным результатом работы являются соотношения, связывающие наблюдаемый спектр гамма — резонансного поглощения с кинетическими свойствами броуновских частиц и положением активного ядра внутри этих частиц.

Сечение резонансного поглощения γ — квантов с импульсом $\hbar\vec{k}$ броуновскими частицами определяется автокорреляционной функцией Ван — Хофа, дающей полную информацию о динамике атомов поглощающей системы

$$\sigma(s) = \frac{\sigma_0\Gamma}{2\hbar} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} dt \exp\left[-i\frac{st}{\hbar} - \frac{\Gamma t}{\hbar}\right] G_s(\vec{k}, t). \quad (1)$$

Здесь σ_0 — сечение в резонансе, $s = vE_0/c$ — доплеровский сдвиг, v — скорость относительного движения источника и поглотителя γ — лучей, c — скорость света, E_0 и Γ — энергия и естественная ширина резонансного уровня, $G_s(\vec{k}, t)$ — фурье — образ функции Ван-Хова

$$G_s(\vec{k}, t) = \left\langle \exp[-i\vec{k}\vec{X}(0)] \exp[i\vec{k}\vec{X}(t)] \right\rangle, \quad (2)$$

где угловые скобки означают статистическое и квантовомеханическое усреднение, \vec{X} — координата мессбауэровского ядра.

Движение мессбауэровского ядра, входящего в состав взвешенной в жидкости броуновской частицы, представим в виде суммы движения центра масс частицы и поворотного движения ядра вместе с частицей вокруг центра масс. Для описания поступательного и вращательного движения броуновской частицы введем систему координат x, y, z с началом в центре масс броуновской частицы и осями $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$, которые параллельны осям лабораторной системы координат. Тогда радиус — вектор мессбауэровского ядра, вкрапленного в броуновскую частицу, равен

$$\vec{X} = \vec{R} + \vec{r} + \vec{u},$$

где \vec{R} — координата центра масс броуновской частицы в неподвижной системе отсчета, \vec{r} — радиус — вектор равновесного положения ядра в частице относительно осей x, y, z , \vec{u} — вектор отклонения ядра из положения равновесия.

Как и в [3,5], вращательное броуновское движение будем рассматривать независимо от поступательного броуновского движения. Тогда фурье — образ функции Ван — Хова (2) можно записать в виде

$$G_s(\vec{k}, t) = \left\langle \exp[-i\vec{k}\vec{R}(0)] \exp[i\vec{k}\vec{R}(t)] \right\rangle \left\langle \exp[-i\vec{k}\vec{r}(0)] \exp[i\vec{k}\vec{r}(t)] \right\rangle \cdot \left\langle \exp[-i\vec{k}\vec{u}(0)] \exp[i\vec{k}\vec{u}(t)] \right\rangle. \quad (3)$$

Сечение резонансного поглощения вычислим при помощи классических вероятностей перехода, которые являются решениями уравнений поступательной и вращательной диффузии броуновской частицы. При этом достаточно выяснить вид корреляционных функций для промежутков времени $t \approx \tau_0 = \hbar/\Gamma$, так как подынтегральная функция (1) существенно отлична от нуля только при $t \leq \tau_0$. Оценки показывают [6], что среднеквадратичный угол поворота частицы вокруг любой ее оси за время τ_0 жизни мессбауэровского ядра в возбужденном состоянии много меньше радиана

$$\left(\overline{\varepsilon^2} \right)^{1/2} \ll 1.$$

Малость угла поворота является следствием того, что изучаемая система облучается жестким γ — излучением, и получающееся волновое число будет большим для мессбауэровского излучения, $k \approx 10A^{-1}$. Поэтому для броуновских частиц размером $\approx 10^3 A$ их ориентация за время жизни мессбауэровского ядра меняется незначительно. Условие малости поворота частицы вокруг любой ее оси за время τ_0 позволяет найти простое выражение для функции Ван-Хова.

Уравнения поступательной и вращательной диффузии эллипсоидальной броуновской частицы имеют наиболее простую форму в системе координат x', y', z' с началом в центре масс частицы и осями, направленными вдоль главных осей эллипсоида. Пусть при $t = 0$ система координат x, y, z и x', y', z' совпадают. Затем за время $t \approx \tau_0$ система координат x', y', z' поворачивается вместе с частицей относительно системы x, y, z . Этот поворот представим в виде наложения трех поворотов на углы ϵ_i ($i = 1, 2, 3$) вокруг осей x, y, z . Поступательное движение эллипсоидальной броуновской частицы во всем объеме жидкости будем описывать простым диффузионным уравнением с одним коэффициентом поступательной диффузии [5]

$$\frac{\partial W^\tau(\vec{R}, \vec{R}_0, t)}{\partial t} = D \Delta W^\tau(\vec{R}, \vec{R}_0, t),$$

решение которого хорошо известно. Здесь $W^\tau(\vec{R}, \vec{R}_0, t)$ — плотность вероятности обнаружить в момент времени t центр масс частицы в точке \vec{R} , если в момент $t = 0$ он находился в точке \vec{R}_0 .

Так как рассматриваем эллипсоидальные частицы, то для описания ее ориентации необходим один единичный вектор \vec{n} , направленный вдоль оси симметрии. Будем считать, что броуновские частицы электрически анизотропны и не обладают постоянным дипольным моментом, так что во внешнем электрическом поле они будут приобретать только наведенный дипольный момент. Ограничимся случаем, когда главные оси тензора поляризуемости совпадают с осями эллипсоида. Учет влияния вращательного броуновского движения эллипсоидальной частицы на мессбауэровский спектр будем проводить с помощью плотности вероятности $W^r(\vec{n}, \vec{n}_0, t)$ изменения ориентации частицы за время t от \vec{n}_0 до \vec{n} . Подобная задача при отсутствии внешнего электрического поля решена [5, 7] и функция $W^r(\vec{n}, \vec{n}_0, t)$ найдена в виде разложения по обобщенным сферическим функциям. Учет поворотного теплового движения мессбауэровского ядра вместе с частицей будем проводить на основании упрощенной модели вращательной диффузии эллипсоидальных частиц [6]. В обзорной статье [8] приведено диффузи-

онное уравнение для функции распределения осесимметричных эллипсоидов, находящихся во внешнем электрическом поле, которым мы здесь воспользуемся

$$\frac{\partial W^r(\bar{n}, \bar{n}_0, t)}{\partial t} = (D_3^r L_3^2 + D_\perp^r L_\perp^2) W^r(\bar{n}, \bar{n}_0, t) - \sigma \bar{L} [\bar{n} \bar{E}] (\bar{n} \bar{E}) W^r(\bar{n}, \bar{n}_0, t) \quad (4)$$

с начальным условием

$$W^r(\bar{n}, \bar{n}_0, 0) = \delta(\bar{n} - \bar{n}_0). \quad (5)$$

Здесь \bar{L} — дифференциальный оператор поворота, $D_\perp^r = D_1^r = D_2^r \neq D_3^r$ коэффициенты вращательной диффузии. Коэффициент σ определяет геометрические свойства броуновской частицы и электрические свойства частицы и жидкости, в которой находятся частицы. Подробное его обсуждение приведено в [8] и [9], так что

$$\sigma = \frac{\gamma_3 - \gamma_1}{k_B T} D_1^r$$

пропорционален разности наведенных поляризуемостей ($\gamma_1 = \gamma_2 \neq \gamma_3$) эллипсоида, k_B — постоянная Больцмана, T — температура жидкости.

Если воспользоваться условием малости поворота частицы вокруг любой ее оси за время жизни мессбауэровского ядра, то можно приближенно записать

$$\bar{n}(t) \approx \bar{n}(0) + [\bar{n}(0) \bar{\epsilon}(t)],$$

где $\bar{\epsilon}(t)$ — малый угол поворота вокруг вектора \bar{n}_0 . В приближении малых поворотов уравнение вращательной диффузии (4) может быть преобразовано в уравнение в частных производных по углам поворота с коэффициентами, линейно зависящими от этого угла. Новое уравнение интегрируется точно, и его решение в представлении Фурье по угловым переменным $\bar{\epsilon}$ имеет следующий вид

$$\begin{aligned} W^r(\kappa, t) = \exp\left\{-\frac{D_1^r \tau_E}{n_1^2 + n_2^2} \left[(\kappa_1 n_1 + \kappa_2 n_2)^2 \frac{\exp(2n_3^2 t / \tau_E) - 1}{2n_3^2} + (-\kappa_1 n_2 + \kappa_2 n_1)^2 \times \right. \right. \\ \times \left. \frac{\exp((2n_3^2 - 1)t / \tau_E) - 1}{2(2n_3^2 - 1)} \right] - D_3^r \left[\kappa_3^2 t - 2\kappa_3 \tau_E \frac{\kappa_1 n_1 + \kappa_2 n_2}{n_3} (\exp(n_3^2 t / \tau_E) - 1 - n_3^2 t / \tau_E) + \right. \\ \left. \left. + \frac{(\kappa_1 n_1 + \kappa_2 n_2)^2 \tau_E}{2n_3^4} (\exp(2n_3^2 t / \tau_E) - 4 \exp(n_3^2 t / \tau_E) + 2n_3^2 t / \tau_E + 3) \right] \right\}, \quad (6) \end{aligned}$$

где $\tau_E = 1/(\sigma E^2)$ время, характеризующее ориентационное действие электрического поля; n_1, n_2, n_3 — орты системы координат x', y', z' , направленные вдоль главных осей эллипсоида в момент времени $t = 0$.

Ниже ограничимся случаем малых внешних электрических полей. Разлагая функцию (6) в ряд по малому параметру t/τ_E и ограничиваясь членами, квадратичными по электрическому полю, получим следующее выражение

$$W_0^r(\kappa, t) \approx \exp\left\{-[D_1^r(\kappa_1^2 + \kappa_2^2) + D_3^r \kappa_3^2]t - \left\{D_1^r [n_3^2(\kappa_1^2 + \kappa_2^2) - (\kappa_2 n_1 - \kappa_1 n_2)^2] - D_3^r \kappa_3(\kappa_1 n_1 + \kappa_2 n_2) n_3\right\}t^2 / \tau_E\right\}. \quad (7)$$

Подставляя (7) в выражение (3), найдем

$$G_s(\bar{\kappa}, t) = \exp(-2W_e - 2W_a) \exp[-\kappa^2(D + Q_1)t - \kappa^2 Q_2 t^2 / \tau_E],$$

где $\exp(-2W_e)$, $\exp(-2W_a)$ — факторы Дебая — Валлера соответственно источника и поглотителя и введены обозначения

$$Q_1 = r^2 \{[\cos^2 \theta \sin^2 \beta + \sin^2 \theta \cos^2 \beta - \sin 2\theta \sin \beta \cos \beta \cos(\varphi - \gamma)]D_1^r + \sin^2 \theta \sin^2 \beta \sin^2(\varphi - \gamma)D_3^r\},$$

$$Q_2 = r^2 \{[\sin^2 \theta \cos 2\theta \cos^2 \beta - \sin 2\theta \sin \beta \cos \beta \cos(\varphi - \gamma) \cos 2\theta + \sin^2 \beta \cos^4 \theta - \sin^2 \theta \cos^2 \theta \sin^2 \beta \cos^2(\varphi - \gamma)]D_1^r + \sin^2 \theta \cos^2 \theta \sin^2 \beta \sin^2(\varphi - \gamma)D_3^r\}.$$

Здесь κ, β, γ — сферические координаты вектора $\bar{\kappa}$ относительно осей x, y, z в начальный момент времени, r, θ, φ — сферические координаты вектора \bar{r} относительно осей x', y', z' , связанных с частицей. Сечение поглощения $\sigma(s)$ еще необходимо усреднить по начальным ориентациям броуновских частиц. Такое усреднение проведем в предположении однородной ориентации этих частиц. Так как положение атома — поглотителя внутри броуновской частицы точно не известно, то спектр (1) следует также усреднить по всем возможным положениям \bar{r} мессбауэровских ядер внутри частиц. Для равномерного распределения мессбауэровских атомов внутри частиц получаем

$$\bar{\sigma}(s) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\gamma \int_0^\pi \sin \beta d\beta \frac{1}{V} \int_V \sigma(s) dr,$$

где V — объем частицы. Обозначим средние значения Q_1 и Q_2 через \bar{Q}_1 и \bar{Q}_2 и воспользуемся приближенной процедурой усреднения $\sigma(s)$ по началь-

ным ориентациям, использованной в работе [6], сводящейся к замене среднего значения функции функцией от среднего. В результате после простых преобразований для сечения поглощения получаем выражение

$$\bar{\sigma}(s) = \frac{\sigma_0}{4} \exp(-2W_e - 2W_a) \times \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{\exp\left(-y^2 \frac{\tau_E D}{\tau_D Q_2}\right)}{\sqrt{\frac{\tau_E \tau_D D}{\pi \tau_0^2 Q_2}} \left(1 + \tau_D / \tau_0 + \bar{Q}_1 / D + i(y - s\tau_D)\right)}, \quad (8)$$

где $\tau_D = 1/(\kappa^2 D)$ — характерное время поступательной диффузии, а

$$\bar{Q}_1 = (2/75)a^2[D_1^r(6+4p^2) + D_3^r(4+p^2)],$$

$$\bar{Q}_2 = (1/525)a^2[D_1^r 28(p^2 - 1) + D_3^r(8+14p^2)].$$

Здесь $p = c/a$ — осевое отношение, a и c — длины главных полуосей эллипсоида. Из выражения (8) можно определить эффективную интегральную ширину сечения резонансного поглощения γ — квантов [3,2]

$$\Gamma_{ef} = \frac{2}{\pi\sigma(0)} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\sigma}(s) ds = \frac{\sigma_0 \Gamma}{\sigma(0)} \exp(-2W_e - 2W_a). \quad (9)$$

Ориентационное действие внешнего электрического поля, наряду с несферичностью частиц, сказалось на форме спектра резонансного поглощения ядрами, вкрапленными в броуновские частицы. Сечение поглощения уже не имеет простой формы лорентцевого спектра, а представляет результат свертки лорентцевской и гауссовой функций. Интеграл, входящий в (8), выражается через интеграл вероятности, для которого существуют подробные таблицы.

Развитый в работе метод позволяет учесть и временную зависимость внешнего электрического поля.

Литература

1. Singwi K.S., Sjolander A. The resonant absorption of γ — rays and dynamics motion of atoms// Phys. Rev. 1960. V. 120. №4. P. 1093 — 1100.
2. Nienhaus G.U., Frauenfelder H., Parak F. Structural fluctuations in glass — forming liquids: Mossbauer spectroscopy on iron in glycerol// Phys. Rev. B. 1991. V. 43. №4. P. 3345 — 3350.
3. Затовский А.В. К теории эффекта Мессбауэра на броуновских частицах // Журн. эксп. и теор. физ. 1970. Т. 59. №2. С. 500 — 506.

4. Дзюблик А.Я. К теории эффекта Мессбауэра на броуновских частицах// Укр. физ. журн. 1972. Т. 18. №9. С. 1457 — 1462.
5. Затовский А.В. К теории эффекта Мессбауэра на броуновских частицах с осевой симметрией// Укр. физ. журн. 1972. Т. 17. №11. С. 1809 — 1813.
6. Дзюблик А.Я. Эффект Мессбауэра на эллипсоидальных броуновских частицах// Журн. эксп. и теор. физ. 1974. Т. 67. №4. С. 1534 — 1538.
7. Валиев К.А. О вращательной диффузии молекул и рассеянии света в жидкостях// Оптика и спектроскопия. 1962. Т. 13. №4. С. 505 — 510.
8. Покровский В.Н. Напряжение, вязкость и оптическая анизотропия суспензии жестких эллипсоидов// Успехи физических наук. 1971. Т. 105. №4. С. 625 — 643.
9. Van der Linden E., Geiger S., Bedeaux D. The Kerr constant of a microemulsion for a low volume fraction of water// Physica A. 1989. V.156. P. 130-143.

А. В. Кирилюк, О. В. Затовський

**Про вплив однорідного електричного поля на спектр
мессбауерівського поглинання осесиметричними
броунівськими частинками**

АНОТАЦІЯ

Розглянуто вплив зовнішнього електричного поля на орієнтаційний рух броунівських частинок та на спектри мессбауерівського поглинання. Знайдено переріз резонансного поглинання гамма — квантів без віддачі атомами, які входять до складу броунівських частинок. Підрахована ефективна ширина лінії Мессбауера і її залежність від значення зовнішнього електричного поля.

Kyrylyuk A. V., Zatovsky A. V.

**The influence of uniform electric field on Mossbauer spectrum
of absorption by ellipsoidal Brownian particles**

SUMMARY

The influence of the external uniform electric field on the rotational motion of Brownian particles and on their Mossbauer spectra has been considered. The resonant absorption cross — section of gamma — quanta by atoms in Brownian particles has been found. The Mossbauer line effective width has been calculated and its dependence on the applied electric field intensity has been found.

Т. Ю. Ческая

Одесский гидрометеорологический институт

Вращательное броуновское движение пористой гидратированной частицы в жидкости

Изучены высокочастотные процессы, связанные с вязкоупругими свойствами жидкости внутри пористой частицы, совершающей вращательное броуновское движение в растворителе. Построена частотная зависимость спектра корреляционной функции угловой скорости вращательного движения при различных параметрах частицы. Динамические свойства жидкости внутри частицы описаны нестационарным уравнением Навье-Стокса с вкладом, учитывающим проницаемость среды. Введен параметр влажности в виде отношения эффективного момента инерции пористой частицы с жидкостью к моменту инерции частицы, полностью заполненной жидкостью.

1. Результаты теории броуновского движения малой частицы в жидкости применяются для анализа широкого круга физических исследований [1]. В наиболее простом случае поступательное и вращательное броуновское движение твердой физической частицы рассматривается как марковский случайный процесс, а сила трения, действующая со стороны окружающей ее жидкости, определяется законом Стокса. Учет вязкого последствия при движении частицы в несжимаемой жидкости приводит к силе трения Бусине [2]. Броуновское движение частицы с учетом вязкого последствия впервые было изучено в [3], а затем более подробно в [4].

Изучение временной зависимости корреляционной функции (КФ) скорости броуновской частицы, взвешенной в невязкой сжимаемой жидкости и испытывающей силу акустического радиационного трения, проведено в [5]. Результаты теоретического расчета сравнивались с поведением КФ скоростей молекулы жидкого аргона, найденной методом молекулярной динамики [6]. Аналогичные вычисления с учетом вязких сил трения были проведены в [7]. Для лучшего совпадения КФ скорости броуновской частицы с модельным экспериментом на ЭВМ были использованы релаксирующие максвелловские сдвиговая и объемная вязкости аргона. Теоретические расчеты КФ скорости вращательного броуновского движения частицы в жидкости с учетом вязкого последствия проводились в [8]. Здесь же дополнительно анализировалось влияние вязкоупругих свойств жидких частиц на структуру спектров корреляционных функций скорости частиц. Изучению низкочастотного поведения тепловых возмущений капли жидкости в растворителе уделялось значительное

внимание в связи с моделированием коллективных движений глобулярных макромолекул. В работе [9] для описания влияния влажности глобулярных макромолекул на спектры релеевского рассеяния мессбауэровского излучения использовалась простая физическая модель внутренних движений макромолекулы, базирующаяся на динамических свойствах вязкой жидкости внутри пористых броуновских частиц. Течение жидкости в пористых средах охватывает огромное разнообразие природных и промышленных процессов. Это такие процессы как ограниченная диффузия в мембранах, течение в разбавленных эмульсиях, полимеры в жидкостях, динамика гидратированных глобулярных белков, проницаемость гелей и т.п. Эффективность подобных процессов существенно зависит от открытого пространства за счет наличия пор, которые обеспечивают протекание жидкости, от взаимодействия частиц с поверхностью пор и от химической природы протекающей жидкости. Существенное влияние ограниченного объема на динамические свойства жидкости наблюдали авторы работы [10], которые изучали диффузию полимеров в пористых стеклах методом динамического рассеяния света. Измерения проводились вплоть до сравнимости размеров пор с размерами макромолекул, так что диффузия становилась существенно ограниченной из-за возрастающих гидродинамических взаимодействий, подавляющих диффузию. Уравнение Дебая-Бринкмана [11] является наиболее простым способом учета многочастичных гидродинамических взаимодействий при расчете коэффициента диффузии в дисперсных системах, которое достаточно хорошо описывает течение жидкости в дисперсной среде при большой проницаемости, или малой “экранировке”, соответствующей низкой плотности частиц, при уменьшении проницаемости усиливаются эффекты возмущающего влияния частиц на течение жидкости, хотя само по себе уравнение Дебая-Бринкмана применяется и в том и в другом случае.

Как правило, при динамическом описании броуновского движения предполагается, что коэффициент трения не зависит от времени. Такое предположение допустимо только в случае, когда ускорение броуновской частицы равно нулю и случайные силы, действующие на броуновскую частицу, являются дельта - коррелированными во времени, а автокорреляционная функция скорости частицы экспоненциально убывает со временем. В общем случае трение зависит от частоты и определяется динамическими процессами в жидкости, которые становятся заметными на высоких частотах. Коэффициент трения можно получить из решения гидродинамических уравнений для жидкости, протекающей внутри пористой частицы и вне ее. Простым способом включения вязкоупругих эффектов в гидродинамические уравнения является обобщение сдвиговой вязкости на случай зависимости от частоты. В работе [12] изучалось поступательное и вращательное броуновское движение твердой сферической частицы в сжимаемой жидкости и было показано, что коэффициенты поступательной и вращательной диф-

фузии частицы существенно зависят от ее размеров и параметров сжимаемой жидкости.

В настоящем сообщении построены спектры КФ угловой скорости вращательного движения влажной пористой броуновской частицы, утопленной в растворителе. Предполагается, что жидкость внутри пористой частицы и внешний растворитель обладают вязкоупругими свойствами в рамках модели Максвелла, т.е. вязкость зависят от частоты следующим образом: $\eta^{(i)}(\omega) = \eta_0^{(i)} / (1 - i\omega\tau^{(i)})$, где $i=1$ для внутренней области и $i=2$ для внешней, $\eta_0^{(i)}$ — значение вязкости на нулевой частоте. Ограничимся медленными тепловыми броуновскими движениями жидкости, возникающими вследствие случайного ориентационного качания частицы как целого. Динамика вращательного движения частицы описывается уравнениями Ланжевена с дельта-коррелированными случайными моментами сил. Определена КФ скорости вращательного движения жидкости и соответствующий ей коэффициент диффузии, существенно зависящие от коэффициента проницаемости частицы. Введен параметр влажности как отношение эффективного момента инерции пористой частицы с жидкостью к моменту инерции частицы, полностью заполненной жидкостью, который определяет относительное количество воды, содержащейся в частице. Рассмотренный нами параметр влажности динамического (инерциального), а не статического происхождения, вводимого традиционным способом. Изучена частотная зависимость коэффициента диффузии при различных значениях проницаемости частицы и ее размерах.

2. Пусть движение жидкости вне и внутри пористой частицы сферической формы с радиусом R возбуждается вращательными качаниями поверхности с угловой скоростью $\vec{\Omega}(t)$ и описывается уравнением Навье-Стокса для внешней области. Во внутренней области течение жидкости будем описывать линеаризованными уравнениями Навье-Стокса с учетом проницаемости частицы (величина, обратная k^2) [11]:

$$\begin{aligned} \rho^{(1)} \frac{\partial \vec{v}^{(1)}}{\partial t} &= -\nabla p^{(1)} + \eta^{(1)} \Delta \vec{v}^{(1)} - \eta_0^{(1)} k^2 \vec{v}^{(1)}, \quad \nabla \cdot \vec{v}^{(1)} = 0, \quad r < R, \\ \rho^{(2)} \frac{\partial \vec{v}^{(2)}}{\partial t} &= -\nabla p^{(2)} + \eta^{(2)} \Delta \vec{v}^{(2)}, \quad \nabla \cdot \vec{v}^{(2)} = 0, \quad r > R. \end{aligned} \quad (1)$$

Для удобства перепишем систему уравнений (1) применив Фурье-преобразование, т.е. заменив $\partial/\partial t$ на $-i\omega$. Получим следующую систему уравнений для фурье-компонент скорости v и давления \mathcal{P} :

$$(\Delta - \gamma_i^2) \vec{v}^{(i)} = \frac{1}{\eta^{(i)}} \nabla \mathcal{P}^{(i)}, \quad \nabla \cdot \vec{v}^{(i)} = 0, \quad i = 1, 2. \quad (2)$$

где $\gamma_1^2 = \frac{k^2 \eta_0^{(1)}}{\eta^{(1)}} - \frac{i\omega\rho^{(1)}}{\eta^{(1)}}$, $\gamma_2^2 = -\frac{i\omega\rho^{(2)}}{\eta^{(2)}}$, индекс i указывает на внутреннюю ($i=1$) или внешнюю ($i=2$) область.

Начало координат выберем в центре частицы. Граничные условия на поверхности частицы следующие:

$$v_\varphi^{(1)} = R\Omega \sin \vartheta, \quad \frac{R}{r_0} k (v_\varphi^{(2)} - v_\varphi^{(1)}) = \frac{\partial v_\varphi^{(2)}}{\partial r} - \frac{v_\varphi^{(2)}}{r}. \quad (3)$$

Первое из них означает совпадение скорости течения жидкости внутри частицы со скоростью смещения поверхности. Второе граничное условие означает проскальзывание внешней скорости течения жидкости, приводящее к перепаду скорости на границе, которая может иметь поры. r_0 — расстояние, на котором происходит выравнивания перепада скорости. При $r_0 = 0$ течения во внутренней и внешней области независимы.

Скорость жидкости направлена перпендикулярно оси вращения по касательной к окружности с центром, совпадающим с центром масс частицы. Поскольку в силу аксиальной симметрии градиент давления вдоль оси вращения отсутствует, вектор скорости течения можно искать в виде $\vec{v} = \text{rot}(\vec{\Omega}f(r))$. Скалярные функции $f^{(1)}$, $f^{(2)}$, зависящие лишь от одного аргумента, легко находятся, так что для v_φ составляющих скоростей (в сферических координатах с началом в центре масс) жидкости с учетом граничных условий (3) имеем

$$v_\varphi^{(1)} = \Omega \sin \vartheta R \frac{J'(\gamma_1 r)}{J'(\gamma_1 R)}, \quad (4)$$

$$v_\varphi^{(2)} = \Omega \sin \vartheta R \frac{kR}{H'(\gamma_2 R)(kr_0 + 1) - \gamma_2 r_0 H''(\gamma_2 R)} H'(\gamma_2 r)$$

Здесь угол ϑ отсчитывается от направления вектора $\vec{\Omega}$, $J(z) = sh(z)/z$, $H(z) = \exp(-z)/z$, штрихом обозначено дифференцирование по аргументу.

Найдем кинетическую энергию поступательного движения жидкости внутри частицы:

$$K = \frac{1}{2} \rho^{(1)} \int_V |\vec{v}^{(1)}|^2 d^3\vec{r} = \frac{1}{2} \Omega^2 I_{eff}(\omega), \quad I_{eff} = I_0 h(\gamma_1 R),$$

$$h(\gamma_1 R) = \frac{5}{R^3 |J'(\gamma_1 R)|^2} \int_0^R |J'(\gamma_1 r)|^2 r^2 dr, \quad (5)$$

где I_{eff} — эффективный момент инерции пористой частицы, зависящий от частоты, I_0 — момент инерции сферы с жидкостью плотности $\rho^{(1)}$ на нулевой частоте.

При $\omega = 0$ получим для функции h следующее выражение

$$h(x) = \frac{5}{2} \left[\frac{1}{L^2} + \frac{1}{xL} - \frac{12}{x^2} - 1 \right], \quad L(x) = \text{cth } x - \frac{1}{x}, \quad x = kR, \quad (6)$$

которое можно принять в качестве степени влажности частицы [9], поскольку при $k \equiv 0$ (большая проницаемость) $h(x)$ стремится к единице и частица полностью заполнена жидкостью, а при увеличении k (проницаемость уменьшается) течение жидкости “замораживается” и влажность падает до нуля.

Найдем силу сопротивления, испытываемую частицей, интегрируя по поверхности локальные значения действующих на частицу моментов сил:

$$\vec{M}_\omega = -\vec{\Omega} \xi_{eff}, \quad \xi_{eff} = \frac{8\pi}{3} R^3 \eta^{(2)} \left[\frac{r_0}{R} \frac{1}{kR} + \frac{\gamma_2 R + 1}{(\gamma_2 R)^2 + 3(\gamma_2 R + 1)} \right]^{-1}, \quad (7)$$

где ξ_{eff} — эффективный коэффициент трения. Для жидкости без вязкоупругих эффектов получим известный результат [12]: $\xi_{eff} \sim \omega^{1/2}$ (при $\omega \rightarrow \infty$).

Вид корреляционной функции угловой скорости для сферически-симметричной частицы совершающей вращательное броуновское движение с угловой скоростью $\vec{\Omega}$ легко установить из уравнения Ланжевена:

$$I_{eff}(0) \dot{\vec{\Omega}} + \xi_{eff} \vec{\Omega} = \vec{M}(t), \quad (8)$$

где $\vec{M}(t)$ — момент случайных внешних сил. Коэффициент диффузии пористой частицы определяется ее КФ угловой скорости и имеет традиционный вид

$$D_\omega = \frac{1}{3} \langle \vec{\Omega}(\omega) \vec{\Omega}(0) \rangle = \frac{k_B T}{i\omega I_{eff}(0) + \xi_\omega}. \quad (9)$$

Угловые скобки означают усреднение по реализации случайных сил и равновесному распределению Максвелла. Выражение (9) после подстановки эффективного момента инерции и коэффициента трения приобретает следующий вид:

$$D_\omega = \frac{k_B T}{8\pi R^3 \eta^{(2)}} \left[-\frac{1}{15} (\gamma_2 R)^2 \frac{\rho_1}{\rho_2} h(x) + \frac{1}{3} \frac{r_0}{R} \frac{1}{kR} + \frac{1}{(\gamma_2 R)^2 + 3(\gamma_2 R + 1)} \right]^{-1}. \quad (10)$$

При $\omega = 0$ и $r_0 = 0$ получаем выражение для коэффициента вращательной диффузии D_0 твердого шарика в жидкости с вязкостью $\eta_0^{(2)}$.

3. В соответствии с формулой (10) был рассчитан нормированный коэффициент диффузии $C_\omega = D_\omega/D_0$ центра масс частицы с различной степенью проницаемости. Сдвиговые времена релаксации $\tau^{(1)}$ и $\tau^{(2)}$ для жидкости вне и внутри частицы были равны $1 \cdot 10^{-13}$ с, значения вязкостей $\eta_0^{(1)}$ и $\eta_0^{(2)}$ полагались равными 1 пз, плотность жидкости вне и внутри частицы равнялась 1 г/см^3 , а $r_0 \rightarrow 0$. На рис. 1 приведены графики частотной зависимости коэффициентов вращательной диффузии частицы радиуса 10 \AA при разных значениях проницаемости (влажности), нормированные на коэффициент диффузии на нулевой частоте. Для сравнения, на рис. 1 приведен расчет C_ω (кривая 1) для случая постоянных значений вязкости жидкостей внутри и вне частицы, равных 1 пз. На рис. 2 изображены графики для частиц разных размеров при $h=0.99$. Как видно из расчета включение вязкоупругих эффектов приводит к появлению максимума в спектре КФ угловой скорости пористой частицы. Максимумы КФ растут и сдвигаются в высокочастотную область с уменьшением проницаемости среды (уменьшении влажности). Падение максимумов и сдвиг в низкочастотную область вплоть до их полного исчезновения происходит при увеличении размеров частицы и соответствует протеканию жидкости в бесконечной пористой среде.

Характерное поведение спектра КФ угловой скорости в зависимости от частоты и параметров пористой частицы указывает на то, что размер свободного пространства в частице существенно влияет на протекание в нем жидкости, а включение вязкоупругих эффектов заметно меняет характер зависимости КФ угловой скорости.

С помощью предложенной простой модели нестационарных тепловых движений жидкости внутри пористой частицы можно описать подвижность таких систем как глобулярные макромолекулы в зависимости от степени гидратации. В этом случае взаимодействие воды с атомами макромолекулы частично учтется в модифицированном Дебаем уравнении Навье-Стокса за счет дополнительного вклада, и будет регулироваться проницаемостью среды. Модель, предложенная в настоящем сообщении, является обобщением предыдущей, для стационарного протекания жидкости в пористых части-

цах [9], с помощью которой удалось хорошо интерпретировать опытные спектры релеевского рассеяния мессбауэровского излучения на глобулярных макромолекулах в зависимости от их степени гидратации.

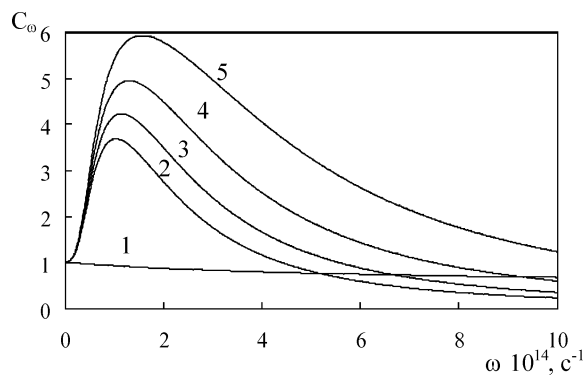


Рис. 1. $C_{\omega}(\omega)$ для частиц с разной степенью влажности: 1 — $h=1$ (вязкости не зависят от частоты), 2 — $h=1$, 3 — $h=0.8$, 4 — $h=0.6$, 5 — $h=0.4$.

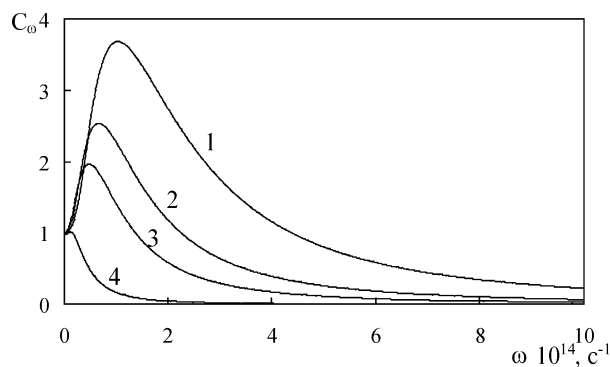


Рис. 2. $C_{\omega}(\omega)$ для частиц разного радиуса 1 — $R=10 \text{ \AA}$, 2 — $R=15 \text{ \AA}$, 3 — $R=20 \text{ \AA}$, 4 — $R=50 \text{ \AA}$

Литература

1. Чандрасекар С. Стохастические проблемы в физике и астрономии. М.: ИЛ, 1947. 168 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 736 с.
3. Владимирский В., Терлецкий Я. Гидродинамическая теория поступательного броуновского движения //ЖЭТФ. 1945. Т.15, С. 258-264.

4. Гитерман М.Ш., Герцентштейн М.Е. К теории броуновского движения и возможности его использования для исследования критического состояния вещества // ЖЭТФ. 1966. Т.50, С. 1084 — 1095.
5. Реут Л.С., Фишер И.З. О природе осциллирующей автокорреляционной функции скорости в жидкости // УФЖ. 1967. Т.12, С. 1695-2000.
6. Rahman A. Correlation in atomic motion in liquid and argon // Phys. Rev. A. 1964. V.136, P.405-412.
7. Zwanzig R., Vixon M. Hydrodynamic theory of the velocity correlation function // Phys. Rev A. 1970. V.2, P. 2005-2013.
8. Затовский А.В. К теории вращательного броуновского движения // Изв. вузов. Физика. 1969. В. 10. С.13-17.
9. Ческая Т.Ю. Динамика глобулярных макромолекул: влияние влажности на спектр релеевского рассеяния мёсбауэровского излучения // Хим. физика. 1998. Т. 17, № 10. С. 126-134.
10. Guo Yi., Langley K.H., Karasz F.E. Hindered Diffusion of Polystyrene in Controlled Pore Glasses // Macromolecules. 1990. V.23, P. 2022-2027.
11. Debye P., Bueche A.M. Intrinsic Viscosity, Diffusion, and Sedimentation Rate of Polymers in Solution // J. Chem. Phys. 1948. V. 16, P. 573-579.
12. Sparling L.G., Reichl L.E. Translational and rotational Brownian motion in water // Phys. Rev. A. 1984. V.29, No. 4. P. 2194-2203.

Т. Ю. Ческа

Обертальний броунівський рух пористої гідратованої частинки в рідині

АНОТАЦІЯ

Вивчено високочастотні процеси, зв'язані з в'язкопружними властивостями рідини пористої частинки у розчиннику. Побудовано частотну залежність спектра кореляційної функції кутової швидкості обертального руху частинки при різноманітних параметрах частинки. Динамічні властивості рідини усередині частинки описані нестационарним рівнянням Нав'є-Стокса з внеском, що враховує проникність середовища. Введено параметр вологості у вигляді відношення ефективної маси пористої частинки з рідиною до маси частинки, цілком заповненою рідиною.

Tchesskaya T. Yu.

**Rotational Brownian motion of the porous
hydrated particle in liquid**

SUMMARY

The high-frequency processes associated with viscoelasticity properties of liquid inside the porous particle in solvent. The frequency dependence of velocity-correlation function of the particle rotational motion is constructed at various parameters of the particle. The dynamical properties of liquid inside the particle are described by the non-stationary Navier-Stokes equation with the contribution which is taking into account the permeability of the environment. The parameter of humidity is proposed as the ratio of effective weight of the porous particle with liquid to weight of the particle completely filled by liquid.

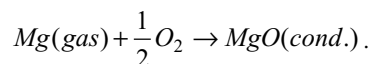
И. С. Альтман

Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова

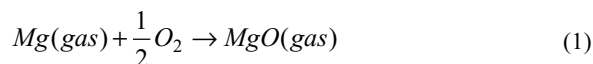
Об асимметрии потоков газообразной окиси при горении одиночной магниевой частицы

Анализируются необходимые условия существования зоны накопления конденсированной окиси при горении одиночной частицы магния. Показано, что экспериментально наблюдаемому положению зоны накопления конденсата соответствует существенная асимметрия потоков газообразной окиси магния от зоны газофазной реакции.

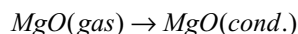
Как известно, горение одиночной частицы магния сопровождается образованием большого количества субдисперсной конденсированной окиси. В теоретических моделях, описывающих горение магниевых частиц [1,2] обычно принимается, что конденсированная окись образуется в зоне реакции, т.е. полагается, что горение происходит в одну стадию, описываемую уравнением:



В то же время, в работе [3] экспериментально показано, что области, в которых происходят газофазная реакция



и конденсация



пространственно разделены. Согласно результатам этой работы газофазная реакция (1) происходит в узкой сферической зоне радиуса, в три раза превышающим радиус исходной частицы магния. Радиус же зоны конденсации составляет два радиуса магниевой частицы. Заметим при этом, что зона конденсации является достаточно узкой. Так для частиц магния размером 2 мм ширина зоны конденсации не превышает [4] 50 мкм.

Наблюдаемая узость зоны конденсации может быть объяснена наличием сил, компенсирующих действие на субдисперсные частицы окиси потока паров магния, испаряющегося при горении. Такими силами могут быть силы как электрической, так и гидродинамической природы. Оценки показывают, что скорость потока газообразного магния у поверхности горячей час-

тицы миллиметрового размера составляет величину порядка 1 м/с. Согласно [5], скорость дрейфового движения частиц окиси в возникающих при горении частицы магния электрических полях не превышает 0.5 см/с. Поэтому величины сил электрической природы, действующих на конденсированные оксидные частицы, по крайней мере, на два порядка меньше значений, необходимых для удержания их в зоне конденсации. В этом случае единственно возможной причиной существования зоны конденсации является гидродинамический (стефановский) поток, направленный от зоны реакции к поверхности горячей магниевой частицы. Очевидно, этот поток должен быть противоположен потоку паров магния. Целью настоящей работы является выявление необходимых условий для существования такого гидродинамического потока.

Рассмотрим область, охватываемую поверхностью зоны газовой реакции при горении частицы магния. В этой области имеются газообразные магний и окись магния, а также инертный газ, в атмосфере которого происходит горение (кислород в эту область не проникает). Потоки газов могут быть записаны [6] как

$$\vec{j}_i = -\frac{D_i}{RT} \text{grad}(p_i) + \frac{\vec{v}}{RT} \cdot p_i. \quad (2)$$

Здесь индексы $i = 1 \dots 3$ относятся к магнию, окиси магния и инертному газу, соответственно; D_i — коэффициенты диффузии, p_i — парциальные давления компонентов смеси; \vec{v} — скорость стефановского потока.

Поток инертного газа, очевидно, равен нулю:

$$\vec{j}_3 = 0. \quad (3)$$

Система предполагается изобарической:

$$p_1 + p_2 + p_3 = p, \quad (4)$$

здесь p — давление в газе.

Из системы уравнений (2) с помощью (3) и (4) легко получить выражение для скорости стефановского потока:

$$\vec{v} = \frac{RT}{P} \cdot \frac{D_3 \cdot (D_2 \vec{j}_1 + D_1 \vec{j}_2)}{C_1 D_2 D_3 + C_2 D_1 D_3 + C_3 D_1 D_2}.$$

Здесь $C_i = \frac{p_i}{p}$ — концентрации компонентов.

Поскольку поток паров магния \vec{j}_1 направлен от центра частицы магния, а поток газообразной окиси \vec{j}_2 в рассматриваемой области может быть направлен только к центру, то направление скорости стефановского потока

определяется отношениями величин потоков j_1 и j_2 и коэффициентов диффузии D_1 и D_2 . Легко заметить, что стефановский поток противоположен потоку паров магния если

$$j_2 > \frac{D_2}{D_1} \cdot j_1. \quad (5)$$

Оценивая отношение коэффициентов диффузии как отношение средних тепловых скоростей движения молекул соответствующих газов (последнее определяется квадратным корнем из отношения их молярных масс), получим, что соотношение (5) выполняется при

$$j_2 > 0.77 j_1.$$

Последнее означает, что если стефановский поток направлен от зоны реакции внутрь — к поверхности частицы, то количество газообразной окиси, диффундирующей внутрь области, охватываемой зоной реакции, составляет не менее 77% от количества магния, попадающего в зону реакции. Поскольку согласно стехиометрии реакции (1) на моль реагирующего магния образуется моль газообразной окиси, то из зоны газофазной реакции внутрь диффундирует не менее 77%, а наружу — не более 23 % газообразной окиси магния. Только такая асимметрия потоков окиси может привести к существованию экспериментально наблюдаемой зоны конденсации. Этот результат согласуется с выводами работы [4], где показано отсутствие конденсированной окиси вне зоны конденсации, что может быть объяснено лишь отсутствием потока газообразной окиси магния наружу области, охватываемой зоной газофазной реакции.

Таким образом, только асимметрия потоков газообразной окиси может привести к существованию экспериментально наблюдаемой зоны конденсации. Выяснение причин, вызывающих эту асимметрию, представляет, на наш взгляд, тему отдельного исследования.

Работа выполнена при финансовой поддержке INTAS-ESA (грант 99-0138).

Литература

1. Бржустовский Т., Глассмен И. Парофазные диффузионные пламена при горении магния и алюминия. I. Аналитическое исследование // Гетерогенное горение. М.: Мир, 1967. С.91-125.
2. Клячко Л.А. Горение неподвижной частицы легкокипящего металла// ФГВ. 1969. Т.5, №3. С.404 -412.
3. Флорко А.В., Золотко А.Н., Каминская Н.В., Шевчук В.Г. Спектральные исследования горения частиц магния// ФГВ. 1982. Т.18, №1. С.17-22.
4. Shoshin Yu.L., Altman I.S. The radiation heat losses and structure of oxide condensation zone during a Mg particle combustion. 17-th ICDERS, Heidelberg, Germany, July 25-30, 1999, p. 186 (1-4).

5. Флорко А.В., Козицкий С.В., Золотко А.Н., Головки В.В. О механизме переноса конденсированных продуктов сгорания на поверхность горячей частицы магния// ФГВ. 1983, Т.19, №6. С.24-29.
6. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987. 502 с.

I. S. Altman

**Про асиметрію потоків газоподібного оксиду
при горінні одиночної магнієвої частинки**

АНОТАЦІЯ

Проаналізовані умови, що необхідні для існування зони накопичення конденсованого оксиду при горінні одиночної частинки магнію. Показано, що експериментальному положенню зони накопичення відповідає істотна асиметрія потоків газоподібного оксиду від зони газофазної реакції.

I. S. Altman

**On Asymmetry of the Gaseous Oxide Flows
during Single Magnesium Particle Burning**

SUMMARY

The conditions have been analyzed which provided the existence of condensed oxide accumulation zone during combustion of single Mg particle. It has been shown that the essential asymmetry of gaseous magnesium oxide flows corresponded to experimentally observed accumulation zone position.

УДК 536.46

*Л. А. Коваль, А. В. Флорко**Одесский национальный университет им И. И. Мечникова, г. Одесса***Оптические и электрические свойства бора
при температурах горения**

Проведены измерения оптических и электрических характеристик бора при температурах горения. Определены температурные зависимости испускательной способности и электропроводности бора в диапазоне температур 1400 — 2500 К. Определена ширина запрещенной зоны бора $E_g = 1,6 \pm 0,1$ эВ.

Корректное описание воспламенения и горения бора требует информации о его излучательных характеристиках. Поскольку бор относится к полупроводникам, то можно ожидать сильную температурную зависимость испускательной способности и электропроводности. В этой связи в данной работе представлены результаты экспериментального исследования оптических и электрических свойств борных нитей в интервале температур 1400–2500 К.

Для измерения коэффициента испускательной способности бора ϵ_B при высоких температурах использовалась установка, блок-схема которой представлена на рис. 1.

Под колпак вакуумной системы, которая позволяла проводить эксперимент в практически бескислородной среде, помещалась вольфрамовая спираль (1), в витках которой была зажата борная проволока (2). К концам спирали подводилось напряжение, которое регулировалось при помощи автотрансформатора (3). Таким образом, вольфрамовая спираль использовалась в качестве печи для нагревания борной проволоки. Излучение от вольфрамовой и борной проволоки попадало в объектив яркостного пирометра (4), при помощи которого определялись яркостные температуры вольфрама и бора. С учетом того, что ϵ_W для вольфрама при различных температурах известен, определялась истинная температура вольфрама по формуле

$$T_{\text{ист}} = \frac{c_2 T_{\text{ярк}}}{c_2 + \lambda T_{\text{ярк}} \ln \epsilon_W}, \quad (1)$$

где $T_{\text{ирт}}$ — истинная температура вольфрама,
 $T_{\text{ярк}}$ — яркостная температура вольфрама,
 λ — длина волны света, который пропускает фильтр яркостного пирометра, $\lambda = 6,5 \cdot 10^{-5}$ см,
 c_2 — постоянная величина, $c_2 = 1,4388$ см · К.

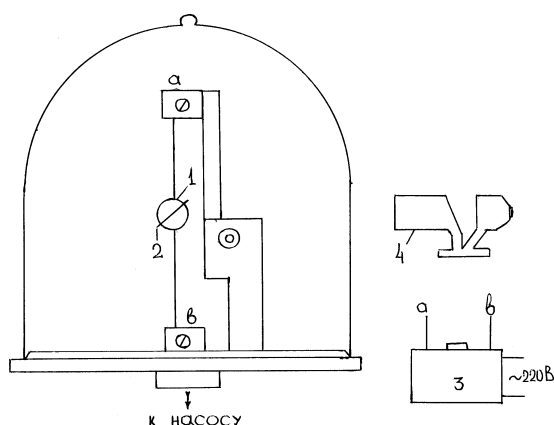


Рис. 1. Блок-схема экспериментальной установки

Так как эксперимент проводился в разряженной среде, то можно сделать вывод, что истинные температуры бора и вольфрама одинаковы. Кроме того, данная установка позволила достичь температур порядка 2500 К, то есть того температурного интервала, в котором происходит воспламенение и горение бора.

Используя виновское приближение формулы Планка в видимом диапазоне длин волн:

$$e^{-c_2/\lambda T_{\text{ярк}}} = \epsilon e^{-c_2/\lambda T_{\text{ирт}}} \quad (2)$$

легко получить:

$$\epsilon_B = \frac{e^{-c_2/\lambda T_{\text{ярк}}}}{e^{-c_2/\lambda T_{\text{ирт}}}}, \quad (3)$$

где $T_{\text{ирт}}$, $T_{\text{ярк}}$ — истинная и яркостная температура бора соответственно.

В результате проведенных экспериментов и расчетов была получена зависимость ϵ_B от T в температурном интервале 1400–2500 К. График зависимости $\epsilon_B = \epsilon_B(T_u)$ представлен на рис. 2.

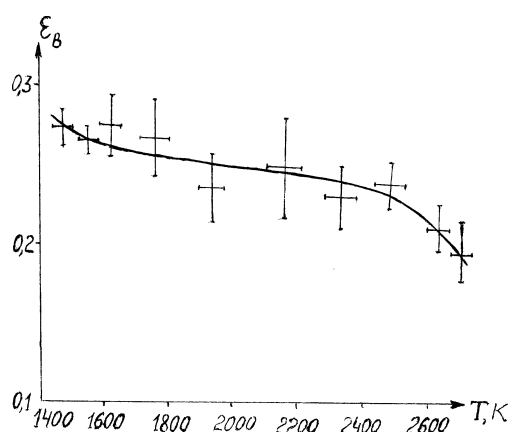


Рис. 2. График зависимости $\epsilon_B = \epsilon_B(T_u)$

Исследование зависимости $\epsilon_B(T_u)$ показало, что значение ϵ_B испытывает два относительно резких изменения при температуре около 1400 К и при температуре около 2400 К. В этом интервале температур ϵ_B остается примерно постоянным $\epsilon_B = 0,25 \pm 0,05$. Относительно резкое изменение испускательной способности объясняется, по-видимому, уменьшением развитости поверхности с увеличением температуры. Причину происхождения второго излома предстояло выяснить. Существует мнение о том, что возможное скачкообразное изменение яркости бора связано с фазовым переходом в районе температуры плавления В [1]. Однако, известно, что фазовые переходы происходят при постоянной температуре, а из графика видно, что коэффициент черноты бора меняется не при постоянной температуре, а при её увеличении. Для объяснения данного эффекта было сделано предположение о том, что изменение излучательных характеристик бора находится в тесной связи с изменением его электропроводности.

Для измерения электропроводности бора была использована следующая установка (рис.3).

Под колпак вакуумной системы помещалась борная проволока (1), к концам которой подводилось напряжение, регулируемое автотрансформатором (2). Напряжение с автотрансформатора подавалось на обмотку повышающего трансформатора (3). Со вторичной обмотки повышающего трансформатора напряжение подавалось на трансформатор с коэффициентом трансформации приблизительно равным 1. Последний являлся слаботочным, что позволяло использовать его как источник тока, обеспечивающий, кроме того, потенциальную развязку.

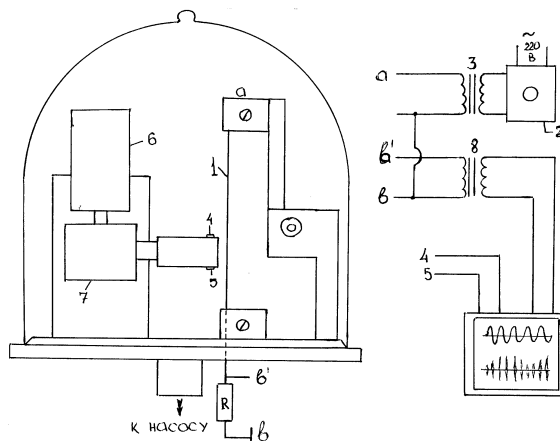


Рис. 3. Блок-схема экспериментальной установки

Изменяя при помощи автотрансформатора напряжение на концах борной проволоки, можно было изменять ее температуру, которая измерялась яркостным пирометром с учетом измеренных значений коэффициента ϵ_B .

В результате прохождения тока по борной проволочке была велика вероятность того, что она прогревается неравномерно. Таким образом, для непосредственного измерения электропроводности необходимо было снимать напряжение на небольшом фиксированном участке борной проволочки. Измерение напряжения проводилось подвижными зондами (4, 5), сделанными из танталовой проволоки диаметром 50 мкм. В движение зонды приводил мотор (6), помещенный под колпак вакуумной системы. Вращательное движение вала мотора при помощи преобразовательного механизма (7) преобразовывалось в поступательное движение зондов. Напряжение, снимаемое зондами, непосредственно подавалось на один из каналов двухлучевого осциллографа. Сигнал с шунта R, пропорциональный силе электрического тока, подавался с помощью трансформатора (8) на второй канал осциллографа. В результате, на экране можно было наблюдать одновременное изменение напряжения на участке борной проволочки и тока в нем. По измеренным значениям напряжения (U) и тока (I) и, зная геометрические характеристики проволочки, определялась электропроводность σ бора при соответствующей температуре.

Яркостная температура нагретой проволоки между зондами определялась при помощи пирометра, а истинная — по формуле (1).

Таким образом, была получена экспериментальная зависимость удельной электропроводности бора от температуры $\sigma(T)$ в интервале 1400–2500 К.

Полученный в результате эксперимента график зависимости $\sigma(T)$ до температуры 2200 К (рис. 4) совпадает с аналогичным графиком, представленным в [2].

Как видно из графика (рис. 4), значение σ испытывает быстрое изменение в области температур выше 2400 К. Таким образом, ввиду независимости проведения экспериментов по измерению коэффициентов ϵ_B и электропроводности для борных проволочек можно сделать вывод о качественном характере корреляции коэффициентов черноты и электропроводности бора.

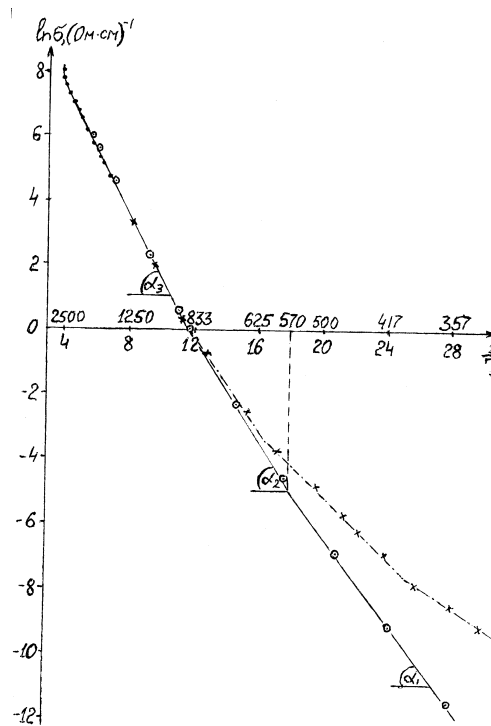


Рис. 4. График зависимости $\sigma(T)$, где о — кристаллический бор [2], х — аморфный бор [2], • — данные настоящих измерений

Из графика зависимости $\ln \sigma = f(1/T)$ (рис. 5) была определена ширина запрещенной зоны E_g для бора при температурах горения. Оказалось, $E_g = 1,6 \pm 0,1$ эВ.

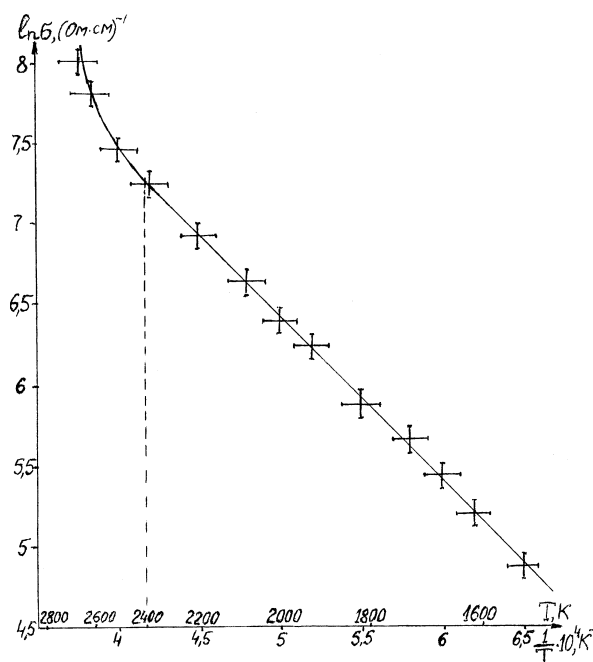


Рис. 5. График зависимости $\ln \sigma = f(1/T)$

Полагая, что удельная проводимость бора определялась по формуле

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left[-(E_g)/2kT\right] \quad (4)$$

находим, что

$$\sigma = 70\,000 \exp[-18\,600/T] \text{ ом}^{-1}\text{см}^{-1}. \quad (5)$$

Следует отметить, что в справочной литературе приводимые данные по значениям величины запрещенной зоны для бора колеблются в пределах от 0,1 до 1,7 эВ.

Таким образом, основные результаты работы можно сформулировать в следующих выводах:

1. Проведены измерения излучательных и электрических характеристик бора в фиксированном интервале температур 1400 — 2500 К, представляющих интерес при описании его воспламенения и горения.

2. Установлено, что вблизи температур 1400 К и 2400 К зависимость ϵ_B от температуры испытывает изломы. Это объясняется изменением развитости поверхности бора и сильной зависимостью его электропроводности от

температуры. Последнее связано с полупроводниковыми свойствами бора, ширина запрещенной зоны которого, как показали измерения, равна $1,6 \pm 0,1 \text{ эВ}$.

3. Таким образом, в исследованном интервале температур электропроводность бора определяется соотношением $\sigma = 70\,000 \exp[-18\,600 / T] \text{ ом}^{-1}\text{см}^{-1}$.

Литература

1. Кинг М.К. Воспламенение и горение частиц и газовзвесей частиц бора // Аэрокосмическая техника, 1983, т.1. №8, с. 65-71.
2. Березин А.А. Голиков О.А., Зайцев В.К. Электрические свойства бета-ромбэдрического бора и аморфного бора. М.: Мир, 1988. 201 с.

Л. А. Коваль, А. В. Флорко

Оптичні та електричні властивості бора при температурах горіння

АНОТАЦІЯ

Проведені виміри оптичних та електричних характеристик бора при температурах горіння. Визначені температурні залежності випромінюваної здатності і електропровідності бора у діапазоні температур 1400–2500 К. Визначено ширину забороненої зони бора $E_g = 1,6 \pm 0,1 \text{ эВ}$.

Koval L. A., Florko A. V.

Optical and electrical properties of boron at temperatures of burning

SUMMARY

The measurements of the optical and electrical characteristics of are carried out at temperatures of burning. The temperature dependencies emitting ability are determined and electroconductivity of boron in a range of temperatures 1400–2500 K. The width of the forbidden zone of boron is determined $E_g = 1,6 \pm 0,1 \text{ эВ}$.

И. В. Куклина, В. П. Козловская

Одесский государственный политехнический университет, г. Одесса

Расчет интенсивности свечения атомов щелочных металлов в водородно-кислородном пламени в присутствии магнитного поля

На основе ранее развитых моделей расчета характеристик атомов во внешнем магнитном поле [11-15] выполнен расчет влияния магнитного поля на интенсивности свечения атомов щелочных металлов: натрия и цезия (солей NaCl, CsCl) в водородно-кислородном пламени при напряженности магнитного поля 10 кЭ. Рассчитаны интенсивности свечения линий натрия (D1: $3^2P_{1/2} - 3^2S_{1/2}$ и D2: $3^2P_{3/2} - 3^2S_{1/2}$) и линий цезия (1: $6^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$ и 2: $7^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$). Максимальная величина магнитного эффекта для линии D2 атома натрия в случае σ-поляризации равна 2, а в случае π-поляризации — 1,5, а для линии D1 максимальное значение составляет 1,6 и одинаково для обеих поляризаций, что находится в согласии с экспериментальными данными.

В настоящее время значительный интерес вызывает изучение эффектов сильного взаимодействия атомных и молекулярных систем с сильными внешними полями, в частности, электрическим, магнитным, лазерным (см. напр. [1-15]). К числу эффектов, требующих дальнейшего теоретического и экспериментального исследования относится явление увеличения интенсивности свечения атомов в сильном магнитном поле в условиях полного поглощения в центре линии. Известный пример — превышение светимости солнечных пятен в лучах Na, Ca+ над светимостью диска Солнца, что, по видимому, связано с эффектом просветления среды в магнитном поле ~4,5 кЭ. В работах Хаяши и сотр. (см. [1]) исследовалась флюоресценция добавок неорганических солей в пламена при атмосферном давлении и был обнаружен эффект влияния внешнего магнитного поля H на интенсивность свечения промежуточных частиц. Для радикала OH в магнитном поле 18 кЭ интенсивность свечения увеличивалась на 14%, а для атома натрия — в 2,5 раза. Соли натрия вводились в пламя диспергированием водных растворов в токе азота. Экспериментально измерялся магнитный эффект, т.е. отношение I(H)/I(0) интенсивности свечения в магнитном поле напряженностью H к интенсивности свечения без магнитного поля. Хаяши и сотр. было показано, что для солей типа NaCl магнитный эффект растет с ростом концентрации (с) соли в растворе, а солей типа NaNO₂, наоборот, магнитный эффект падает. Сорокиным и др. [1] экспериментально изучалось влияние магнитного поля

на интенсивность свечения атомов щелочных металлов: натрия и цезия в пламени. Соответствующий аэрозоль получали насыщением потока азота парами солей NaCl, CsCl. Исследовалось влияние магнитного поля напряженности 10 кЭ на интенсивность свечения резонансной линии натрия (D1: $3^2P_{1/2} - 3^2S_{1/2}$ и D2: $3^2P_{3/2} - 3^2S_{1/2}$). Изменялась интенсивность излучения D2 линии атома натрия в σ - и π -поляризациях. Область изменения давления натрия: $10^{-5} \div 5 \cdot 10^{-4} \text{ Torr}$. Для линии D2 в случае σ -поляризации максимальная величина магнитного эффекта равна 2, а в случае π -поляризации — 1,5. В случае линии D1 максимальное значение составляет 1,6 и одинаково для обеих поляризаций. Для атома цезия измерения проводились на двух длинах волн: 8521 Å и 4555 Å (1: $6^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$ и 2: $7^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$ соответственно). Область изменения давления цезия: $2 \cdot 10^{-5} \div 15 \cdot 10^{-5} \text{ Torr}$. В таблице приведены соответствующие данные по магнитному эффекту для обеих линий. Примечательно, что для линии цезия 4555 Å с точностью до 7% магнитное поле не изменяло интенсивность свечения (в случае равновесности процессов это свидетельствовало о неизменности концентрации атомов Cs в пламени).

В [11-15] развит новый метод расчета характеристик атомов во внешнем магнитном поле, включая энергии и ширины зеемановских резонансов, а также базис волновых функций. В данной работе на его основе выполнен расчет влияния магнитного поля на интенсивности свечения атомов щелочных металлов: натрия и цезия (солей NaCl, CsCl) в водородо-кислородном пламени при напряженности магнитного поля 10 кЭ для линий натрия (D1: $3^2P_{1/2} - 3^2S_{1/2}$ и D2: $3^2P_{3/2} - 3^2S_{1/2}$) и линий цезия (1: $6^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$; 2: $7^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$). Интенсивность I рассматриваемого перехода i - j связана с концентрацией атомов (определяется соответствующей константой диссоциации; см. [1,3]) и силой линии S :

$$S = 3\hbar e^2 g_1 f_{i-j} / 2m\omega_0$$

Здесь $\omega_0 = E_i - E_j$ — частота перехода, а f_{i-j} — сила осциллятора перехода i - j дается стандартным выражением:

$$f_{i-j} = 2m / \hbar^2 (E_i - E_j) |\langle \Psi_j | D | \Psi_i \rangle|^2$$

Разумеется, интенсивности σ -компонент, пропорциональны квадратам $3j$ -символов:

$$\begin{pmatrix} \dots J \dots 1 \dots J' \\ -M \dots 1 \dots M-1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \dots J \dots 1 \dots J' \\ -M \dots -1 \dots M+1 \end{pmatrix},$$

а π -компонент:

$$\begin{pmatrix} \dots J \dots 1 \dots J' \\ -M \dots 0 \dots M \end{pmatrix}$$

Волновые функции состояний рассчитывались путем численного решения уравнения Шредингера для атомов в магнитном поле [11-15]. В таблице представлены данные расчета влияния магнитного поля на интенсивность свечения D2 линии атома натрия в σ - и π - поляризациях в зависимости от парциального давления атомов натрия в пламени, где $I(H)/I(0)$ — отношение интенсивности свечения в магнитном поле с напряженностью H к интенсивности свечения без магнитного поля; p - парциальное давление ($10^{-5}, Torr$).

$I(H)/I(0) \setminus p$		5	10	20	25	35
σ - поляризация	[1]	1,22	1,51	2,15	2,1	1,55
	наст.р-та	1,19	1,48	1,94	1,86	1,41
π - поляризация	[1]	—	—	1,52	—	—
	наст.р-та	1,13	1,24	1,45	1,44	0,88

В первом случае максимальная величина магнитного эффекта $I(H)/I(0)$ равна 1.9, а во втором — 1.45, что согласуется с данными [1]. В случае линии D1 атома натрия расчетное значение максимального магнитного эффекта — 1.5, что разумно согласуется с экспериментальной оценкой 1,6. Для атомов цезия магнитное поле увеличивает интенсивность свечения линии 8521А в 1,3 раза (эксперимент дает множитель 1,5). Следует отметить, что, по-видимому качество расчета базиса волновых функций для атома цезия оказалось хуже, чем для атома натрия. В заключение заметим, что при рассмотрении большего числа линий и оценке изменения энергий уровней, сил осцилляторов, интенсивностей излучения в магнитном поле в зависимости от величины последнего будет наблюдаться достаточно сложная картина с многочисленными пересечениями (квази- пересечениями) и другими свидетельствами нарушения регулярной динамики.

Литература

1. Сорокин Н.И., Дульцев Е.Н., Бажин Н.М. Влияние магнитного поля на интенсивность свечения атомов щелочных металлов в водородно-кислородном пламени// Химическая физика. — 1988. — Т.7, №1. — С.100-103.
2. Kuklina I.V. Influence of magnetic field on the Radiation Intensity of Alkali atoms in the hydrogen-oxygen flame//Proc. European Science Foundation REHE School and Workshop on «Spin-Orbit Coupling in Chemical Reactions». — Torun (Poland). — 1998. — P.18.
3. Касабов Г.А., Елисеев В.В. Спектроскопические таблицы низкотемпературной плазмы. — М.: Атомиздат, 1973. — С.160.

4. Собельман И. Введение в теорию атомных спектров. — М.:Наука,1977. — С.213
5. D.Kleppner, I.Chun-Ho, G.R.Welch, In: Irregular Atomic Systems and Quantum Chaos/ Ed. J.C.Gay (Kluwer, N-Y.,1990).
6. Benvenuto F., Casati G., Shepelyansky D.L. Rydberg Stabilization of atoms in strong fields: “magic” mountain in chaotic sea // *Z. Phys. B.* — 1994. — Vol.94. — P.481-486.
7. Dupret K., Zakrzewski J., Delande D. Resonances in the Diamagnetic Rydberg Spectrum: Order and Chaos// *Europhys. Lett.* — 1995. — Vol.31,N5-6. — P.251-256.
8. Glushkov A.V., Ivanov L.N. Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge noninvariant contributions// *Phys. Lett.A.* — 1992. — Vol.170, N1. — P.33-37.
9. Glushkov A.V.,Ivanov L.N. DC Strong-Field Stark-Effect: consistent quantum-mechanical approach// *J. Phys. B: At.Mol.Opt.Phys.* — 1993. — Vol.26,N16. — P.L379-L386.
10. Glushkov A.V.,Ivanova E.P. Theoretical Study of Multicharged Ions Spectra of Na,Ne Isoelectronic Sequence// *J. Quant. Spectr. Rad.Transfer.* — 1986. — Vol.36, N2. — P.127-145.
11. Kuklina I.V., Shevchuk V.G. H-like and He-like Systems in Super strong magnetic field: Numerical Calculation // *Науковий Вісник Ужгородського університету. Серія Фізика.* — 2000. — Т.8,Ч.2. — С.361-364.
12. Kuklina I.V. H-like and He-like Systems in Super strong magnetic field: Numerical Calculation// *Proc. International Conf. “Elementary Processes in Atomic Systems”.* — Uzhgorod (Ukraine). — 2000. — P. 114.
13. Kuklina I.V. Multielectron systems in superstrong magnetic field. Density functional calculations// *Proc. International Conf. on Applied Density Functional Theory.* — Vienna (Austria). — 2001. — P.94.
14. Glushkov A.V., Kuklina I.V., Boulham B. Chaos and regular dynamics of complex atomic systems in magnetic field// *Proc. XVII International Conf. On Atomic Physics.* — Firenze (Italy). — 2000. — P.517-518.
15. Glushkov A.V., Kuklina I.V., Boulham B. Chaos and regular dynamics of complex atomic and molecular systems in magnetic and laser field// *Proc. International Satellite Seminar of ICAP’5 “Atoms, Molecules and Quantum Dots in Laser fields: Fundamental Processes.* — Pisa (Italy). — 2000. — P.70-71.

I. В. Кукліна, В. П. Козловська

**Розрахунок інтенсивності свічення атомів лужних металів
у водне-кисневому пламені у присутності магнітного поля**

АННОТАЦІЯ

На підставі розвинутих раніше моделей розрахунку характеристик атомів у зовнішньому магнітному полі [11-15] виконано розрахунок впливу магнітного поля на інтенсивності свічення атомів лужних металів: Na, Cs у водне-кисневому полум'яні при напруженості магнітного поля 10 кЕ. Розраховані інтенсивності свічення ліній Na (D1: $3^2P_{1/2} - 3^2S_{1/2}$ и D2: $3^2P_{3/2} - 3^2S_{1/2}$) та Cs (1: $6^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$, 2: $7^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$). Максимальна величина магнітного ефекту для лінії D2 атому Na у випадку σ -поляризації складає 2, а у випадку π -поляризації — 1,5, а для лінії D1 максимальне значення складає 1,6 и однаково для обох поляризацій, що знаходиться у згоді з експериментальними даними.

Kuklina I. V., Kozlovska V. P.

**Calculation of emission intensity for alkali metals atoms
in the hydrogen-oxygen flame in a magnetic field**

SUMMARY

Influence of magnetic field on the intensity of emission for alkali atoms: Na, Cs (compounds NaCl, CsCl) in the hydrogen-oxygen flame under magnetic field strength (10kE) is studied on the basis of earlier developed method for calculation of the atomic characteristics in external magnetic field. The intensities of emission of the lines for Na (D1: $3^2P_{1/2} - 3^2S_{1/2}$ and D2: $3^2P_{3/2} - 3^2S_{1/2}$) and Cs (1: $6^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$ and 2: $7^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$) are calculated. The maximum value of the magnetic effect for D2 line of Na atom for σ -polarization is equal 2, for π -polarization — 1,5. For D1 line the maximum value is equal 1,6 for both polarizations. This value is in a reasonable agreement with experimental data.

Л. А. Витавецкая, С. В. Малиновская

Одесский государственный политехнический университет, г. Одесса

Особенности излучения лазерной плазмы ионов Th и U

Проведен анализ эксперимента по исследованию [1] излучения плазмы многозарядных ионов Th и U, принадлежащих изоэлектронным последовательностям CuI, ZnI (Laboratory for Laser Energetics, University of Rochester). На основе расчета в рамках различных версий теории возмущений представлены теоретические данные по спектральным характеристикам излучения лазерной плазмы.

В настоящее время значительный интерес вызывает изучение особенностей спектров оптического излучения лазерной плазмы металлов (см. напр., [1-3]). Подобный интерес стимулируется исключительной важностью определения характеристик как спектров излучения плазмы металлов и ее использования в качестве активных сред лазеров, так и оптических характеристик приповерхностной плазмы и ее взаимодействия с лазерным излучением. Значительное число работ посвящается в последние годы изучению различных стационарных состояний лазерной эрозионной плазмы (эрозионный факел, разряд в облаке продуктов эрозии и разряд в окружающем газе). Для высокотемпературного нагрева плазмы лазерным излучением применяются лазеры с различной длительностью импульса (10^{-12} – 10^{-7} сек). В случае, если длительность нагревающего импульса оказывается меньше характерных времен плазмы, таких как время разлета, время рекомбинации, время электрон-ионной термализации и т.д., процесс нагрева является нестационарным. Поскольку процессы ионизации и заселения уровней требуют определенных времен, искомая нестационарность должна проявляться в спектрах многократно ионизированных атомов. Особый интерес к нестационарному режиму нагрева плазмы возникает в связи с проблемой создания инверсной заселенности в далеком вакуумном ультрафиолете и мягком рентгене. Схема реализации подобного лазерного эффекта требует возбуждения высоколежащих уровней ионов достаточно низкой кратности ионизации, для чего в плазме должны быть достаточно быстрые электроны (высокая электронная температура) и ионы низкой кратности ионизации (достаточно низкая ионизационная температура). Подобные условия могут быть получены при нестационарном нагреве плазмы с использованием ультракоротких лазерных импульсов. Хотя возможности подобных экспериментов все время растут, проблема адекватного анализа и теоретической интерпретации особенностей излучения лазерной плазмы, создаваемой ультракороткими лазерными импульсами, по-прежнему еще далека от своего полного разрешения.

В данной работе проведен анализ экспериментальных данных [1] характеристик излучения многозарядных ионов Th и U, принадлежащих изоэлектронным последовательностям CuI, ZnI (Laboratory for Laser Energetics, University of Rochester) и на основе расчета в рамках модифицированных версий теории возмущений (ТВ) [4-9], в частности, квантово-электродинамической (КЭД) ТВ [8], релятивистской ТВ с неэмпирическим [9] модельным нулевым приближением, дана теоретическая интерпретация искомым спектров. В [1] экспериментально исследовались спектры плазмы, создаваемой лазерными импульсами (длина волны 351 nm) OMEGA лазера. Энергия каждого импульса ~60 Дж и последовательность следования 460 псек. Интенсивность сфокусированного лазерного луча варьировалась от 10^{15} до $5 \cdot 10^{16} \text{ W/cm}^2$. Спектры измерялись в области 9-112 Å. В таблице приведены измеренные (А) [1] и рассчитанные длины волн (в Å) для переходов в многозарядных ионах Th, U. Расчеты выполнены на основе КЭД теории возмущений (версия [8] — (В) колонка в табл.) и релятивистской теории возмущений (версия [9] — (С) колонка в табл.). Базис нулевого приближения ге-

Измеренные и рассчитанные длины волн (в Å) для переходов в Cu-,Zn- подобных ионах Th, U

Изо-серия	Переход	$Th^{62+} - Th^{63+}$			$U^{62+} - U^{63+}$		
		А	В	С	А	В	С
CuI	$4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{3/2}$	28,99	28,91	28,92	26,40	26,33	26,36
	$4p^2P_{1/2} - 4d^2D_{3/2}$	25,18	25,16	25,17	----	22,76	22,80
	$4p^2P_{3/2} - 4d^2D_{5/2}$	46,83	46,80	46,82	----	44,35	44,38
ZnI	$4d^2D_{5/2} - 4f^2F_{7/2}$	-----	53,23	53,21	----	50,75	50,70
	$4s^2^1S_0 - 4s4p^1P_1$	28,70	28,67	28,69	26,17	26,11	26,13

нерировался решением релятивистского уравнения Дирака с потенциалом, включающим потенциал атомного остова, электрический и поляризационный потенциалы сферически симметричного ядра. Магнитное меж-электронное взаимодействие учитывалось в низшем (по параметру α^2) приближении, поляризационная часть сдвига Лэмба — в приближении Улинга-Сербера, собственно — энергетическая часть сдвига Лэмба эффективно с использованием точных расчетов Мора для H-подобных ионов с точечным ядром. В методе [8] в отличие от [9] используется аппарат функций Грина для уравнения Дирака с несингулярным потенциалом. В то же время в версии [9] более аккуратно учтены ядерные и КЭД поправки. Важным выводом проведенных расчетов является тот факт, что включение процедур учета КЭД

поправок (поляризация вакуума 2 порядка, собственно-энергетическая поправка и т.д.) в расчетную схему теории возмущений позволило значительно повысить точность расчета. Однако значительное расхождение между измеренными и рассчитанными значениями длин волн излучения остается.

Литература

1. Seely J.F., Ekberg J.O. Brown C.M. et al, Laser –Produced Spectra and QED Effects for Fe-, Co-, Cu-, Zn-like ions of Au, Pb, Bi, Th, and U// Phys. Rev. Lett. — 1996. — Vol.57,N23. — P.2924-2926.
2. Бык А.П., Гончаров В.К., Карабань В.И. и др. Взаимодействие излучения Nd лазера с тугоплавкими металлами // Журн. прикл. спектр. — 1989. — Т.50. — С.571-575.
3. Glushkov A.V. Deuterium lines spectra analysis in Tokamak// Proc.24th Europ. Conf. on Thermonucl. Fusion& Plasma Phys.- Garching (Germany). — 1996. — P.95.
4. Glushkov A.V.,Ivanova E.P. Theoretical Study of Multicharged Ions Spectra of Na,Ne Isoelectronic Sequence// J. Quant. Spectr. Rad. Transfer. — 1986. — Vol.36, N2. — P.127-145.
5. Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E. High order corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the model Zeroth Approximation // Phys.Scripta — 1985. — Vol.32,N4. — P.512-524.
6. Глушков А.В. Отрицательные ионы инертных газов// Письма в ЖЭТФ. — 1992. — Т.55, N2 — С.104-107;
7. Glushkov A.V., Ivanov L.N. Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge noninvariant contributions// Phys. Lett. A. — 1992. — Vol.170, N1. — P.33-37.
8. Malinovskaya S.V. S-matrix formalism in the calculation of oscillator strengths, radiation and autoionization widths for complex atoms and multicharged ions// Науковий Вісник Ужгородського університету.Серія Фізика. — 2000. — Т.8,Ч.2. — С.387-391.
9. Glushkov A.V., Vitavetskaya L.A. Accurate QED perturbation theory calculation of the structure of heavy and superheavy elements atoms and multicharged ions with account of nuclear size effect and QED corrections// Науковий Вісник Ужгородського університету.Серія Фізика. — 2000. — Т.8,Ч.2. — С.321-326.

Л. А. Вітавецька, С. В. Маліновська
**Особливості випромінювання радіації
лазерної плазми іонів Th і U**

АНОТАЦІЯ

Проведено аналіз експерименту по дослідженню випромінювання плазми іонів Th і U, які належать до ізоелектронної серії CuI, ZnI (Laboratory for Laser Energetics, University of Rochester). На основі розрахунку в межах різних версій теорії збурень представлені теоретичні дані по спектральним характеристикам випромінювання лазерної плазми іонів Th, U.

Vitavetskaya L. A., Malinovskaya C. V.
**Especialities of radiation for the laser plasma
of the Th, U ions**

SUMMARY

It is carried out an analysis of experiment (Laboratory for Laser Energetics, University of Rochester) on study of multicharged ions Th and U (isoelectronic sequences of Cu and Zn) plasma radiation. There are presented theoretical data on spectral characteristics of the laser plasma radiation, received on the basis of calculation within different versions of the perturbation theory method.

Ю. Г. Чернякова, И. И. Шумлянский, Г. П. Препелица

Одесская государственная академия связи им. А.С.Попова, г.Одесса

Особенности сателлитной структуры линий излучения плазмы железа в малоиндуктивной вакуумной искре

Проведен анализ экспериментов [1] по изучению сателлитной структуры спектров, характеристик излучения плазмы железа в мало индуктивной вакуумной искре. Приведены результаты теоретического изучения характеристик Li-подобных сателлитных линий плазмы железа на основе расчета методом релятивистской теории возмущений с модельным нулевым приближением [9].

В настоящее время значительное внимание уделяется экспериментальному и теоретическому изучению характеристик плазмы многозарядных ионов в мало индуктивной вакуумной искре (см. напр., [1-9]). Подобное внимание стимулируется во многом важностью усовершенствования существующих и развития новых оптимальных методик спектроскопической диагностики плазмы многозарядных ионов как примесей в термоядерных реакторах, активных сред для лазеров коротковолнового диапазона и т.д. Хотя возможности подобных экспериментов все время растут, проблема адекватного анализа и теоретической интерпретации особенностей излучения плазмы в мало индуктивной вакуумной искре по-прежнему еще далеки от своего полного разрешения. В данной работе проведен анализ экспериментов [1,4] по изучению сателлитной структуры спектров, характеристик излучения плазмы железа в мало индуктивной вакуумной искре. Приведены результаты теоретического изучения характеристик Li-подобных сателлитных линий плазмы железа на основе расчета методом релятивистской теории возмущений с модельным нулевым приближением возмущений [9]. В [1-4] экспериментально исследовались спектры излучения плазмы железа в малоиндуктивной вакуумной искре. Последняя использовалась как источник многозарядных ионов. По сути, источник, так называемая горячая точка представляет собой плотную ($N_e \sim 10^{23} \text{ cm}^{-3}$), высокотемпературную плазму ($T_e \sim 2-3 \text{ keV}$) очень малого размера ($1 \mu\text{m}$) и временем жизни (10^{-11} s). Движение горячей точки вызывает доплеровский сдвиг который в эксперименте исключается при использовании двух Johann спектрометров [4]. В плазме железа наблюдаются $1snp-1s^2$ резонансные линии He-подобных ионов с главным квантовым числом n от 3 до 6. Вблизи этих линий расположены сателлитные линии $1s^2 2l-1s 2l n l$ с $n=3,4$. В таблице приведены измерен-

ные (А) значения длин волн (в Å) Li-подобных линий диэлектронных сателлитов к $1s^2 1S_0 - 1s3p^1P_1$ линии излучения в плазме железа в низко индуктивной вакуумной искре[1].

Элемент	Переходы	Вероятность перехода			Длина волны перехода			Длина волны [2]
		B	C	D	B	C	D	
Fe	$1s^2 2p^2 P_{3/2} -$ $- 1s2p3p^2 D_{5/2}$	61,26	59,67	59,70	1,5933	1,5933	1,5934	1,5930± ±0,0005
	$1s^2 2p^2 P_{1/2} -$ $- 1s2p3p^2 D_{3/2}$	33,76	27,40	26,60	1,5931	1,5930	1,5935	
	$1s^2 2p^2 P_{3/2} -$ $- 1s2p3p^4 S_{3/2}$	4,88	7,58	14,68	1,5947	1,5946	1,5948	
	$1s^2 2p^2 P_{3/2} -$ $- 1s2p3p^4 P_{3/2}$	-----	5,49	-----	-----	1,5955	-----	
	$1s^2 2p^2 P_{3/2} -$ $- 1s2p3p^4 D_{5/2}$	-----	7,60	-----	-----	1,5953	-----	

В этой же таблице также представлены теоретические данные по длинам волн и силам осцилляторов, полученные на основе расчетов методами: (B) — теории возмущений (по 1/Z) [3], (C) — релятивистской теории возмущений с модельным нулевым приближением возмущений для трехквaziчастичных атомных систем [9] (настоящая работа) и (D) — методом AUTOJOLS [4]. Как видно из таблицы, теоретические и экспериментальное значение длины волны сателлитной линии достаточно хорошо согласуются друг с другом, в то время как значения вероятностей переходов, рассчитанные тремя методами существенно отличаются друг от друга. Разработанный нами (см. напр.[9]) новый неэмпирический метод — релятивистской теории возмущений с модельным нулевым приближением возмущений для расчета трехквaziчастичных атомных систем, как и в случае Na-подобных сателлитных линий к 2-3 линиям Ne-подобных ионов, оказывается достаточно эффективным и последовательным в задачах изучения излучения плазмы в мало индуктивной вакуумной искре.

Литература

1. Кошелев К.Н., Сидельников Ю.В., Вихров В.В., Иванов В.В. Микропинчи в малоиндуктивных вакуумных искрах и радиационное сжатие // Спектроскопия многозарядных ионов. — М.: Наука, 1991. — С.163-198.
2. Киселюс Р.С., Купляускене А.В., Рудзикас З.Б. Теоретические спектры излучения многозарядных ионов в плазме // Спектроскопия многозарядных ионов. — М.: Наука, 1991. — С.52-75.
3. Сафронова У.И., Аглицкий Е.В. Спектроскопия автоионизационных состояний. — М.:Атомиздат. — 1992.
4. Aglitskii E.V., Panin A.S., Safronova U.I. et al Theoretical and Experimental investigation of satellite structure of 1s[!!!ГРАФОБЪЕКТ!!!] line in He-like ions // Journ. de Phys. — 1988. — Vol.49, N3. — C1-267-C1-269.
5. Seely J.F., Ekberg J.O. Brown C.M. et al. Laser -Produced Spectra and QED Effects for Fe-, Co-, Cu-, Zn-like ions of Au, Pb, Bi, Th, and U// Phys. Rev. Lett. — 1996. — Vol.57, N23. — P.2924-2926.
6. Glushkov A.V.,Ivanova E.P. Theoretical Study of Multicharged Ions Spectra of Na,Ne Isoelectronic Sequence// J. Quant. Spectr. Rad. Transfer. — 1986. — Vol.36, N2. — P.127-145.
7. Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E. High order corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the model Zeroth Approximation // Phys. Scripta -1985. — Vol.32, N4. — P.512-524.
8. Malinovskaya S.V. S-matrix formalism in the calculation of oscillator strengths, radiation and autoionization widths for complex atoms and multicharged ions// Науковий Вісник Ужгородського університету.Серія Фізика. — 2000. — Т.8,Ч.2. — С.387-391.
9. Chernyakova Yu.G., Shumlyansky I.I. Relativistic perturbation theory calculation of the Na-like spectra satellites of 2-3 Ne-like ions transitions// Науковий Вісник Ужгородського університету.Серія Фізика. — 2000. — Т.8,Ч.2. — С.251-256.

Ю. Г. Чернякова , І. І. Шумлянський, Г. П. Препелиця

Особливості сателітної структури ліній випромінювання плазми железа у малоіндуктивній вакуумній іскрі

АНОТАЦІЯ

Проведено аналіз експериментів [1] по вивченню сателітної структури спектрів, характеристик випромінювання плазми железа у мало індуктивній вакуумній іскрі. Приведені результати теоретичного вивчення характеристик Li-подібних сателітних ліній плазми железа на основі розрахунку методом релятивістської теорії збурень з модельним нульовим наближенням.

Chernyakova Yu. G., Shumlyansky I. I., Prepelitsa G. P.

**Especialities of satelliter structure of lines for Fe plasma emission
in low inductive vacuum spark**

SUMMARY

It is carried out analysis of experiments on study of the spectra satellite structure in the Fe plasma emission characteristics on low inductive vacuum spark. There are presented the results of theoretical calculation of the Fe plasma Li-like satellite lines on the basis of the relativistic perturbation theory with model zeroth approximation for three-quasiparticle systems.

В. І. Маренков

Одеський національний університет ім. І. І. Мечникова

Пасивний електростатичний зонд у запиленій плазмі

В рамках моделі, заснованій на квазікласичному наближенні для електронного компоненту макроскопічного металевого тіла, контактуючого з плазмою, вирішено проблему термоіонізаційної рівноваги: “зонд — плазма”. Дано статистичне обґрунтування методу визначення рівня Фермі запиленої плазми (ЗП) шляхом порівнювання плаваючих потенціалів електростатичних зондів, що мають однакові розміри, але різні характеристики речовини. На базі даних комп’ютерної симуляції проаналізовано можливості методу щодо вимірів іонізаційних характеристик ЗП в актуальній для впроваджень області визначальних термодинамічних параметрів.

Значний інтерес щодо досліджень властивостей запиленої плазми [1] спричинюється, з одного боку, широким впровадженням плазмових технологій у виробництво, з іншого — у фундаментальному аспекті — бурхливим розвитком нового напрямку у фізиці: теорії та моделювання гетерогенних плазмових систем (ГПС) [2]. Проблеми експериментальної діагностики [3] та “зовнішніх впливів” (з метою оптимізації характеристик ГПС, що використовуються як робоче тіло або середовище у сучасних технологічних пристроях [4]) є безпосередньо спряженими з описом обміну електричним зарядом між ГПС та зовнішнім макроскопічними тілами — електричним зондом, розрядним або керуючим електродом, стінкою реакційної камери і т.і. — та найбільш актуальними для впроваджень, і, в той же час, найменш дослідженими.

Одна з них: заряд та потенціал пасивного зонду — пробного макроскопічного тіла, що контактує та знаходиться у рівновазі із запиленою плазмою (ЗП) — визначає мету та завдання даної роботи.

1. Сферичний металевий зонд у запиленій плазмі

Зазвичай лінійні розміри зондів, що використовуються для діагностики ЗП лежать в інтервалі [0.1, 10.0] мм та помітно перевищують як дебаєвську довжину електронного компоненту ЗП, так і лінійний розмір конденсованих частинок (КЧ), що їх ансамбль утворює пиловий компонент ЗП. Так наприклад для плазми продуктів згоряння алюмінізованих пальних [5] параметри ГПС лежать в області: температура $T \sim 2000$ К, розмір макрочастинок конденсованої дисперсної фази (КДФ) $r_p \sim 10^{-5}$ см, середньооб’ємна концен-

тація електронного компоненту $n_e \sim 10^{20} \text{ м}^{-3}$. Отже дебаєвська довжина електронів буде

$$r_D = \left(\frac{4\pi e^2}{kT} \cdot n_e \right)^{-1/2} \sim 10^{-5} \text{ м} \ll 1 \text{ мм} . \quad (1)$$

В розріджених системах, наприклад космічній ЗП [1, 6], ця нерівність може бути протилежною. Тому зосереджуючи увагу на головному: дослідженні зарядової рівноваги і стабільності зонду, що контактує з ГПС, розглядаємо у подальшому модель необмеженої ЗП, яку утворюють електрони, іони та заряджені частинки КДФ і яка перебуває в динамічній рівновазі (щодо обміну електронами) з пасивним сферичним металевим зондом радіуса R . Характеристики речовини зонду (енергія Фермі електронів провідності E_F^0 , діелектрична проникність ϵ_p та робота виходу W^0 металу зонду) покладаються відомими для заданої температури плазми T . Крім того, внесення пасивного зонду в необмежену ГПС ніяк не може вплинути на її характеристики “на нескінченості”: рівноважну концентрацію електронів запиленої плазми n_e , їх електрохімічний потенціал F , середній заряд індивідуальних макрочастинок КДФ у плазмі. Таким чином, у загальному випадку, визначення електрофізичних характеристик зонду (заряду та потенціалу, а також розподілу локального максвелівського електростатичного поля в його околі) зводиться до вирішення проблеми зарядової рівноваги індивідуальної сферичної макрочастинки в гетерогенному плазмовому середовищі — ЗП. Згідно з принципом детальної рівноваги [7] в термодинамічній рівновазі, кожен канал зміни зарядового стану зонду: емісія та прилипання газових електронів до зонду; іонізація та рекомбінація атомів та молекул на його поверхні; перерозподіл заряду між зондом та макрочастинками КДФ — є збалансованим дією протилежного йому каналу, і, загалом, у часі пасивний зонд зберігає з точністю до флуктуацій свій статистично середній заряд $q = z \cdot e$ (z — зарядове число, e — модуль елементарного заряду)[8]. Отже, в статистичній рівновазі співвідношення, що виражає факт балансу потоків електронів емісії та прилипання на поверхні зонду, може бути обраним у якості основного рівняння для опису його зарядової рівноваги з оточуючою ЗП. Пов’язавши з центром зонду систему координат Лагранжа та здійснюючи в ній статистичне (за ансамблем реалізацій системи: “ЗП та зонду”) осереднення миттєвого електростатичного потенціалу, що його визначено миттєвими конфігураціями зарядів у плазмі, отримуємо завдання про розподіл самоузгодженого електростатичного потенціалу та об’ємного заряду в околі та всередині зонду. Оскільки рівноважні параметри ЗП покладаються відомими, то при вирішенні проблеми основний акцент зосередимо на вирішенні “внутрішньої задачі” про розподіл самоузгодженого потенціалу та заряду у власному об’ємі

зонду. По аналогії з [2], рівняння Пуасона-Фермі (РПФ) для перенормованого за допомогою енергії Фермі речовини зонда потенціалу $\tilde{\Phi}(r) = \frac{e \cdot \phi(r)}{E_F^0}$ у сферичній, пов'язаній з його центром системи координат запишемо

$$\tilde{\Phi}'' + \frac{2}{r} \cdot \tilde{\Phi}' = - \frac{4\pi e \cdot \rho}{\epsilon_p \cdot E_F^0} \quad (2)$$

Тут ρ — густина об'ємного заряду в області зайнятій зондом, у наближенні Томаса-Фермі для електронів провідності металу визначається [8]

$$\rho(r) = \frac{1}{3\pi^2} \cdot \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \cdot E_F^0 \right)^{3/2} \cdot \left\{ 1 - \left[1 + \frac{F - F^0}{E_F^0} + \tilde{\Phi}(r) \right]^{3/2} \right\}; \quad (3)$$

m_e — маса електрона; $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h — постійна Планка; F — електрохімічний потенціал ЗП; F^0 — електрохімічний потенціал матеріалу зонда ($F^0 = -W^0$). Враховуючи симетрію завдання та збереження зондом деякого усталеного розподілу внутрішнього самоузгодженого потенціалу $\tilde{\Phi}(r)$, доповнимо РПФ (2) граничними умовами

$$\tilde{\Phi}(0) = \tilde{\Phi}_0; \quad \tilde{\Phi}'(0) = 0; \quad (4)$$

Приходимо кінцево до задачі Коши (2 — 4) щодо визначення поля $\tilde{\Phi}$ в об'ємі зонду. В праву частину РПФ входить густина об'ємного заряду $\rho(r)$ (3), яка самоузгодженим чином пов'язана з локальними значеннями потенціалу, позаяк його значення безпосередньо входять до граничних умов (4). Отже для остаточного визначення розподілу потенціалу в об'ємі зонду необхідно скористуватись умовами зарядової стабільності зонду у плазмі, що, по-перше, впливають із закону збереження заряду та дають умову неперервності нормальної складової електростатичної індукції на поверхні зонду; по-друге, виражають факт балансу потоків електронів через його поверхню. Математично це зводиться до умов спряження самоузгодженого потенціалу на поверхні зондуючого тіла. Поставлене таким чином завдання має єдиний розв'язок щодо розподілу самоузгодженого потенціалу всередині та околі зонду та однозначно вирішує проблему його електростатичної зарядки. Загалом задача Коши (2 — 4) не має розв'язків у квадратурах і потребує залучення методів обчислювальної математики. Однак, для більшості видів термічної ЗП електростатична енергія електронів в контактному шарі зонду є за модулем набагато меншою енергії Фермі речовини зонду, при цьому по-

тенціал $|\tilde{\Phi}| \ll 1$, і вираз (3) для об'ємного заряду допускає лінеаризацію за потенціалом. Не обмежуючись у загальному, в наступному розділі розглянемо вирішення проблеми зарядки електростатичного зонду з використанням лінійної апроксимації за потенціалом для правої частини РПБ.

2. Система рівнянь зарядової рівноваги зонду в плазмовому середовищі

Запилена плазма є неупорядкованим середовищем, у якому в системі координат зонду розподіли концентрацій заряджених частинок (електронів, іонів, КЧ) покладаємо підпорядкованими максвел-больцманівській статистиці. Зауваження: У випадку нерівноважних процесів та дії джерел термостату, питання про розподіл зарядів в газовій підсистемі ЗП потребує окремого дослідження. В нерівноважній ЗП, яка характеризується стаціонарним полем термодинамічних параметрів в об'ємі, виходячи з принципу локальної термодинамічної рівноваги (ЛТР) Кубо [8], формули рівноважної термодинаміки необхідно використовувати для областей ЛТР разом з подальшим осередненням (з врахуванням градієнтів) на макрооб'єми. Потенціал зонда та концентрація електронів у приповерхневому шарі його максвел-больцманівської атмосфери пов'язані співвідношенням [10]

$$n_e(R) = n_{e0} \cdot \exp[e\Phi^e(R)/kT]; \quad (5)$$

n_{e0} — локальна концентрація електронів в областях де самоузгоджений потенціал обертається до нуля (в дебаєвських моделях екранування в ЗП співпадає з середньооб'ємною); $\Phi^e(R)$ — “зовнішній” потенціал поверхні зонда відрахований від рівня вакууму (рівня потенціальної енергії електрона, що покоїться у вакуумі при відсутності зовнішніх полів). В моделі необмеженої слабкоіонізованої ЗП, утвореної електронами, іонами, ідентичними КЧ та буферним газом [5], рівняння Пуасона-Больцмана для розподілу самоузгодженого електростатичного потенціалу в зовнішній відносно власного об'єму зонда області має дебаєвський розв'язок

$$\Phi^e(r) = \Phi^e(R) \cdot \exp[-\rho_D \cdot (r-R)]/r, \quad (6)$$

де: $\Phi^e(r) = e \cdot \Phi^e(r)/E_F^0$ — нормований на енергію Фермі речовини зонда потенціал;

$$\rho_D = \left\{ \frac{4\pi e^2}{kT} \cdot \left(n_{e0} + n_{i0} + \sum_j z_j^2 \cdot n_{pj} \right) \right\}^{1/2} \quad (7)$$

інвертована дебаєвська довжина зарядів плазми, n_{e0}, n_{i0}, n_{pj} — відповідно середньооб'ємні злічені концентрації електронів, іонів та макрочастинок сорту “j”; z_j — осереднене зарядове число “j — і” КЧ;

$$\Phi^e(R) = \Phi_p^e = \frac{Z \cdot e^2 / E_F^0}{\epsilon_G \cdot R \cdot (1 + \rho_D \cdot R)} \quad (8)$$

значення потенціалу поверхні зонду, отримане із “зовнішньої задачі” (ze — заряд зонду, ϵ_G — діелектрична проникність буферного газу). В умовах статистичної рівноваги заряд зонду та його потенціал досягають певних сталих величин, які визначаються параметрами плазми і характеристиками зонду та є незалежними від предисторії їх встановлення. Неперервність самоузгодженого електростатичного потенціалу та нормальної складової електростатичної індукції на поверхні зонда є фізичними умовами, що в кінцевому підсумку дають змогу записати функціональні співвідношення між параметрами запиленої плазми та рівноважними значеннями заряду і потенціалу зонда. Оскільки електрони поверхневого (контактного) шару зонду знаходяться в стані динамічної рівноваги з електронним компонентом ЗП, то, згідно з відомим положенням статистичної теорії [10], локальний електрохімічний потенціал електронної підсистеми повинен бути однорідним впродовж ЗП і мати певне усталене значення F . Концентрація електронів на нескінченості, де їх потенціальна енергія покладається нульовою, буде

$$n_{e0} = 2 \cdot \left(\frac{2\pi m_e \cdot kT}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \exp\left(\frac{F}{kT}\right) = n_\sigma \cdot \exp\left(\frac{F}{kT}\right). \quad (9)$$

Поблизу поверхні зонда у відповідності з больцманівським розподілом (5)

$$n_{es} = n_e(R) = n_\sigma \cdot \exp\left(\frac{F + \Phi_p^e \cdot E_F^0}{kT}\right). \quad (10)$$

Поверхнева концентрація електронів газової фази (10) утворює потік електронів прилипання, який врівноважується електронами емісії, що інжектуються поверхнею зонду у газову фазу. Динамічна рівновага цих потоків реалізується для певного значення заряду зонда Z , і є умовою його зарядової стійкості. Розв’язок задачі Коши (2 — 4) з використанням лінійної апроксимації для правої частини РПФ (2) за “внутрішнім потенціалом” $\Phi(r)$ доцільно проводити в термінах допоміжних змінних

$$x = \rho_F \cdot r; \rho_F = \sqrt{\frac{2e^2}{\pi\epsilon_p} \cdot \left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot (E_F^0)^{1/2} \cdot (1 + \tilde{F} - \tilde{F}^0)}; \quad (11)$$

$$y = x \cdot [\Phi(x) + \tilde{\alpha}] \tilde{\alpha} = \frac{2}{3} \left\{ \left(1 + \frac{F - F^0}{E_F^0}\right) - \left(1 + \frac{F - F^0}{E_F^0}\right)^{-1/2} \right\}.$$

В (11) і далі позначкою “~” відмічасмо нормування “енергетичних” величин на E_F^0 . У змінних (11) задача Коши для розподілу самоузгодженого потенціалу в об’ємі зонда має вид

$$y'' - y = 0; y(0) = 0; y'(0) = \Phi_0 + \tilde{\alpha}; \quad (12)$$

Загальний розв’язок (12) буде

$$y(x) = (\Phi_0 + \tilde{\alpha}) \cdot shx. \quad (13)$$

Таким чином, повертаючись до вихідних змінних (r, Φ) , запишемо

$$\Phi(r) = (\Phi_0 + \tilde{\alpha}) \cdot \frac{sh(\rho_F \cdot r)}{(\rho_F \cdot r)} - \tilde{\alpha}. \quad (14)$$

Функція (14) описує розподіл самоузгодженого електростатичного потенціалу всередині зонду. Із умови спряження для нормальної похідної потенціалу Φ на поверхні сферичного зонду отримаємо

$$\frac{\partial \Phi}{\partial r} \Big|_R = \frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dr} \Big|_R = (\Phi_0 + \tilde{\alpha}) \cdot \frac{x \cdot chx - shx}{x^2} \cdot \rho_F \Big|_{x_p} = -\epsilon_G \cdot \frac{Z \cdot e^2}{\epsilon_p \cdot R^2 \cdot E_F^0}. \quad (15)$$

Формула (15) встановлює зв’язок між потенціалом Φ_0 в центрі зонду та його зарядовим числом Z . З умови неперервності електростатичного потенціалу на поверхні зондуючого тіла (умови спряження “зовнішнього” — (8), та “внутрішнього” — (14), потенціалів (після підстановки $(\Phi_0 + \tilde{\alpha})$ з (15) в (14)) кінцево отримуємо трансцендентне рівняння для потенціалу поверхні зонду як функції заряду та визначальних параметрів ЗП

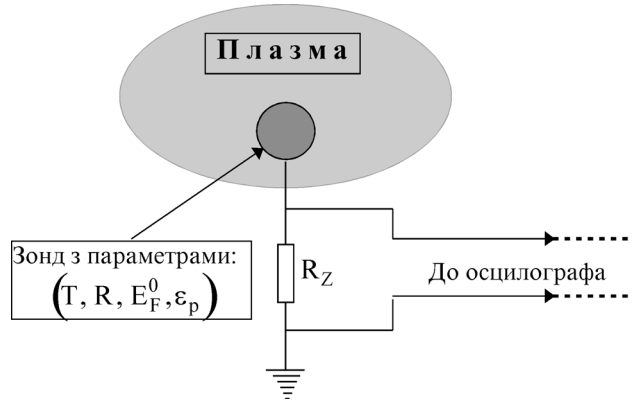
$$\Phi_p^e + \tilde{\alpha} + \tilde{F}^0 - \tilde{E}_F^0 + \frac{Ze^2 \epsilon_G}{R \cdot \epsilon_p \cdot E_F^0} \cdot \frac{sh(\rho_F R)}{\rho_F R \cdot ch(\rho_F R) - sh(\rho_F R)} = 0. \quad (16)$$

Для певного значення електродімічного потенціалу (рівня Фермі) електронів плазми F рівняння (16) встановлює однозначний зв’язок між потенціалом Φ_p^e та зарядом $Z \cdot e$, що їх набуває зонд в результаті взаємодії з плазмовим середовищем. Незалежні експериментальні виміри цих величин дозволили б, шляхом вирішення оберненої задачі (16) для рівня Фермі ЗП, за допомогою рівняння (9) отримати з даних експерименту невідоме значення електронної концентрації в об’ємі запиленої плазми. У розділі 3 обговорюються можлива принципова схема та деталі експерименту з визначення рівня іонізації ЗП з використанням двох пасивних зондів.

3. Обчислювальний експеримент та двозондова методика вимірювань

Параметри ізолюваного металевого зонду в запиленій плазмі можна експериментально визначити, ґрунтуючись на класичній методиці зондових вимірювань [3], у якій пасивний зонд з'єднується з землею через дуже великий опір R_Z , такий, щоб струм витoku практично не змінював рівноважні параметри зонду, і в той же час був достатнім для вимірів падіння напруги на R_Z (мал. 1). Різниця потенціалів між поверхнею зонду та землею за вирахуванням термоелектричних падінь напруги, що виникають у з'єднувальних провідниках, дає так званий "плаваючий потенціал" зонду, що контактує з плазмою [5]. В умовах слабоіонізованої дебаєвської ЗП осереднене за часом значення потенціалу зонда з одного боку обчислюється за формулою (8), з іншого — може бути визначеним з рівняння (16). Оскільки в дебаєвському наближенні потенціал (8) є функцією від заряду та радіуса зонда, а також енергії Фермі та діелектричної проникності його речовини, то помістивши в плазму два незалежних зонди, виготовлених з різних металів, але такі, що мають однаковий геометричний розмір, базпосередньо з формул (8) та (16) отримаємо

$$\frac{\Phi_{p1}^e}{\Phi_{p2}^e} = \frac{Z_1}{Z_2} \cdot \frac{E_{F2}^0}{E_{F1}^0} = \frac{\tilde{\alpha}_1 + \tilde{F}_1^0 - \tilde{E}_{F1}^0 + \frac{Z_1 \cdot e^2 \cdot \epsilon_G}{\epsilon_{p1} \cdot R \cdot E_{F2}^0} \cdot \frac{sh(\rho_{F1}R)}{\rho_{F1}R \cdot ch(\rho_{F1}R) - sh(\rho_{F1}R)}}{\tilde{\alpha}_2 + \tilde{F}_2^0 - \tilde{E}_{F2}^0 + \frac{Z_2 \cdot e^2 \cdot \epsilon_G}{\epsilon_{p2} \cdot R \cdot E_{F2}^0} \cdot \frac{sh(\rho_{F1}R)}{\rho_{F2}R \cdot ch(\rho_{F2}R) - sh(\rho_{F1}R)}} \quad (17)$$



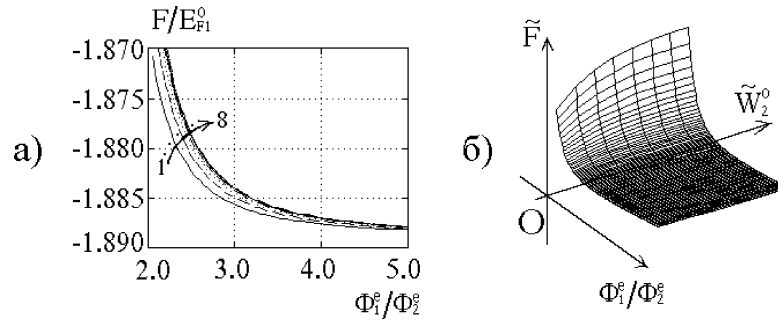
Мал. 1. Схема зондових вимірювань у запиленій плазмі.

Для металів $\rho_F \sim 10^7 - 10^8 \text{ см}^{-1}$, і останніми доданками в чисельнику та знаменнику даної формули можна знехтувати. В результаті остаточно, в рамках пропонованої двозондової методики, отримуємо рівняння для визначення рівня Фермі ЗП

$$\Psi(F) = \left\{ \frac{\tilde{\alpha}_1 + \tilde{F}_1^0 - \tilde{E}_{F1}^0}{\tilde{\alpha}_2 + \tilde{F}_2^0 - \tilde{E}_{F2}^0} - \frac{\Phi_{p1}^e}{\Phi_{p2}^e} \right\} = 0. \quad (18)$$

Електрохімічний потенціал F , що входить як невідоме в трансцендентне рівняння (18), згідно з формулою (9) є безпосередньо пов'язаним з рівнем іонізації плазми n_{e0} . Отримавши потенціали незалежних зондів Φ_{p1}^e, Φ_{p2}^e в експерименті, шляхом розв'язку рівняння (18) отримуємо невідомий рівень Фермі електронів F у запиленій плазмі.

В рамках викладеного методу, на основі програми розв'язку трансцендентних рівнянь PNFFM [5], було проведено комп'ютерну симуляцію щодо визначення іонізації ЗП в широкому діапазоні її термодинамічних параметрів, що є характерними для впроваджень. На мал. 2а та 2б наведено графіки залежностей безрозмірного (нормованого на енергію Фермі речовини зонду "1") F , як функції відношення плаваючих потенціалів, отримані на основі даних обчислювального експерименту. Радіуси сферичних зондів поклалися однаковими, причому такими, що $\rho_F \cdot R \gg 1$ (для зондів з $R \geq 0.01$ мм відносна похибка, яку вносять відкинуті в (17) доданки, вже не перевищує 10^{-5}). Роботи виходу металів, що з них виготовлено зонди, та енергії Фермі електронів провідності обирались з інтервалу $[2.0, 15.0]$ еВ, який охоплює практично всі відомі значення цих величин для твердих матеріалів [12]. Якійсно графіки електрохімічного потенціалу ЗП, як це видно з мал. 2, є подібними, і із збільшенням різниці робіт виходу речовини зондів мають тенденцію до зростання (див. зміщення кривих 1÷8 у напрямку стрілки — мал. 2а, та відповідні трансформації просторового графіку впродовж осі $O\tilde{W}_2^0$ на мал. 2 б). Таким чином, для більш точних вимірів F в двозондовій методиці необхідно використовувати зонди з металів, які якомога більше відрізняються за роботою виходу. Оскільки в термічній гетерогенній плазмі електростатичний потенціал пасивного зонду буде $kT \ll E_F^0$, то даний метод вимірювань рівня Фермі є безпосередньо застосовним для багатьох видів ЗП у впровадженнях. Вирішуючи нелінійні рівняння (РПБ та РПФ), запропонований метод можна поширити і на область станів неідеальної плазми з пиловими частинками в об'ємі [12,13], а також узагальнити, з використанням ЛТР-підходу [14], для опису нерівноважних станів термоіонізації стаціонарної ЗП, які підтримуються за рахунок дії джерел термостату.



Мал. 2. Значення безрозмірного рівня Фермі електронів ЗП, нормованого на енергію Фермі базового зонду E_{F1}^0 . Графіки відображують варіант обчислювального експерименту для підпростору визначальних параметрів ЗП: ($E_{F1}^0, E_{F1}^0, W_1^0 = 4.5, 4.6, 4.0$ еВ; $W_2^0 \in [4.2, 5.8]$ еВ; $\Phi_{p1}^e/\Phi_{p2}^e \in [2, 5]$)

Література

1. Цытович В. Н. Плазменно-пылевые кристаллы, капли и облака//Успехи физических наук. — 1997. — Т. 167, № 1, С. 57-99.
2. Маренков В.І. Вплив електронних та діелектричних властивостей металу на іонізацію гетерогенної плазми, утвореної буферним газом та ансамблем емітуючих металевих макрочастинок// Вісник ОДУ. — Одеса, 2000, Т.5, Вип.3, — С. 202-208.
3. Чан П. и др. Электрические зонды в неподвижной и движущейся плазме: (теория и применения/ П. Чан, Л Т?лбот, К. Турян . — М.: Мир, 1978. — 201 с.
4. Павлов Т. А. Процессы переноса в плазме с сильным кулоновским взаимодействием. — М.: Энергоатомиздат, 1995. — 192 с.
5. Маренков В.И., Чесноков М.Н. Физические модели плазмы с конденсированной дисперсной фазой. — Киев: УМК ВО, 1989, 188 с.
6. Смирнов Б.М. Кластерная плазма. — УФН, 2000, Т. 170, ? 5, — С. 495-534.
7. Кайзер Д. Статистическая термодинамика неравновесных процессов. — М.:Мир, 1990. — 608 с.
8. Кубо Р. Статистическая механика. — М.: Мир, 1967. — 452 с.
9. Маренков В. Электрофизические характеристики плазмы с макрочастицами конденсированной дисперсной фазы и атомами щелочных металлов в газовой фазе// Физика аэродисперсных систем. — Вып. 37, 1998. — С. 128-143.
10. Ландау Л.Д, Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч.1. — М.:Наука, 1978.-583 с.

11. Фоменко В. С. Эмиссионные свойства материалов : справочник. — 4-е изд.- перераб. и доп. — Киев : Наукова думка, 1989. — 339 с.
12. Маренков В.И., Голяк В. А., Ибрагим М. К. Влияние параметров плазмы с частицами на плотность электрон — ионной компоненты // Физика аэродисперсных систем. Научный сборник. — Одесса: ОГУ. — 1996. — Вып. 1, С. 155 — 163 .
13. Marenkov V.I., Naboka E.N. Nonequilibrium ionization in dense high-temperature plasmas// J. Aerosol Sci. — 1999, Vol.30, Supp.1. — P. S329-S330 .
14. Marenkov V.I. Coulomb Inhomogeneities in Dusty Plasma Systems. — Physics of Liquid Matter: Modern Problem. Abstracts of PLM MP 2001, September 14-19,2001. P. 1. — 9. P.

В. И. Маренков

Пассивный электростатический зонд в запыленной плазме

АННОТАЦИЯ

В рамках модели, основанной на квазиклассическом приближении для электронной компоненты макроскопического металлического тела, контактирующего с плазмой, решена проблема термоионизационного равновесия: "зонд-плазма". Дано статистическое обоснование метода определения уровня Ферми запыленной плазмы (ЗП) путем сравнения плавающих потенциалов электростатических зондов, имеющих одинаковые размеры, но разные характеристики вещества. На базе данных компьютерной симуляции проанализированы возможности метода относительно измерений ионизационных характеристик ЗП в актуальной для приложений области определяющих термодинамических параметров.

Marenkov V. I.

Passive electrostatic probe in a dusty plasma

SUMMARY

The problem of "probe-plasma" thermoionization equilibrium is solved in the framework of a model based on quasiclassical approximation for electron component of a macroscopic metallic body contacting with a plasma. Statistical substantiation of the method of the dusty plasma (DP) Fermi level is given by means of comparison of floating potentials of electrostatic probes having equal sizes but different matter characteristics. The possibilities of the method about measurements of the (dusty plasmas) DP ionization characteristics are analyzed on the basis of computer simulation data in the region of main thermodynamic parameters which is actual for applications.

ИМЕННОЙ УКАЗАТЕЛЬ

А

Алтоиз Б. А. 197
Альтман И. С. 262
Амбросов С. В. 207
Асланов С. К. 220
Ауров В. В. 171

Б

Барняк Е. М. 237
Бойченко А. В. 28
Бойченко С. В. 28
Бойко Ю. И. 45
Бойчук Л. В. 99

В

Витавецкая Л. А. 278
Вовчук Я. И. 71

Г

Гетманец В. Ф. 237
Головко В. В. 111
Гулеватая О. Н. 158

Д

Драган Г. С. 90

Ж

Жиганюк И. В. 142

З

Загайнов В. А. 7
Затовский А. В. 228, 246

Заславский В. М. 237
Захарченко В. Л. 142
Золотко А. Н. 71

И

Иванов С. Ю. 99
Игнатенко В. М. 171

К

Калинчак А. И. 61
Калинчак В. В. 61, 158
Кирилюк А. В. 246
Коваль Л. А. 266
Коваль С. В. 189
Коваль С. С. 212
Козловская В. П. 273
Кондратьев Е. Н. 127, 142
Копейка А. К. 111
Копыт Н. Х. 18, 45
Корнилов В. Н. 127
Куклина И. В. 273
Кускова Н. И. 189

Л

Левин М. В. 228
Лисы В. 228
Лушников А. А. 7
Лялин Л. А. 36

М

Малиновская С. В. 278
Маренков В. И. 286
Мочалов А. А. 212

Н

Нужный В. М. 7

О

Обвинцева Л. А. 52
Орловская С. Г. 61, 158

П

Полетаев Н. И. 71, 178
Поповский А. Ю. 197
Препелица Г. П. 282
Пыжов Е. В. 197

Р

Рябчук Л. И. 118

С

Семенов К. И. 151
Скогарев В. Г. 82
Смагленко Т. Ф. 106
Стручаев А. И. 18

Т

Трофименко М. Ю. 106

Ф

Федчук А. П. 237
Флорко А. В. 82, 178, 266
Флорко И. А. 178

Ч

Чернякова Ю. Г. 282
Чесноков М. Н. 106, 118
Ческая Т. Ю. 253

Ш

Шевчук В. Г. 99
Швец А. В. 28
Шпинарева И. М. 171
Шумлянский И. И. 282

Я

Яровой Т. А. 71

Наукове видання

**ФІЗИКА
АЕРОДИСПЕРСНИХ
СИСТЕМ**

Випуск 38

Міжвідомчий науковий збірник

*Українською та російською
мовами*

Головний редактор ***В. В. Калінчак***

Зав. редакцією *Т. М. Забанова*
Технічний редактор *М. М. Бушин*

Здано у виробництво 20.10.2001. Підписано до друку 28.11.2001. Формат 60x84/16.
Папір офсетний. Гарнітура "Таймс". Друк офсетний. Ум. друк. арк. 17,67.
Тираж 300 прим. Зам. № 592.

Видавництво і друкарня "Астропринт"
(Свідоцтво ДК № 132 від 28.07.2000 р.)
65026, м. Одеса, вул. Преображенська, 24.
Тел.: (0482) 26-98-82, 26-96-82, 37-14-25.
www.astroprint.odessa.ua

Фізика аеродисперсних систем

Міжвідомчий науковий збірник / Головн. ред. В. В. Калінчак. —
Одеса: Астропринт, 2001. — 304 с.

Укр. та рос. мовами.

Розглянуто питання випаровування, конденсації та коагуляції у водяному аерозолі, а також кинетика горіння твердих і порошкоподібних палив. Наведено результати досліджень з тепло- і масообміну в дисперсних системах. Висвітлено проблеми активної дії на метеорологічні явища.

Для фізиків, хіміків, метеорологів і інженерів.

Рекомендации редколлегии для авторов статей

Редколлегия журнала просит руководствоваться приведенными ниже правилами. Статьи, оформленные без соблюдения этих правил не принимаются.

Сборник “Физика аэродисперсных систем” печатает статьи, в которых рассматриваются: 1. Вопросы испарения, конденсации, коагуляции, электрической зарядки аэрозолей, а также механизмы их образования и переноса; 2. Процессы горения аэродисперсных систем; 3. Тепломассообмен капель и частиц с газовой фазой при фазовых и химических превращениях; 4. Газодинамические явления в дисперсных системах, ударные волны, детонация; 5. Проблемные вопросы физики низкотемпературной плазмы с конденсированной дисперсной фазой.

Общие требования

Материалы, поданные в журнал, должны содержать новые результаты исследований. Рукопись должна быть отредактирована, вычитана и подписана авторами (автором) и сопровождаться разрешением на опубликование в открытой печати. На отдельном листе указать, с кем вести переписку, а также фамилию, имя, отчество, место работы, должность, контактные телефоны каждого автора.

Текст статей подается в двух экземплярах. Публикации возможны на русском, украинском, английском языках; к статье на русском языке прилагают аннотации на украинском и английском языках, к статье на украинском языке прилагают аннотации на русском и английском языках, к статье на английском языке прилагают аннотации на украинском и русском языках с переводом фамилий авторов и заголовка статьи. Все указанные материалы необходимо также подать в виде единого файла на дискете (3 дюйма), которая возвращается.

Редколлегия назначает рецензентов — компетентных специалистов в данной области, которые будут рецензировать каждую поданную статью. В случае отрицательной рецензии статья или присылается на доработку или отклоняется.

Оформление статьи

Материал статьи должен быть изложен в следующей последовательности:

- а) номер *УДК*, б) фамилии и инициалы авторов,
- в) название статьи,
- г) название организации (й), представляющей (их) статью (если организаций больше, чем одна, после фамилии каждого автора ставится знак сноски, а ниже указываются все организации, например: А.И. Иванов*, Л.К. Сидоров**
*Институт проблем энергосбережения НАН Украины, г. Киев
**Физико-технический институт низких температур, г. Харьков),
- д) название города,

- е) аннотация,
- ж) текст статьи,
- з) литература,
- и) аннотации на 2-х упомянутых выше языках с фамилиями и инициалами авторов и названием статьи.

Объем статьи, включая рисунки, литературу, аннотации, не должен превышать 10 страниц текста, напечатанного на компьютере через 1 интервал (с размером букв 10 pt). Поля: левое — 20 мм, правое 10 мм, сверху 30 мм, внизу 20 мм. Название статьи, фамилии авторов и название организаций печатаются буквами, размером 12 pt с межстрочным расстоянием между УДК, названием статьи и фамилиями авторов 1,5 интервала.

Аннотация, предшествующая тексту статьи, пишется одним абзацем с 20 позиции страницы размером букв 10 pt, объемом 6-10 строк. В предельно сжатой форме в ней излагается суть работы.

Формулы должны быть напечатаны в центре строки с четким выделением показателей степеней и индексов. Расстояние между текстом и формулами, а также между формулами — 2 интервала. Размеры индексов и показателей степеней не должны быть меньше 8 pt, например: ρ_{g_s} . Размеры основных символов 10 — 12 pt.

Математические символы типа \lim , \cos , \sin , \max , \log , \sup , \exp , критерии вида Nu , Re и т.п., число 0 даются прямым шрифтом ($\log 1 = 0$). Русские и латинские буквы в индексах даются прямым шрифтом, если они не относятся к обозначениям физических величин, а являются сокращением слова. Когда сокращение принимает последовательные значения или служит для перечисления чего-либо, обозначения ряда чисел, порядкового номера и т.п., оно дается курсивом. Например, τ_v — характерное время вращательной диффузии; T_w — температура стенки (wall — стена); F_i ($i = 1, 2, 3$) — проекция единичных массовых сил на соответствующие оси. Трудно различимые в рукописном обозначении буквы и знаки обязательно пояснять на полях.

Экспоненциальную функцию записывать в виде \exp , а не e . При нумерации формул пользоваться порядковой нумерацией и приписывать номер, только той формуле, на которую есть ссылка в тексте. Список обозначений отдельно не выносить, все разъяснения делать по ходу упоминания данной физической величины в тексте, указывая ее размерность.

Таблицы. Таблицы нумеруют только в том случае, если их больше одной. Отступ до таблицы и после нее — 2 интервала. При необходимости таблицы могут иметь заголовки и примечание.

Иллюстрации. Иллюстрации выполняются по ходу изложения текста статьи по мере их упоминания в тексте. Под рисунком печатается соответствующая подпись. Надписи, загромождающие рисунок, заменять цифровыми или буквенными обозначениями и переносить в текст статьи или в подписи под рисунком. Все обозначения на рисунке должны соответствовать обозначениям в тексте. Нумерацию кривых на рисунке вести сверху вниз, слева направо. Размер рисунка должен быть не менее 50×50 мм и не более 100×100 мм.

Литература. После текста статьи через 2 интервала печатается список литературных источников, используемых в статье. Список литературы начинается со слова “Литература”. Литература нумеруется по порядку цитирования в статье. В тексте в квадратных скобках указывается соответствующий номер. Ссылки на неопубликованные работы не допускаются. Ссылки на переведенные книги, журналы должны сопровождаться параллельным названием на языке оригинала с указанием выходных данных оригинального издания.

Например:

1. Журналы:

Иванов С.М., Соколов К.М. Особенности горения порохов //Физика горения и взрыва. — 1998. — Т.45, №3. — С. 351-369.

2. Книги:

Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1987. — 502 с.

Основы практической теории горения / Под ред. В.В. Померанцева. — Л.: Энергоатомиздат, 1986. — 312 с.

3. Диссертации:

Алехин С.П. Осаждение высокодисперсного аэрозоля в цилиндрическом канале: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. — Одесса, 1995. — 212 с.

Аннотации к тексту статьи печатаются после списка литературы. Аннотациям предшествуют фамилии и инициалы авторов и название статьи. После слова “Анотация” или “Summary” с абзаца печатается текст аннотации.

Файл. Для подготовки статьи к печати необходимо кроме напечатанных 2-х экземпляров статьи предоставить электронную копию статьи на дискете формата “1.44М — 3.5”. Файл статьи должен быть подготовлен при помощи редакторов Word-6, Word-97. Статья, аннотации и рисунки должны быть в едином файле и иметь название, образованное от фамилии первого автора — author.doc.

Если в статье имеются рисунки, необходимо представить иллюстрационный материал в виде графических файлов, выполненных в TIF — формате. Файлы рисунков называть следующим образом ris1.tif и т.д.

Все справки по телефонам:

(0482) 23-12-03 — *Калинчак Валерий Владимирович* —
ответственный редактор

(0482) 23-62-27 — *Чесноков Михаил Николаевич* —
зам. ответственного редактора

(0482) 23-12-03 — *Орловская Светлана Георгиевна* —
ответственный секретарь

(0482) 23-62-27 — *Смагленко Татьяна Федоровна* —
технический секретарь

Учебно-научно-производственный центр
«ПРИБОРЫ И МЕТОДИКИ
ДЛЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ АНАЛИЗА»

- Подготовка специалистов для наладки, обслуживания и текущего ремонта современного хроматографического и газоаналитического оборудования;
- Адаптация существующих и разработка новых методик анализа для конкретных задач хозяйственного комплекса Южного региона Украины, разработка и изготовление импортозамещающих стандартных образцов для различных видов анализа;
- Организация совместного (с Россией) и собственного производства по изготовлению современного хроматографического и газоаналитического оборудования;
- Поставка, наладка и сопровождение аналитического оборудования по всей территории Украины.

НПП "ТЕХНОЛОАБ" (ООО) (Одесса)
АООТ НПП "ХИМАВТОМАТИКА" (Москва)
СКТБ с ОП ФХИ НАН УКРАИНЫ (Одесса)

*Украина, 65011, г.Одесса,
ул.Пушкинская, 37
(0482) 241-136, 251-476*

*Россия, г.Москва,
ул. Сельскохозяйственная, 12а
(095) 181-01-65, 181-43-78*

КАДРЫ ДЛЯ ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ

Кафедра теплофизики Одесского национального университета им.И.И.Мечникова ежегодно проводит прием в очно-заочную аспирантуру по физике аэрозолей, тепло-массобмену в дисперсных системах и физике низкотемпературной плазмы. Возможно оформление соискательства.

По указанным выше научным проблемам есть специалисты для подготовки докторов наук.

Одесса, ул. Пастера, 27, кафедра теплофизики. Тел. 23-12-03