

К.В. Соломатин

Влияние параметров расширения насыщенного пара на спектр размеров частиц конденсата

Расширение насыщенного пара имеет место в ряде практических технологических задач и может сопровождаться конденсацией в потоке (разлет продуктов испарения при лазерной абляции, движение газа в сопле и т.д.) [1]. Далее рассмотрим именно процессы конденсации, не останавливаясь подробно на газодинамических аспектах в описании явления.

Спектр размеров дисперсной конденсированной фазы представляет несомненный научный интерес, поскольку, с одной стороны, влияет на параметры течения потока, а с другой – определяет вид и состав получаемого в процессе аэрозоля. Последнее означает теоретическую возможность контроля величины среднего размера вторичных частиц и их дисперсии путем варьирования динамики параметров состояния системы.

При адиабатическом расширении двухфазной системы закон сохранения энергии можно представить в виде (в приближениях равновесного расширения и однородного потока) [2]:

$$(C_v^v(1-\chi) + C_v^c\chi)dT + RT(1-\chi)\frac{dV}{V} = Ld\chi, \quad (1)$$

где C_v^v и C_v^c – молярная теплоемкость паровой и конденсированной фаз соответственно; χ – степень конденсации (доля молекул, относящихся к конденсированной фазе, в общем числе молекул); T – абсолютная температура потока; R – универсальная газовая постоянная; V – объем системы; L – скрытая теплота фазового перехода.

Величина степени конденсации может быть представлена в виде интеграла

$$\chi = \int_0^t (1-\chi(\tau))I(\tau)g(t,\tau)d\tau, \quad (2)$$

где $I(t)$ – скорость зародышеобразования (число частиц конденсата, образующихся за единицу времени, в расчете на одну молекулу паровой фазы); $g(t,\tau)$ – число молекул во вторичной частице, образовавшейся в момент времени τ к моменту времени t .

Равновесная скорость роста отдельной вторичной частицы может быть описана уравнением [3]

$$\frac{dg}{dt} = 4\pi a_0^2 g^{2/3} n \bar{v} \cdot \left(1 - \frac{T_p}{T} \cdot \exp\left(\frac{L}{RT_p} - \frac{L}{RT}\right) \right), \quad (3)$$

здесь a_0 – размер молекулы пара; n и \bar{v} – концентрация и средняя скорость молекул газа; T_p – температура газа, насыщенного при данной плотности.

Поскольку давление насыщенных паров зависит от температуры по закону

$$p_p = p_\infty \cdot \exp\left(-\frac{L}{RT}\right), \quad (4)$$

где p_∞ – постоянная, то получаем $T_p = L / \left(R \cdot \ln \frac{p_\infty}{p} \right)$.

На начальном этапе расширения возможны два механизма возникновения зародышей: гомогенный (в случае чистого пара имеющего низкую температуру) и гетерогенный (в остальных случаях), который обычно и реализуется на практике.

Для случая гетерогенной конденсации в химически однородном паре вокруг каждого иона возникает вторичная частица и далее, вплоть до наступления сильного разрежения, переохлаждение ($\theta = 1 - T/T_p$) намного меньше единицы. При этом уравнение (3) принимает вид

$$\frac{dg}{dt} \approx 4\pi a_0^2 g^{2/3} n \bar{v} \cdot \frac{L\theta}{RT} = 4\pi a_0^2 g^{2/3} n \bar{v} \cdot \left(\frac{L}{RT} - \ln \frac{p_\infty}{p} \right), \quad (5)$$

а для степени конденсации

$$\chi(t) = \chi_0 g(t), \quad (6)$$

где χ_0 – начальная степень конденсации, равная степени ионизации вещества.

Для равновесного состояния эту величину несложно рассчитать, используя формулу Саха [4].

Для решения задачи сделаем несколько упрощений и приближений.

Во-первых, перейдем от временной переменной к объему, поскольку скорость его изменения (u), согласно постановке задачи, считаем заданной. Тогда $dV = S u dt$, где S – сечение цилиндрического сосуда (для одномерного случая расширения).

Во-вторых, будем считать пар идеальным газом, подчиняющимся уравнению $pV = \nu(1-\chi)RT$ (где ν – количество вещества), для того чтобы исключить давление.

В-третьих, пренебрежем различием между C_v^v и C_v^c и примем $C_v = R/(\gamma-1)$, где γ – показатель адиабаты.

В-четвертых, безразмерим переменные с помощью формул: $\tilde{T} = T/T_0$, $\tilde{V} = V/V_0$, где индекс «0» (здесь и всюду далее) означает начальное значение величин.

В результате получаем систему из двух дифференциальных уравнений первого порядка

$$\left\{ \begin{aligned} (\gamma-1) \cdot \frac{d\bar{T}}{d\bar{V}} + (1-\chi) \cdot \frac{\bar{T}}{\bar{V}} &= -\frac{L}{RT_0} \cdot \frac{d\chi}{d\bar{V}}, \\ \frac{d\chi}{d\bar{V}} &= A \cdot \chi^{2/3} (1-\chi) \cdot \frac{\sqrt{\bar{T}}}{\bar{V}}. \end{aligned} \right. \quad (7)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \cdot \left(\frac{L}{RT_0} \cdot \left(\frac{1}{\bar{T}} - 1 \right) - \ln \left(\frac{(1-\chi_0)\bar{V}}{(1-\chi)\bar{T}} \right) \right) \end{aligned} \right. \quad (8)$$

где $A = \frac{\bar{v}_0 l_0 \sqrt[3]{\chi_0}}{3\sqrt{2} \langle \lambda \rangle_0}$ – безразмерный параметр (l_0 – начальная

длина цилиндра; $\langle \lambda \rangle_0$ – начальная длина свободного пробега в газе).

Начальные условия:

$$\bar{T} = 1, \text{ при } \bar{V} = 1. \quad (9)$$

Численное решение системы выполним с помощью программы DOPR18 (модифицированный метод Рунге-Кутты [5]).

Результаты решения представлены на рисунках 1–3.

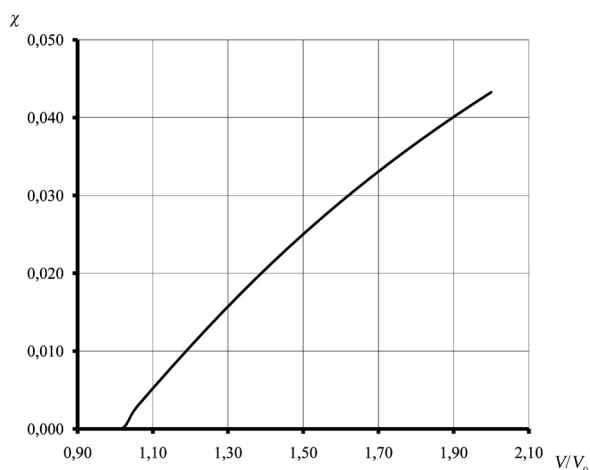


Рис. 1. Зависимость степени конденсации от относительного объема двухфазной смеси

Для численного решения системы (7–8) выберем пар углерода (поскольку давление пара становится заметным при температурах более 3500 К, что соответствует значительной температурной ионизации). Диапазон начальных температур $(3,5 \div 4,5) \cdot 10^3$ К, для него степень ионизации составляет $\chi_0 = (1 \div 3) \cdot 10^{-6}$ и практически линейно зависит от температуры. Для упрощения расчетов и их интерпретации скорость расширения выберем постоянной в диапазоне $(1 \div 100)$ м/с.

Согласно результатам численного решения (рис. 1), величина степени конденсации в случае расширения с постоянной скоростью практически не зависит от скорости расширения. Температура (рис. 2) медленно

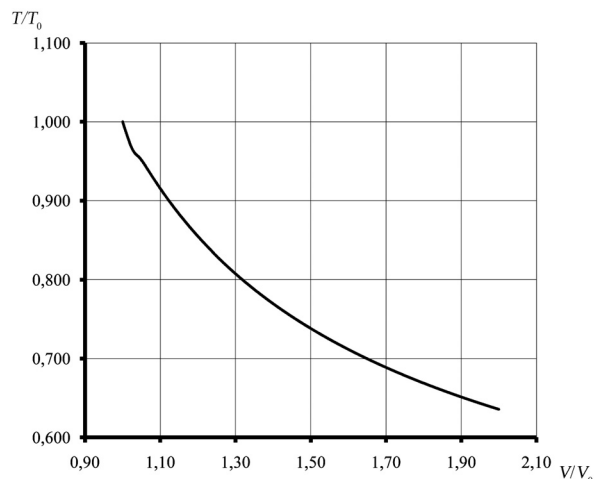


Рис. 2. Зависимость относительной температуры в системе от относительного объема двухфазной смеси

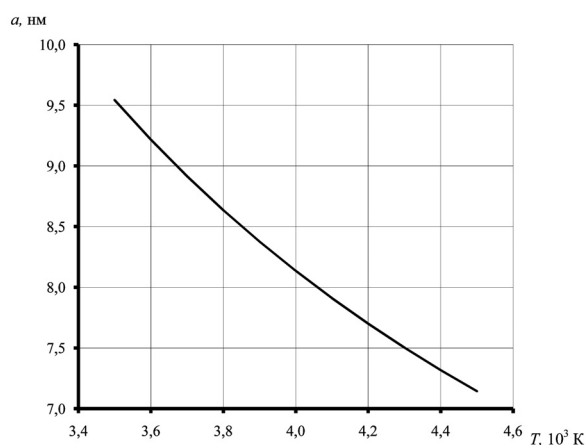


Рис. 3. Зависимость среднего размера вторичной частицы от начальной температуры насыщенного пара

понижается по линии, примерно соответствующей кривой упругости пара. Оба результата, по-видимому, объясняются допущением равновесности процесса: переохлаждение в системе очень незначительное. При увеличении объема примерно в два раза степень конденсации находится в пределах $(0,04-0,05)$. Поэтому и зависимость от начального состояния системы (температуры или давления) вплоть до момента нарушения теплового равновесия является слабой.

С учетом начального числа центров конденсации зависимость среднего размера (диаметра a) частиц конденсата от температуры при двукратном увеличении объема представлена на рисунке 3. Для температуры 4000 К средний размер составляет около 8 нм. Как видно, для получения более крупных частиц требуется выбирать меньшее значение начальной температуры насыщенного пара (однако при этом массовая концентрация частиц будет существенно снижаться).

Библиографический список

1. Горбунов, В.Н. Неравновесная конденсация в высокоскоростных потоках газа / В.Н. Горбунов, У.Г. Пирумов. – М., 1984.
2. Райзер, Ю.П. О конденсации в облаке испаренного вещества, расширяющегося в пустоту / Ю.П. Райзер // ЖЭТФ. – 1959. – Т.37, вып. 6(12).
3. Хирс, Д. Испарение и конденсация / Д. Хирс, Г. Панд. – М., 1966.
4. Физический энциклопедический словарь / Гл. ред. А.М. Прохоров. – М., 1995.
5. Хайрер, Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи : пер. с англ. / Э. Хайрер, С. Нерсетт, Г. Ваннер. – М., 1990.