



Термофорез летучей сферы в бинарной газовой смеси с учетом термодиффузионных и стефановских эффектов.

С.Н.Дьяконов

Россия, 300015, Орел, ул. Комсомольская, 95,
Орловский государственный университет,
e-mail: ua3ecf@oryol.org

А.Н.Никольский

Россия, 300015, Орел, ул. Комсомольская, 95,
Орловский государственный университет.

Аннотация.

Построена теория равномерного термофоретического движения крупной летучей аэрозольной частицы с фазовым переходом на поверхности. Решение поставленной задачи помогает оценить влияние коэффициента испарения на скорость термофореза с учетом объемной термодиффузии и стефановских эффектов.

Пусть в неограниченной неподвижной бинарной газовой смеси создан и поддерживается постоянным градиент температуры A_T . В такую неоднородно нагретую среду помещается летучая сферическая капля радиуса R чистой высоковязкой жидкости с коэффициентом испарения α (на поверхности имеет место фазовый переход одного из компонентов смеси газов).

Испарение (конденсация) молекул жидкости происходит при числах *Маха* много меньших единицы. Молекулы конденсированной фазы образуют первую (летучую) компоненту бинарной газовой смеси. Для газовых молекул второго (несущего) компонента поверхность капли непроницаема. Тепловое (диффузионное) скольжение газа вдоль граничной поверхности вызывает относительное движение частицы в газообразной среде.

Направленное равномерное движение капли в режиме со скольжением характеризуется в лабораторной системе координат термфоретической скоростью \mathbf{U}_T . Частица испытывает действие термфоретических сил ($\mathbf{F}_{TF}, \mathbf{F}_{DF}$), которые стремится компенсировать сила \mathbf{F}_V вязкого сопротивления окружающей среды. Искомая скорость \mathbf{U}_T термофореза достигается, если исчезает результирующая сила $\mathbf{F} = \mathbf{F}_{TF} + \mathbf{F}_{DF} + \mathbf{F}_V$.

Очевидно, что влияние летучести на термофорез тела происходит с двух сторон. Во-первых, меняется распределение температуры внутри и в окрестности частицы. В результате появляется дополнительное скольжение газообразной среды вдоль поверхности тела. Во-вторых, окружающее пространство насыщается паром летучего вещества и усиливается термодиффузия компонентов смеси газов.

Задача решается в сферической системе координат (r, θ, φ) . Ее начало жестко связано с геометрическим центром капли и ось (Oz) направлена вдоль вектора $\mathbf{A}_T = (\nabla T)_\infty$. Тогда в указанной системе координат аэрозольная частица покоится, а центр масс внешней среды перемещается со скоростью $\mathbf{U} = -\mathbf{U}_T$.

Бинарная газовая смесь считается несжимаемой, вязкой, изотропной и сплошной — число *Кнудсена* является достаточно малым

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{R} \ll 1$$

Здесь $\lambda = \max(\lambda_1, \lambda_2)$; λ_1, λ_2 - средние длины свободного пробега газовых молекул первого и второго сорта.

Относительные изменения температуры и концентрации компонентов газовой смеси предполагаются малыми. Это позволяет пренебрегать температурной и концентрационной зависимостью коэффициентов молекулярного переноса и считать их постоянными величинами при невозмущенных значениях T_0 и C_0 (значения температуры и относительной концентрации летучего компонента газовой смеси в месте нахождения геометрического центра капли в ее отсутствие). Однако, неоднородность невозмущенно-

го температурного поля достаточно большая по сравнению с изменениями температуры, которые обусловлены выделением тепла при диссипации энергии путем внутреннего трения.

Динамика капли происходит при малых числах *Рейнольдса*

$$\text{Re} = \frac{UR\rho}{\eta} \ll 1$$

и в уравнениях медленного ("ползущего") движения внешней среды и тепломассопереноса опущены нелинейные члены (инерционный и конвективные). Внешние массовые силы не действуют. Движением высоковязкой жидкости капли пренебрегаем. Тепловые источники вне и внутри аэрозольной частицы отсутствуют.

Пусть времена гидродинамической, тепловой и концентрационной релаксации являются достаточно малыми по сравнению с характерным временем переноса капли. Тогда состояние неоднородной газообразной среды описывается в рамках гидродинамического анализа (используется макроскопический подход для сплошных сред) в квазистационарном приближении (векторное поле скоростей $\mathbf{v}(\mathbf{r})$, распределение давлений $p(\mathbf{r})$ и относительной концентрации $C(\mathbf{r})$ летучего компонента в бинарной газовой смеси, скалярные поля температур $T(\mathbf{r})$, $T'(\mathbf{r})$ вне и внутри частицы считаются как установившиеся в любой момент времени) осесимметричными дифференциальными уравнениями Стокса, неразрывности и Лапласа:

$$\begin{aligned} \eta\Delta\mathbf{v} &= \nabla p, & \text{div}\mathbf{v} &= 0, \\ \Delta C &= 0, & \Delta T &= 0, & \Delta T' &= 0. \end{aligned}$$

Ниже величина с индексом "s" относится к насыщенному пару летучего вещества, а локальные единичные характеристические векторы ($\mathbf{n} = \mathbf{i}_r, \mathbf{s} = \mathbf{i}_\theta, \mathbf{i}_\varphi$) образуют правую систему координат [1].

На бесконечности и граничной поверхности справедливы условия:

$r \rightarrow \infty$:

$$\mathbf{v} = U\mathbf{i}_z, \quad T = T_0 + A_T z, \quad C = C_0;$$

$r = R$:

$$\mathbf{n} \left(n_1 \mathbf{v} - \frac{n^2 m_2}{\rho} D(\nabla C + K_{TD} \nabla \ln T) \right) = \alpha \nu n (C_s - C),$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{n} \left(n_2 \mathbf{v} + \frac{n^2 m_1}{\rho} D (\nabla C + K_{TD} \nabla \ln T) \right) &= 0, \\
 \mathbf{s} \mathbf{v} &= \mathbf{s} (K'_{TSL} \nabla T + K'_{DSL} \nabla C), \\
 T &= T', \\
 \mathbf{n} (-\kappa \nabla T + \kappa' \nabla T') &= -L m_1 \alpha \nu n (C_s - C), \\
 F_z &= 0, \\
 n &= n_1 + n_2, \quad \rho = m_1 n_1 + m_2 n_2, \quad C = \frac{n_1}{n}, \quad C_s = \frac{n_{1s}}{n}, \\
 \nu &= \left(\frac{kT}{2\pi m_1} \right)^{\frac{1}{2}},
 \end{aligned}$$

где (n_1, n_2) и n_{1s} — численные концентрации газовых молекул первого, второго сорта с массами (m_1, m_2) и насыщенных паров летучего вещества капли; D — коэффициент взаимной диффузии компонентов смеси; L — удельная теплота испарения жидкости; (κ, κ') — коэффициенты удельной теплопроводности газовой среды и конденсированной фазы; k — постоянная Больцмана.

Указанные выше условия имеют следующий физический смысл:

– На бесконечности осесимметричный поток внешней среды однороден в пространстве и имеет скорость \mathbf{U} в направлении положительных значений оси (Oz) , а поля температуры $T(\mathbf{r})$ и относительной концентрации $C(\mathbf{r})$ летучего компонента смеси газов невозмущены.

– Нормальный поток первого компонента на фазовой границе представляется как нормальный поток пара летучего вещества, который отводится с поверхности через слой *Кнудсена* и пропорционален коэффициенту испарения α . Поверхность капли непроницаема для несущей компоненты.

– Касательная составляющая ϑ_s скорости внешней среды равна сумме скоростей теплового и диффузионного скольжений, которые пропорциональны локальным тангенциальным градиентам $\nabla_s T$ и $\nabla_s C$ соответственно. Коэффициенты пропорциональности

$$K'_{TSL} = K_{TSL} \frac{\eta}{\rho T}, \quad K'_{DSL} = K_{DSL} D$$

определяются математическими методами кинетической теории газов. В силу малости числа *Кнудсена* изотермическое скольжение со скоростью порядка величины $(Kn U)$ не учитывается.

– Температура и нормальный поток тепла с учетом фазового перехода

непрерывны.

– Результирующая сила \mathbf{F} , действующая на летучую каплю со стороны набегающего потока внешней среды, равна нулю.

На фазовой границе раздела сред нормальный поток массы

$$m_1 \alpha \nu n \{C_s(T) - C(T)\}$$

летучего компонента газовой смеси и разность нормальных потоков тепла вне и внутри капель противоположны по знаку.

В левых частях первого и второго граничных соотношений в выражении для термодиффузионной силы пренебрегаем бародиффузионным слагаемым и опускаем член с объемными силами. Выражение для правой части первого равенства получено на основе простых статистических соображений, когда коэффициент испарения совпадает с коэффициентом конденсации пара.

Пусть в тонком слое *Кнудсена* с толщиной $l \sim \lambda$ имеет место максвелловское распределение газовых молекул и величина ν обозначает четвертую часть средней абсолютной тепловой скорости молекул пара летучего вещества. Полагаем, что обмен молекулами пара в слое *Кнудсена* происходит беспрепятственно, как в вакууме. В этом случае скорость испарения жидкости с единицы площади поверхности равна $\alpha \nu n C_s(T)$. Так как уравнение диффузии справедливо лишь вне слоя *Кнудсена*, то скорость конденсации пара на единице площади поверхности равна $\alpha \nu n C(T)$, где $C(T)$ есть относительная концентрация молекул пара на расстоянии l от поверхности капли. Тогда результирующая (наблюдаемая) скорость испарения жидкости с единицы поверхности запишется так: $\alpha \nu n \{C_s(T) - C(T)\}$. Правильность этого выражения подтверждается, когда рассматривается обмен молекулами пара в слое *Кнудсена* в состоянии динамического равновесия при $C_s(T) = C(T)$. Указанная скорость испарения жидкости совпадает с правой частью первого граничного равенства, когда толщина l слоя *Кнудсена* формально стремится к нулю для крупной капли ($Kn \ll 1$). Нормальный поток пара летучего компонента, который отводится с поверхности, записывается в указанном виде для учета прямого влияния летучести на диффузиофорез одиночных крупных сферических капель высоковязкой жидкости [2].

Теория движения аэрозольной частицы пренебрегает изменением невозмущенной температуры T_0 с течением времени.

Решение осесимметричной гидродинамической задачи для несжимаемой

газовой среды удобно представить в терминах функция тока. В правой системе ортогональных сферических координат (r, θ, φ) вращения составляющие скорости и z-проекция результирующей силы, действующей на сферу $r=R$ (в приближении Стокса), определяются через функцию тока $\Psi = \Psi(r, \theta)$ по формулам [1]

$$\vartheta_r = -\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}, \quad \vartheta_\theta = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r}, \quad \vartheta_\varphi = 0,$$

$$F_z = \pi \eta_0 \int_0^\pi r^4 \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \frac{E^2 \psi}{r^2} \right\} d\theta.$$

После обезразмеривания физических величин в уравнениях гидродинамики, тепло-массопереноса и граничных условиях

$$\tilde{r} = \frac{r}{R}, \quad \tilde{\vartheta}_r = \frac{\vartheta_r}{U}, \quad \tilde{\vartheta}_\theta = \frac{\vartheta_\theta}{U}, \quad \tilde{\psi} = \frac{\psi}{UR^2}, \quad \tilde{T} = \frac{T - T_0}{A_T R},$$

$$\tilde{T}' = \frac{T' - T_0}{A_T R}, \quad \tilde{F}_z = \frac{F_z}{6\pi\eta_0 R U}$$

волнистая линия сверху опускается и постановка задачи имеет следующий приведенный линеаризованный вид

$$E^4 \psi(r, \zeta) = 0, \quad \Delta T = 0, \quad \Delta T' = 0, \quad \Delta C = 0, \quad (1)$$

$$E^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1 - \zeta^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2},$$

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right\} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \zeta} \left\{ (1 - \zeta^2) \frac{\partial}{\partial \zeta} \right\},$$

$r \rightarrow \infty :$

$$\psi(r, \zeta) = -\frac{1}{2} r^2 (1 - \zeta^2), \quad T = z, \quad C = C_0, \quad (2)$$

$r = 1 :$

$$\left\{ C_0 + (1 - C_0) \frac{m_2}{m_1} \right\} U \vartheta_r = \alpha \nu \left\{ C_s(\tau) + \frac{\partial C_s}{\partial T} \Big|_{T=\tau} (T - \tau) - C \right\}, \quad (3)$$

$$(1 - C_0) \left\{ C_0 + (1 - C_0) \frac{m_2}{m_1} \right\} U \vartheta_r + \frac{D}{R} \left\{ \frac{\partial C}{\partial r} + \varepsilon K_{TD} \frac{\partial T}{\partial r} \right\} = 0, \quad (4)$$

$$U\vartheta_\theta = -K_{TSL} \frac{\eta_0}{\rho_0 T_0} A_T (1 - \zeta^2)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial T}{\partial \zeta} - K_{DSL} \frac{D}{R} (1 - \zeta^2)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial C}{\partial \zeta}, \quad (5)$$

$$T = T', \quad (6)$$

$$-\frac{\kappa_0}{\kappa'_0} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial T'}{\partial r} = -\frac{Lm_1 \alpha \nu n_0}{A_T \kappa'_0} \left\{ C_s(\tau) + \frac{\partial C_s}{\partial T} \Big|_{T=\tau} (T - \tau) - C \right\}, \quad (7)$$

$$F_z = 0, \quad (8)$$

$$-1 \leq \zeta = \cos(\theta) \leq +1,$$

$$\tau = \frac{T_\omega - T_0}{A_T R}, \quad \varepsilon = \frac{A_T R}{T_0},$$

где T_ω – средняя температура на поверхности летучей сферической капли.

Решения уравнений (1) в общем виде представляются так

$$\psi(r, \zeta) = \sum_{n=2}^{\infty} \left\{ A_n r^n + B_n r^{-n+1} + C_n r^{n+2} + D_n r^{-n+3} \right\} J_n(\zeta),$$

$$\vartheta_r(r, \zeta) = - \sum_{n=2}^{\infty} \left\{ A_n r^{n-2} + B_n r^{-n-1} + C_n r^n + D_n r^{-n+1} \right\} P_{n-1}(\zeta),$$

$$\vartheta_\theta(r, \zeta) = \sum_{n=2}^{\infty} \left\{ n A_n r^{n-2} - (n-1) B_n r^{-n-1} + (n+2) C_n r^n - (n-3) D_n r^{-n+1} \right\} \frac{J_n(\zeta)}{\sqrt{1-\zeta^2}},$$

$$T(r, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ E_n r^n + F_n r^{-n-1} \right\} P_n(\zeta),$$

$$T'(r, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ G_n r^n + H_n r^{-n-1} \right\} P_n(\zeta),$$

$$C(r, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ K_n r^n + L_n r^{-n-1} \right\} P_n(\zeta).$$

С учетом условий на бесконечности (2) и конечности температуры в центре капли указанные разложения подставляем в граничные условия (3)-(7). Тогда применяя свойства (П.1)-(П.3) ультрасферических полиномов Гегенбауэра порядка n и степени $\pm \frac{1}{2}$

$$J_n(\zeta) = C_n^{-\frac{1}{2}}(\zeta), \quad P_n(\zeta) = C_n^{\frac{1}{2}}(\zeta),$$

в силу условий ортогональности типа (П.5), (П.6) можно записать для постоянных интегрирования алгебраические уравнения

$$-\left\{C_0 + (1 - C_0)\frac{m_2}{m_1}\right\}U(B_2 + D_2 - 1) = \alpha\nu \left\{ \frac{\partial C_s}{\partial T} \Big|_{T=\tau} G_1 - L_1 \right\}, \quad (1a)$$

$$(1 - C_0) \left\{ C_0 + (1 - C_0)\frac{m_2}{m_1} \right\} U(B_2 + D_2 - 1) + \frac{D}{R} \left\{ 2L_1 + \varepsilon K_{TD}(2F_1 - 1) \right\} = 0, \quad (2a)$$

$$U(B_2 - D_2 + 2) = 2K_{TSL} \frac{\eta_0}{\rho_0 T_0} A_T (F_1 + 1) + 2K_{DSL} \frac{D}{R} L_1, \quad (3a)$$

$$F_1 + 1 = G_1 \quad (4a)$$

$$\frac{\kappa_0}{\kappa'_0} (2F_1 - 1) + G_1 = -\frac{Lm_1\alpha\nu n_0}{A_T\kappa'_0} \left\{ \frac{\partial C_s}{\partial T} \Big|_{T=\tau} G_1 - L_1 \right\}. \quad (5a)$$

В результате интегрирования по сферической границе $r=1$ с учетом соотношений (П.4) получаем

$$F_z = \frac{1}{6} \int_{-1}^{+1} r^4 \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \frac{E^2 \psi}{r^2} \right\} d\zeta = \frac{2}{3} D_2.$$

Поэтому условие (8) равномерного движения капли дает

$$D_2 = 0. \quad (6a)$$

Решая систему уравнений (1a)-(6a), получаем следующее выражение для искомой скорости термофореза $U_T = -U$.

$$U = 2K_{TSL} \frac{\eta_0}{\rho_0 T_0} A_T \frac{\Delta'}{\Delta} + 2K_{DSL} \frac{D}{R} \frac{\Delta''}{\Delta} + \frac{1}{C_0 + (1 - C_0)\frac{m_2}{m_1}} \alpha\nu \left\{ 2\frac{\kappa_0}{\kappa'_0} \frac{\partial C_s}{\partial T} \Big|_{T=\tau} - \varepsilon K_{TD} \right\} \frac{1}{\Delta}, \quad (9)$$

$$\Delta = \left(1 + 2\frac{\kappa_0}{\kappa'_0} \right) \left\{ 2 + (1 - C_0) \frac{\alpha\nu R}{D} \right\} + 2\frac{Lm_1\alpha\nu n_0}{A_T\kappa'_0} \left\{ \frac{\partial C_s}{\partial T} \Big|_{T=\tau} + \varepsilon K_{TD} \right\},$$

$$\Delta' = \frac{\kappa_0}{\kappa'_0} \left\{ 2 + (1 - C_0) \frac{\alpha\nu R}{D} \right\} + \varepsilon K_{TD} \frac{Lm_1\alpha\nu n_0}{A_T\kappa'_0},$$

$$\Delta'' = \frac{\kappa_0}{\kappa'_0} (1 - C_0) \frac{\alpha\nu R}{D} \frac{\partial C_s}{\partial T} \Big|_{T=\tau} + \varepsilon K_{TD} \left\{ \frac{Lm_1\alpha\nu n_0}{A_T\kappa'_0} \frac{\partial C_s}{\partial T} \Big|_{T=\tau} + 1 \right\},$$

где

$$n_0 = n_{10} + n_{20}, \quad \rho_0 = m_1 n_{10} + m_2 n_{20}, \quad \eta_0 = \eta(T_0, C_0),$$

$$\kappa_0 = \kappa(T_0, C_0), \quad \kappa'_0 = \kappa(T_0).$$

Оценка скорости температурного изменения относительной концентрации насыщенных паров летучего вещества в точке $T = T_0$ осуществляется с помощью формулы Клапейрона-Клаузиуса в приближении идеального газа.

$$\left. \frac{\partial C_s}{\partial T} \right|_{T=\tau} = \varepsilon C_s(\tau) \left(\frac{L\mu}{R_g T_\omega} - 1 \right),$$

где R_g — универсальная газовая постоянная, μ — молярная масса паров летучего вещества. Значение τ определяется из решения задачи, в данном приближении следует положить $\tau = 0$.

В формуле (9) первый и второй члены (пропорциональные коэффициентам K_{TSL} и K_{DSL}) обусловлены соответственно тепловым и диффузионным скольжением газовой среды. Третье слагаемое описывает реактивную часть импульса, действующего на аэрозольную частицу, и связано с фазовым переходом на ее поверхности. Температурная зависимость относительной концентрации насыщенных паров летучего вещества капли и термодиффузионные явления в объеме газовой смеси вызывают неравномерное испарение (конденсацию) вдоль границы конденсированной фазы и как следствие реактивный эффект.

Предельный переход ($\alpha \rightarrow 0, K_{TD} \rightarrow 0$) дает величину скорости термофореза твердой нелетучей частицы в неоднородном по температуре простом газе [3].

$$U' = K_{TSL} \frac{\eta_0}{\rho_0 T_0} \frac{2 \frac{\kappa_0}{\kappa'_0}}{1 + 2 \frac{\kappa_0}{\kappa'_0}} A_T.$$

Приложение.

$$J_n(\zeta) = \frac{P_{n-2}(\zeta) - P_n(\zeta)}{2n-1}, \quad n \geq 2, \quad (\text{II.1})$$

$$\frac{dJ_n(\zeta)}{d\zeta} = -P_{n-1}(\zeta), \quad n \geq 1, \quad (\text{II.2})$$

$$(1 - \zeta^2) \frac{dP_n(\zeta)}{d\zeta} = n(n+1) J_{n+1}(\zeta), \quad n \geq 0, \quad (\text{II.3})$$

$$\int_{-1}^{+1} J_n(\zeta) d\zeta = \begin{cases} 2, & \text{если } n = 0, \\ \frac{2}{3}, & \text{если } n = 2, \\ 0, & \text{если } n \neq 0; 2, \end{cases} \quad (\text{П.4})$$

$$\int_{-1}^{+1} \frac{J_m(\zeta) J_n(\zeta)}{1 - \zeta^2} d\zeta = \begin{cases} 0, & \text{при } n \neq m, \\ \frac{2}{n(n-1)(2n-1)}, & \text{при } n = m, \end{cases} \quad (\text{П.5})$$

$$\int_{-1}^{+1} P_m(\zeta) P_n(\zeta) d\zeta = \begin{cases} 0, & \text{при } n \neq m, \\ \frac{2}{(2n+1)}, & \text{при } n = m. \end{cases} \quad (\text{П.6})$$

Условия ортогональности типа (П.5)-(П.6) справедливы, когда

$$m \neq 0, 1; \quad n \neq 0, 1.$$

Список литературы

- [1] Happel J., Brenner H. Low Reynolds number hydrodynamics. Prentice – Hall, 1965. Русский перевод: Хаппель Дж., Бреннер Г. Гидродинамика при малых числах Рейнольдса. Перевод с англ. / Под редакцией Буевича Ю.А. М.:Мир, 1976, 632 с.
- [2] Яламов Ю.И. О влиянии коэффициента испарения на диффузиофорез крупных капель. Москва, 1990. Рукопись депонирована в ВИНТИ, деп. №4120-Б 90.
- [3] Баканов С.П. К вопросу о влиянии летучести на термофорез аэрозолей // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 1995, №5, с. 181-186.
- [4] Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972, 721 с.
- [5] Яламов Ю.И., Галоян В.С. Динамика капель в неоднородных вязких средах. Ереван: Луйс, 1985, 207 с.