

Влияние диффузионно-дрейфовой неустойчивости границы образования к-фазы у поверхности нагретой макрочастицы на её заряд

Рассмотрено влияние диффузионно-дрейфовой неустойчивости границы образования к-фазы вблизи нагретой металлической макрочастицы на эволюцию её термоэмиссионного заряда. Показано, что смещение наночастиц к-фазы за время релаксации заряда макрочастицы не приводит к существенной ошибке в его расчёте.

При горении металлизированных топлив, сварке, ионизационном противодействии радарному обнаружению летательных аппаратов и др. процессах присутствует такой объект, как нагретая до высоких температур частица металла. Задача оптимизации таких процессов, в частности, связана с дальнейшим изучением эволюции нагретых частиц.

В работах [1, 2] предложена модель термоэмиссионной зарядки в системе к-фаза – нагретая макрочастица металла. Важным параметром при электрообмене в такой системе является расстояние от границы образования к-фазы до поверхности макрочастицы. Образующиеся наночастицы к-фазы смещаются в результате дрейфа в электрическом поле заряженной макрочастицы, в результате концентрационной диффузии и в результате термодиффузии. В одной из экспериментальных работ [3] приведены результаты исследований движения наночастиц к-фазы вблизи нагретой частицы магния и показано, что такое движение приводит к возникновению зоны накопления наночастиц и к разделению зоны горения и зоны накопления.

Также перемещение границы к-фазы может внести систематическую ошибку в расчёт равновесного электрического заряда нагретой макрочастицы [1], поэтому представляет интерес оценка её смещения за время релаксации электрического заряда макрочастицы.

Расстояние Δz_{diff} , на которое кластер удаляется за время релаксации заряда τ от границы образования к-фазы против направления градиента температуры под действием концентрационной диффузии и термодиффузии можно оценить через поток частиц Γ

$$\Delta z_{\text{diff}} \sim \Gamma \tau / n_1, \quad (1)$$

где

$$\Gamma = -D_N \frac{dc}{dx} + n_1 \frac{D_T}{T} \frac{dT}{dx}. \quad (2)$$

D_N – коэффициент диффузии в буферном газе для кластера, содержащего N молекул, c – относительная концентрация наночастиц, $c = n_1 / \sum n_i$, n_1 – концентрация наночастиц в к-фазе [4], $\sum n_i$ – сумма концентраций всех компонент к-фазы (молекулы газа, наночастицы), T – температура на границе образования к-фазы.

Буферным газом в данном случае является воздух. Зависимость коэффициента диффузии от количества молекул в кластере имеет вид [4]

$$D_N = \frac{D_0}{N^{2/3}}, \quad (3)$$

где в приближении Чепмена-Энскога [5]

$$D_0 = \frac{3}{8\sqrt{2}\pi r_w^2 N_B} \sqrt{\frac{kT}{\mu_B}} \quad (4)$$

Здесь μ_B – масса буферного газа; $N_B = P_{atm}/kT$ плотность молекул буферного газа, где P_{atm} – нормальное атмосферное давление. Если $T_1 > T_2$, то к-фаза образуется на некотором расстоянии от поверхности макрочастицы. Под T в выражении (4) следует понимать максимальную температуру устойчивого состояния к-фазы T_2 , в этом случае

$$D_0 = \frac{3}{8\sqrt{2}\pi r_w^2 N_B} \sqrt{\frac{kT_2}{\mu_B}}. \quad (5)$$

Здесь $N_B = P_{atm}/kT_2$. После падения температуры макрочастицы и выполнения условия $T_1 \leq T_2$ в выражении (4) будет фигурировать T_1 :

$$D_0 = \frac{3}{8\sqrt{2}\pi r_w^2 N_B} \sqrt{\frac{kT_1}{\mu_B}}, \quad (6)$$

где $N_B = P_{atm}/kT_1$. Коэффициент термодиффузии для наночастиц к-фазы можно вычислить из соотношения [6]

$$D_T \approx \frac{45}{256\pi n^2 \sigma_{22}^2 \Omega_{22}^{(2,2)*}} \sqrt{\frac{kT}{\pi m_{12}}} \frac{1}{(R_N + A_c) R_N^2} \Phi_1, \quad (7)$$

где σ_{22} – параметры потенциала Ленарда-Джонса взаимодействия молекул несущего газа, $\Omega_{22}^{(2,2)*}$ – так называемые Ω -интегралы [7], m_{12} – приведенная масса, $m_{12} = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, m_1 – масса наночастицы, m_2 – масса молекулы газа (здесь – усреднённая), R_N – радиус наночастицы, A_c – функция, зависящая от параметров взаимодействия наночастица – молекула и температуры несущего газа [8], Φ_1 – объёмная доля наночастиц в газовой смеси. Совместное решение уравнений (1) – (7) и, для оценки градиента температуры, (16) позволяет оценить величину диффузионного смещения наночастицы. Постоянство температуры T_1 либо T_2 при которых определен D_N гарантирует завышенное значение величины z .

Скорость дрейфового перемещения кластера под действием электростатического поля макрочастицы определяется известным соотношением

$$V_{dr} = UE, \quad (8)$$

где U – подвижность кластера. Коэффициенты диффузии и подвижности связаны соотношением

$$U = D_N \frac{e}{kT}. \quad (9)$$

Дрейфовое перемещение кластера за время релаксации макрочастицы может быть определено как

$$\Delta z_{dr} = UE\tau . \quad (10)$$

Если температура макрочастицы T_1 больше T_2 , к-фаза образуется на некотором расстоянии от поверхности макрочастицы. Граница образования к-фазы имеет форму сферы, центр которой совпадает с центром макрочастицы, а её радиус R_{kf} . На расстоянии от центра макрочастицы превосходящем R_{kf} , к-фаза существует, на расстоянии меньшем R_{kf} , соответственно, разрушается. В выражении для напряжённости электростатического поля макрочастицы, фигурирующего в (10), в этом случае следует использовать R_{kf} .

Для оценки величины R_{kf} воспользуемся выражением [9], определяющим зависимость температуры T от расстояния R_i до точечного источника с мощностью тепловыделения q , движущегося со скоростью v

$$T = \frac{q}{4\pi\lambda R} \exp\left(-\frac{vR}{2\chi}\right) + T_\infty . \quad (11)$$

Здесь λ – теплопроводность воздуха. Эта величина определялась при средней температуре поверхности частицы T_1 и окружающей воздушной среды на бесконечности $T_\infty = 300$ К. Использовалось известное выражение $\lambda_0 = (\bar{T}/273)^{3/2}$ [11], где $\bar{T} = (T_1 + T_\infty)/2$, λ_0 – теплопроводность воздуха при $T_0 = 273$ К. Температуропроводность воздуха $\chi = \lambda/\rho c_p$, где c_p – удельная теплоёмкость воздуха при постоянном атмосферном давлении. Плотность воздуха $\rho = \rho_0(T_0/T)$ определялась в предположении изобаричности процесса, где ρ_0 – плотность воздуха при температуре 273 К. Полагая в выражении (11) радиальную координату R_i равной радиусу макрочастицы r , найдём температуру поверхности частицы T_1

$$T_1 = \frac{q}{4\pi\lambda R} \exp\left(-\frac{vR}{2\chi}\right) + T_\infty . \quad (12)$$

Подставляя в (11) расстояние от центра макрочастицы до границы образования КДФ R_{kf} , получим температуру границы КДФ T_2

$$T_2 = \frac{q}{4\pi\lambda R_{kf}} \exp\left(-\frac{vR_{kf}}{2\chi}\right) + T_\infty . \quad (13)$$

Из уравнений (12) и (13) получим выражение

$$\frac{(T_1 - T_2)}{(T_2 - T_\infty)} \frac{r}{R_{kf}} = \exp\frac{v}{2\chi}(R_{kf} - r) . \quad (14)$$

В условиях нашего эксперимента показатель экспоненты в правой части выражения (4) порядка $\sim 10^{-2}$. Поэтому уравнение (14) может быть представлено как

$$(T_1 - T_\infty)r = (T_2 - T_\infty)R_{kf} . \quad (15)$$

Отсюда

$$R_{kf} = \frac{(T_1 - T_\infty)r}{(T_2 - T_\infty)} . \quad (16)$$

С учётом (10) и (14) дрейфовое перемещение кластера в электростатическом поле макрочастицы при условии T_1 больше T_2 за время релаксации заряда макрочастицы примет вид

$$\Delta z_{dr} = \frac{UQ}{4\pi\epsilon\epsilon_0 R_{kf}^2} \tau. \quad (17)$$

Если температура макрочастицы падает и выполняется условие $T_1 \leq T_2$, к-фаза образуется непосредственно у поверхности макрочастицы. Из уравнения (16) следует, что $R_{kf} = r$. В выражении для дрейфового перемещения кластера в электростатическом поле макрочастицы будет фигурировать r .

$$\Delta z_{dr} = \frac{UQ}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r^2} \tau. \quad (18)$$

Результирующее перемещение кластера от границы образования к-фазы, обусловленное как диффузией, так и дрейфом, оценим аддитивным образом, с использованием уравнения (1), (18).

$$\Delta z = \Delta z_{diff} + \Delta z_{dr}. \quad (19)$$

Решение вышеприведённых уравнений позволяет оценить смещение кластера от границы образования к-фазы за время релаксации заряда макрочастицы, как при положительном, так и при отрицательном заряде макрочастицы.

Макрочастица тантала, окружённая к-фазой Ta_2O_5 , заряжается положительно [1, 2]. Кластер Ta_2O_5 имеет единичный элементарный положительный заряд, поэтому как диффузионное, так и дрейфовое смещение кластера направлено от поверхности макрочастицы. Расстояние от поверхности макрочастицы до границы образования к-фазы $\Delta R_{kf} = R_{kf} - r$ определено с использованием (16).

$$\Delta R_{kf} = r \frac{(T_1 - T_2)}{(T_2 - T_\infty)}. \quad (20)$$

Смещение кластеров Ta_2O_5 (19) от границы образования к-фазы при температуре образования к-фазы $T_1 = 3000$ К и $T_1 = 2500$ К за время τ накопления макрочастицей 0.98 равновесного заряда, соответственно, составило $\Delta z = 4.5 \cdot 10^{-7}$ м – 10^{-6} м (при $T_1 = 3000$ К $\Delta z_{diff}/\Delta z_{dr} \approx 2$). При температуре $T_1 = 2200$ К за время накопления 0.8 равновесного заряда кластер сместится на $\Delta z = 3.6 \cdot 10^{-6}$ м (при $T_1 = 2200$ К $\Delta z_{diff}/\Delta z_{dr} \approx 0.7$). Эти смещения составляют от 0.3% до 6% от величины ΔR_{kf} (20) и не могут существенно повлиять на точность приведённой выше расчётной схемы, определяющей величину заряда макрочастицы, представленной уравнениями [1]. При температуре макрочастицы Ta $T_1 \leq 2000$ К за время накопления $\tau = 0.8$ равновесного заряда кластер сместится от границы к-фазы на расстояние порядка ΔR_{kf} . При таких условиях концентрация к-фазы у границы ее образования может быть меньше значения определяемого уравнением (19). Соответственно уменьшается и концентрация электронов в сравнении с расчётным значением [1]. Выражение, определяющее величину положительного заряда макрочастицы тантала [1], может дать ее заниженное значение.

Макрочастица меди, окружённая к-фазой Cu_2O , заряжается отрицательно. Кластер Cu_2O , как и в предыдущей ситуации, имеет один элементарный поло-

жительный заряд. В этом случае диффузионное дрейфовое смещение кластера направлено противоположно

$$\Delta z = \Delta z_{diff} - \Delta z_{dr}. \quad (21)$$

Оценка с использованием выражения (21) показывает, что при температуре макрочастицы меди $1800 \text{ K} \leq T_1 \leq 2800 \text{ K}$ диффузионное смещение кластера Cu_2O от границы образования κ -фазы превышает дрейфовое смещение. Эти величины порядка $10^{-9} \text{ м} - 10^{-6} \text{ м}$ (при $T_1 = 1800 \text{ K}$ $\Delta z_{diff}/\Delta z_{dr} \approx 0.6$). Результирующее смещение кластера (21) за время накопления макрочастицей меди $0.98 - 0.95$ равновесного заряда при температуре макрочастицы $2200 \text{ K} \leq T_1 \leq 2800 \text{ K}$ $\Delta z = 10^{-7} \text{ м} - 2.4 \cdot 10^{-7} \text{ м}$ (при $T_1 = 2800 \text{ K}$ $\Delta z_{diff}/\Delta z_{dr} \approx 1.3$). Эти смещения составляют $0.24\% - 3\%$ от величины ΔR_{kf} , что составляет 0.085% величины радиуса макрочастицы меди. Таким образом, за время релаксации отрицательного заряда макрочастицы меди при $1800 \text{ K} \leq T_1 \leq 2800 \text{ K}$ результирующее смещение кластера Cu_2O от границы образования κ -фазы составляет незначительную долю характерных размеров системы макрочастица – граница образования κ -фазы и не может существенно повлиять на точность определения заряда макрочастицы в [1]. При температуре макрочастицы меди $T_1 \leq 1600 \text{ K}$ дрейфовое смещение кластера превышает диффузионное смещение, так что результирующее смещение направлено к поверхности макрочастицы 1600 K $\Delta z \sim 30 \cdot 10^{-6} - 12 \cdot 10^{-6} \text{ м}$ одного порядка с радиусом макрочастицы. Концентрация κ -фазы у поверхности макрочастицы может быть больше ее значения, определяемого уравнением (19). Концентрации электронов у поверхности макрочастицы увеличивается в сравнении с её расчётным значением [1]. Уравнение в [1], определяющее величину равновесного отрицательного заряда макрочастицы, может дать её заниженное значение.

Литература:

1. *Chernenko O.S., Semenov K.I., Lyalin L.A., Kalinchak V.V., Mandel O.V.* Heat exchange and charging of metallic particles surrounded by condensed dispersed phase of its oxide // Ukrainian journal of physics. 2011. №11. P. 1265 - 1269.
2. *Lyalin L.A., Semenov K.I., Semenov A.K., Kalinchak V.V., Kopyt N.Kh.* The temperature dependence of an equilibrium thermoemitting charge of a metallic particle surrounded with a nanodisperse condensed phase // Ukrainian journal of physics. – 2011. – №11. – P. 1295-1299.
3. *Корнилов В.Н., Шошин Ю.Л., Альтман И.С., Семенов К.И.* Экспериментальное исследование структуры зоны горения и радиационных теплотерь одиночных частиц магния реагирующих при естественной и вынужденной конвекции // Физика аэродисперсных систем. – 2002. – №39. – С.109-121.
4. *Лялин Л.А., Семенов К.И., Копыт Н.Х.* Образование ионизированной конденсированной дисперсной фазы вокруг высокотемпературной металлической частицы // Химическая и радиационная физика. Под ред. А. А. Берлина, И. Г. Ассовского. Т. 4. Сер. Космический вызов XXI века. – С. 89-98.
5. *Смирнов Б.М.* Кластерная плазма // Успехи физических наук. – 2000. – Т. 170. №5. – С. 495-534.
6. *Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л.* О термодиффузии наночастиц в газах // Журнал технической физики. – 2010. – Т. 80, №. 8. – С. 49-52.
7. *Ферцигер Дж., Канер Г.М.* Математическая теория процессов переноса в газах. – М.: Мир, 1976. – 554 с.

8. Рудяк В.Я. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 1. Кинетическая теория. – Новосибирск: НГАСУ, 2004. – 320 с.
9. Шубин Ф.В. Тепловые процессы при сварке / конспект лекций. – Под ред. В.М. Качалова. – М.: Моск.энерг.ин-т, 1985. – 44 с.

Семенов К.И., Копит М.Х.

Вплив дифузійно-дрейфової нестійкості межі утворення k - фази у поверхні нагрітої макрочастинки на її заряд.

АНОТАЦІЯ

Розглянуто вплив дифузійної дрейфової нестійкості межі утворення k -фази навколо нагрітої металеві макрочастинки на еволюцію її термоемісійного заряду. Показано, що зсув k -фази наночастинок за час релаксації заряду макрочастинки не приводить до істотної помилки в його розрахунку.

Semenov K.I., Kopit M.H.

Influence of diffusive-drift instability of k - phase formation boundary near hot macroparticle on its charge

SUMMARY

Diffusive-drift instability of k - phase formation boundary near hot macroparticle influence on its thermoemission charge evolution is studied. It is shown that k -phase displacement during charge relaxation time doesn't affect on charge calculated value.