

01.1;03.4

Влияние гомогенной нуклеации на параметры пара вблизи поверхности испарения: упрощенный подход

© В.Ю. Левашов¹, В.О. Майоров¹, А.П. Крюков²¹ Институт механики Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия² Национальный исследовательский университет „МЭИ“, Москва, Россия

E-mail: vyl69@mail.ru, levashovvy@imec.msu.ru

Поступило в Редакцию 15 августа 2022 г.

В окончательной редакции 6 сентября 2022 г.

Принято к публикации 6 сентября 2022 г.

Представлен подход, позволяющий оценить необходимость учета/неучета процесса гомогенной нуклеации на течение пара, образовавшегося вблизи межфазной поверхности в результате испарения. Показано, что для оценок необходима информация о величине коэффициента поверхностного натяжения капель критического размера. Рассмотрено влияние процесса гомогенной нуклеации на испарение различных веществ: воды, этанола и метанола. Результаты показывают, что для воды учет процесса гомогенной нуклеации необходим только для степеней пересыщения больше 20 в отличие от испарения метанола, когда гомогенную нуклеацию необходимо учитывать при любых степенях пересыщения.

Ключевые слова: гомогенная нуклеация, испарение, степень пересыщения.

DOI: 10.21883/PJTF.2022.21.53703.19342

Конденсация в газовой фазе играет важную роль как в природных явлениях, так и в различных технологических процессах [1]. Как отмечается в [2], круг явлений, описываемых задачей конденсации, огромен. Теория образования и роста зародышей становится все более актуальной с развитием материаловедения, нанотехнологии, микроэлектроники. В работе [3] показано, что по мере увеличения интенсивности испарения образующийся пар оказывается все более пересыщенным. Даже при малых интенсивностях испарения степень пересыщения пара (т.е. отношение парциального давления пара к его давлению насыщения) вблизи межфазной поверхности больше единицы, а при увеличении интенсивности процесса резко возрастает. В этих условиях может реализоваться процесс гомогенной конденсации пара [4]. В качестве примеров образования капель над испаряющейся поверхностью можно отметить данные работ [5,6], в которых наблюдалось формирование капельной структуры над поверхностью испаряющейся жидкости, получившей название „капельный кластер“.

Известно, что интенсивность процесса испарения определяется температурой испаряющейся поверхности и параметрами окружающей среды вблизи этой поверхности (температурой, относительной влажностью, наличием неконденсируемых газов) [7]. Образующиеся в результате гомогенной конденсации капли могут приводить к изменению параметров среды в непосредственной близости от поверхности испарения, что в свою очередь может приводить к изменению интенсивности процесса испарения.

В работе представлен подход, позволяющий на базе простых соотношений классической теории гомогенной нуклеации сделать предварительные оценки необходимости учета/неучета влияния процесса нуклеации на интенсивность испарения.

Рассматривается одномерная стационарная задача об испарении жидкости в полубесконечное пространство, при этом предполагается, что часть пересыщенного пара конденсируется при его движении от x_1 до x_2 . Схема задачи представлена на рис. 1. Поток пара, „вышедшего“ из зоны конденсации, связан с j_1 и j_{l2} соотношением $j_2 = j_1 - j_{l2}$. Необходимо подчеркнуть, что зона конденсации указана на рисунке схематично. Информация о ее положении и протяженности (ширине) может быть получена, например, с привлечением решений кинетического уравнения Больцмана.

При движении пара вдоль оси x величина удельного массового потока, сконденсировавшегося (за счет гомогенного зародышеобразования) вещества (j_l), может быть определена с помощью следующего соотношения:

$$\frac{dj_l}{dx} = m_{cr} J_{CNT}. \quad (1)$$

Здесь m_{cr} — масса капли критического радиуса, J_{CNT} — скорость нуклеации.

Согласно классической теории [1,4], скорость нуклеации может быть определена следующим образом:

$$J_{CNT} = \beta \frac{\rho_v^2}{\rho_l} \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi m^3}} \exp\left(-\frac{W}{kT}\right). \quad (2)$$

Здесь β — коэффициент конденсации, m — масса молекулы пара, ρ_v — плотность пара, ρ_l — плотность

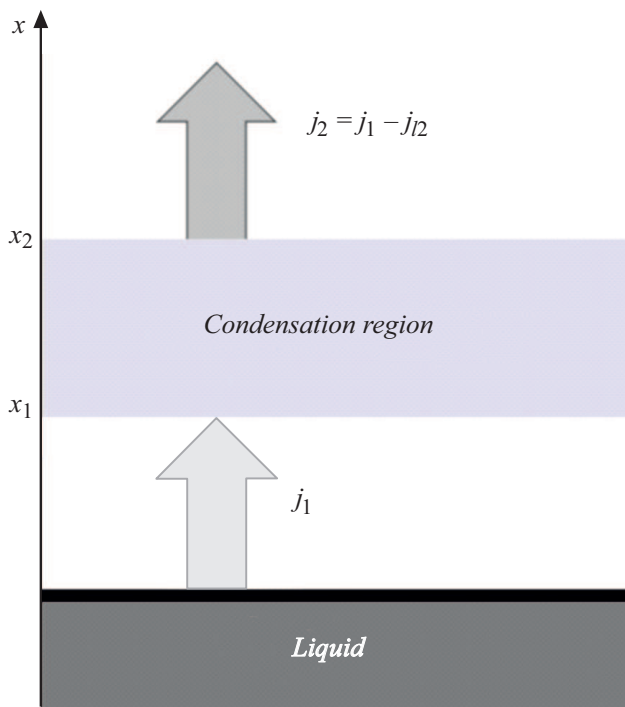


Рис. 1. Схема задачи. j_1 — плотность потока массы при испарении с поверхности жидкости, j_{12} — плотность потока массы сконденсировавшегося вещества.

жидкости, σ — коэффициент поверхностного натяжения, k — постоянная Больцмана, T — температура окружающей среды, W — работа образования капли критического радиуса (r_{cr}),

$$W = \frac{4\pi r_{cr}^2 \sigma}{3}. \tag{3}$$

Степень пересыщения связана с критическим радиусом капли следующим образом:

$$\ln S = \frac{2\sigma M}{\rho_l r_{cr} k N_A T}. \tag{4}$$

Здесь S — степень пересыщения, M — молярная масса вещества, N_A — постоянная Авогадро.

Уравнение (1) может быть проинтегрировано и записано как

$$j_{12} = \frac{4}{3} \pi r_{cr}^3 \rho_l J_{CNT} \Delta x. \tag{5}$$

Из (5) следует, что конденсационный массовый поток прямо пропорционален ширине зоны конденсации $\Delta x = x_2 - x_1$.

Для оценки влияния процесса гомогенной нуклеации на параметры потока необходимо существование взаимосвязи между шириной зоны конденсации и временем образования капли критического размера. Действительно, если среднее время образования

капли критического размера (τ_f) больше времени нахождения пара в области пересыщения (τ_d), то процесс гомогенной нуклеации реализоваться не сможет, т.е. необходимо выполнение следующего условия: $\tau_f \leq \tau_d$. Таким образом, для определения возможности процесса гомогенной нуклеации необходимы оценки по времени образования капли критического размера (τ_f).

Выражение (2) позволяет определить число капель критического размера, сформировавшихся в объеме V за единицу времени. Следовательно, характерное время образования одной капли может быть определено следующим образом:

$$\tau_f = \frac{1}{J_{CNT} V}. \tag{6}$$

Здесь V — объем, в котором образуется одна капля критического радиуса.

Очевидно, что в объеме V должно содержаться по крайней мере такое же число молекул пара, как в капле критического радиуса, т.е., если предположить, что все молекулы пара, находящиеся в объеме V , перейдут в жидкую фазу объемом V_{cr} , можно получить взаимосвязь между искомым объемом V и объемом критической капли: $V \rho_v = V_{cr} \rho_l$.

В этом случае время образования капли критического размера может быть найдено следующим образом:

$$\tau_f = \left(J_{CNT} \frac{4}{3} \pi r_{cr}^3 \frac{\rho_l}{\rho_v} \right)^{-1}. \tag{7}$$

Ширина зоны конденсации определяется как произведение скорости движения пара на время образования критической капли:

$$\Delta x = \frac{j_1}{\rho_v} \tau_f. \tag{8}$$

Представленная оценка дает минимальную протяженность зоны конденсации, поскольку в этом случае весь пар, „поступающий“ с поверхности испарения, должен конденсироваться в результате гомогенной конденсации. Действительно, из (5), (7) и (8) можно получить, что $j_{12} = j_1$.

На рис. 2, 3 приведены расчетные зависимости минимальной протяженности зоны конденсации Δx и времени образования зародыша критического размера τ_f для разных веществ от степени пересыщения. Диапазон изменения степени пересыщения выбирался исходя из результатов кинетического анализа задачи об испарении [3].

Классическая теория зачастую не позволяет получить значения скоростей нуклеации, наблюдаемых в эксперименте, причем различия могут достигать нескольких порядков. Как отмечается в [8], одной из нерешенных проблем классических моделей является обработка малых кластеров. Например, в [9,10] показано, что в зависимости от вещества, диапазона раз-

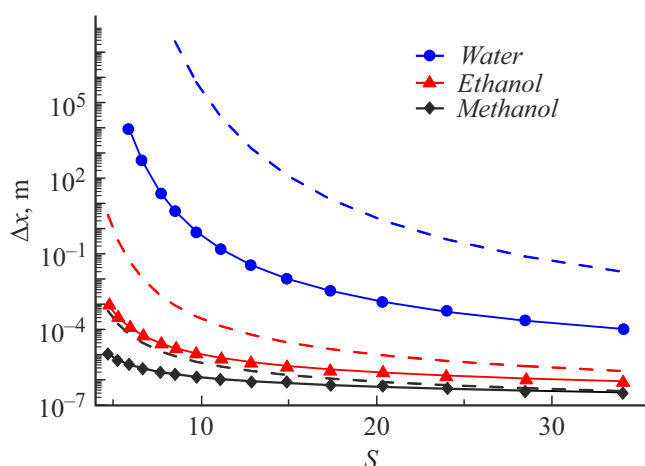


Рис. 2. Зависимость минимальной ширины зоны конденсации от степени пересыщения. Сплошные линии с символами — коэффициент поверхностного натяжения для больших капель; штриховые линии — коэффициент поверхностного натяжения для капель критического размера (на 25% больше, чем для больших капель).

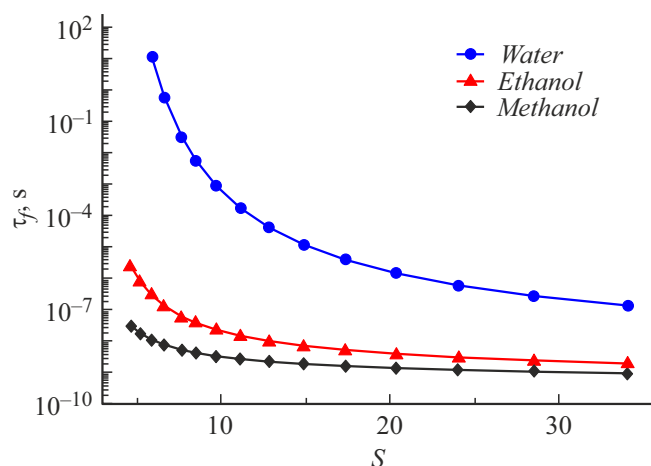


Рис. 3. Зависимость времени образования кластера критического размера от степени пересыщения.

меров капель, а также температуры величина поверхностного натяжения малых кластеров может превышать значения, полученные для больших капель, на 5–25%. На рис. 2 штриховыми линиями представлены данные по величине зоны конденсации с учетом предположения о том, что коэффициент поверхностного натяжения для капель критического размера может быть на 25% больше, чем для больших капель.

Проведенные оценки показывают, что для случая испарения метанола процесс гомогенной нуклеации необходимо принимать во внимание практически при любых степенях пересыщения (интенсивностях испарения): протяженность зоны конденсации составляет

доли миллиметра, при этом величина поверхностного натяжения не оказывает существенного влияния на этот вывод. В то же время для случая испарения воды это не так. Например, если считать, что коэффициент поверхностного натяжения не зависит от размера капли (сплошные линии с кружками на рис. 2), ширина зоны конденсации для степени пересыщения 20 составляет 1 mm. Если же поверхностное натяжение становится на 25% больше, то ширина зоны конденсации в этом случае ≈ 2 m, а для степени пересыщения 35 составляет ≈ 1 cm. Достоверность полученных результатов расчетных оценок обоснована правомерностью применения в качестве первого приближения классической теории гомогенной нуклеации. Показателем адекватности модели реальности можно считать достаточно разумные расчетные данные, полученные при различных значениях коэффициентов поверхностного натяжения, приведенные на рис. 2 и 3.

Представленный подход является оценочным. В общем случае для корректного учета влияния процесса гомогенной нуклеации на характер течения необходимо решение полной задачи об испарении и конденсации.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00044.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] C. Li, R. Signorell, J. Aerosol Sci., **153**, 105676 (2021). DOI: 10.1016/j.jaerosci.2020.105676
- [2] Л.А. Максимов, Ю.В. Михайлова, ЖТФ, **85** (2), 12 (2015). [L.A. Maksimov, Yu.V. Mikhailova, Tech. Phys., **60** (2), 166 (2015). DOI: 10.1134/S1063784215020164].
- [3] D.A. Labuntsov, A.P. Kryukov, Int. J. Heat Mass Transf., **22** (7), 989 (1979). DOI: 10.1016/0017-9310(79)90172-8
- [4] V.I. Kalikmanov, *Nucleation theory* (Springer, Netherlands, 2013), p. 17.
- [5] А.А. Федорец, Письма в ЖЭТФ, **79** (8), 457 (2004). [A.A. Fedorets, JETP Lett., **79** (8), 372 (2004). DOI: 10.1134/1.1772434].
- [6] A.A. Fedorets, L.A. Dombrovsky, Int. J. Heat Mass Transf., **104**, 1268 (2017). DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.09.087
- [7] V.Yu. Levashov, A.P. Kryukov, I.N. Shishkova, Int. J. Heat Mass Transf., **127** (Pt B), 115 (2018). DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.07.069

- [8] J. Bian, D. Guo, Y. Li, W. Cai, Y. Hua, X. Cao, *Energy*, **249**, 123610 (2022). DOI: 10.1016/j.energy.2022.123610
- [9] О.В. Боровкова, С.В. Восель, А.А. Онищук, А.М. Бакланов, В.М. Фомин, *ДАН*, **449** (1), 45 (2013). DOI: 10.7868/S0869565213070141 [O.V. Borovkova, S.V. Voseľ, A.A. Onischuk, A.M. Baklanov, V.M. Fomin, *Dokl. Phys. Chem.*, **449** (1), 29 (2013). DOI: 10.1134/S0012501613030019].
- [10] С.В. Валиулин, В.В. Карасев, С.В. Восель, А.А. Онищук, *Коллоид. журн.*, **75** (1), 17 (2013). DOI: 10.7868/S0023291213010114 [S.V. Valiulin, V.V. Karasev, S.V. Voseľ, A.A. Onischuk, *Colloid J.*, **75** (1), 14 (2013). DOI: 10.1134/S1061933X13010109].