

В.И. Букатый, Т.К. Кронберг

ОБРАЗОВАНИЕ АЭРОЗОЛЯ ОКРЕСТНОСТИ УГЛЕРОДНОЙ ЧАСТИЦЫ, ИСПАРЯЮЩЕЙСЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Описана математическая постановка задачи испарения в воздухе одиночной сферической тугоплавкой частицы с учетом переконденсации испаренного вещества. Приводится алгоритм численной реализации задачи. Получено, что в окрестности частицы формируется облако из субмикронного аэрозоля высокой концентрации. Обсуждаются результаты.

К настоящему времени достаточно полно исследованы нелинейные эффекты, возникающие при горении углеродных частиц в поле мощного лазерного излучения (МЛИ) [1–4]. При интенсивностях, предшествующих оптическому пробую, нелинейные эффекты могут быть также связаны и с испарением материала частицы [5,6] с последующей переконденсацией испаренного вещества. Данная статья посвящена изучению гомогенной конденсации пересыщенного пара в окрестности испаряющейся тугоплавкой частицы. Особенностью задачи является наличие высоких температурных градиентов, что не позволяет обобщить результаты по переконденсации, полученные для жидкокапельного аэрозоля [7].

Математическая постановка задачи

Рассмотрим одиночную углеродную сферическую частицу радиусом R_0 , свободновзвешенную в неподвижном воздухе. При нагреве лазерным излучением интенсивности I_0 до температуры свыше 3700 К материал частицы начинает испаряться. Анализ характерных времен процесса показал, что можно использовать квазистационарное сферически-симметричное приближение задачи испарения одиночной тугоплавкой частицы с учетом гомогенной переконденсации испаренного вещества.

Для компонент гетерогенной смеси запишем уравнения неразрывности (1–3) и теплового баланса (4)

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(-r^2 \rho_0 v y_1 + \rho_0 D(T) r^2 \frac{dy_1}{dr} \right) &= \frac{dM}{dt} (r, y_1) \frac{1}{m_0}; & (1) \\ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(-r^2 \rho_0 v y_2 + \rho_0 D(T) r^2 \frac{dy_2}{dr} \right) &= 0; & (2) \\ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(-r^2 \rho v c_s(r) \right) &= -\frac{1}{m_0} \frac{dM}{dt} (r, y_1); & (3) \\ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \lambda_0(T) \frac{dT}{dr} + c_{q1} T(Q - q(r, y_1)) \right) + p(r) &= 0. & (4) \end{aligned} \right.$$

Система уравнений (1)–(4) дополняется граничными условиями

$$\left\{ \begin{aligned} 4\pi R_0^2 \rho_0 v y_1 - 4\pi R_0^2 \rho_0 D(T) \frac{dy_1}{dr} &= J_1, & (5) \\ 4\pi R_0^2 \rho_0 v y_2 - 4\pi R_0^2 \rho_0 D(T) \frac{dy_2}{dr} &= 0, & (6) \\ y_1(r = \infty) &= 0, & (7) \\ y_2(r = \infty) &= y_{2\infty}, & (8) \\ c_3(r = R_0) &= 0, & (9) \\ T(r = R_0) = T_s, \quad T / r = \infty &= T_0. & (10) \end{aligned} \right.$$

Введенные обозначения имеют следующий смысл: r – текущая координата (начало координат совпадает с центром испаряющейся частицы); ρ_0 – концентрация парогазовой компоненты гетерогенной смеси (размерность $1/\text{м}^3$); ρ_i – концентрация i -й компоненты гетерогенной смеси ($i = 1$ – углеродный пар C ; $i = 2$ – воздух; $i = 3$ – сконденсированный углерод); $y_i = \rho_i/\rho_0$ ($i = 1, 2$) – безразмерная концентрация парогазовой смеси; $c_i = \rho_i/\rho$ – безразмерная концентрация компонент гетерогенной смеси; ρ – концентрация гетерогенной смеси; ρ_3 – суммарное число атомов сконденсированного вещества в единице объема; m_0 – масса атома углерода; v – скорость стефановского потока ($v \ll c_{зв}$, $c_{зв}$ – скорость звука); D – коэффициент взаимодиффузии; dM/dt – скорость убыли массы пара в единице объема за счет конденсации; T – температура; λ_0 – коэффициент теплопроводности парогазовой смеси; c_{p1} – теплоемкость углерода в расчете на один атом; $Q = 4\pi r^2 \rho v$ – полный поток смеси через сферу радиусом r ; $q(r, y_i) = \frac{4\pi}{m_0} \int_{R_0}^r \frac{dM}{dt}(r, y_i) r^2 dr$ – число атомов пара, сконденсировавшихся в единицу времени; $p(r)$ – объемная плотность энергии в единицу времени, обусловленной выделением тепла при фазовом переходе и поглощением энергии лазерного излучения сконденсированным аэрозолем. Температура поверхности частицы T_s однозначно определяется интенсивностью падающего излучения и радиусом испаряющейся частицы. Поток числа атомов углерода J_1 с поверхности частицы (граничное условие (5)) определяется кинетикой процесса переноса в кнудсеновском слое. В предельном случае сплошной среды при условии малой концентрации пара $y_2/y_1 \gg 1$ поток молекул J_1 определяется выражением [8]

$$J_1 = 9,4 \pi R^2 (k_B T_s / 2\pi m_0)^{1/2} (\rho_1 - \rho_n) K_n / \beta^2,$$

где k_B – постоянная Больцмана; ρ_n – концентрация насыщенных паров углерода; K_n – число Кнудсена; $\beta = L/k_B T_s$ – отношение теплоты фазового перехода к средней тепловой энергии молекул.

Убыль паровой фазы описывается скоростью конденсации пара в единицу времени в единице объема

$$\frac{dM}{dt}(r, y_i) = \rho_c \int_{a_{кр}}^{\infty} 4\pi a^2 \frac{da}{dt}(r, y_i) f(t, r, a) da + \frac{4}{3} \pi a_{кр}^3 \rho_c I_{ct}(r, y_i). \quad (11)$$

Здесь ρ_c – плотность углерода; a – радиус конденсационно растущей частицы; I_{ct} – стационарная изотермическая скорость зародышеобразования [9]; f – функция распределения вторичных частиц по размерам. В (11) прирост общей массы конденсата определяется образованием новых устойчивых зародышей радиусом $a_{кр}$ и конденсационным ростом со скоростью da/dt уже ранее сформированных зародышей. Радиус критического зародыша $a_{кр}$ рассчитывается по формуле [10]

$$d \ln I_{ct} / d \ln s = q_* + 1,$$

где q_* – число молекул в зародыше критического размера; $s = \rho_1/\rho_n$ – степень пересыщения. Данная формула справедлива для кластеров малых размеров, для которых формула Кельвина–Гиббса может не выполняться. Динамика функции распределения вторичных частиц по размерам описывается кинетическим уравнением [11]

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \dot{a} \frac{\partial f_0}{\partial a} + v \frac{\partial f_0}{\partial r} = \frac{I_{ct}}{\rho} \delta(a - a_{кр}), \quad (12)$$

где $f_0 = f/\rho$, $\delta(a - a_{кр})$ – дельта-функция Дирака. При записи (12) использовано условие независимости скорости роста \dot{a} от радиуса в свободномолекулярном режиме. Краевые условия имеют вид

$$\begin{cases} f_0(t=0, r, a) = 0, \\ f_0(t, r=R_0, a) = 0, \\ f_0(t, r, a < a_{кр}) = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Отметим, что уравнение (12) с краевыми условиями (13) описывает гомогенную конденсацию вторичных частиц с радиусом $a \geq a_{кр}$ [11]. Применяя метод преобразования Лапласа для функции f_0 в сочетании с принципом замораживания \dot{a} , v , ρ , $I_{ст}$ по переменной t , получим решение в виде

$$\begin{cases} f = \frac{I_{ст}(\Theta) T(r)}{\dot{a}(\Theta) T(\Theta)} & \text{при } \int_{\Theta}^x \frac{1}{v(r)} dr \leq t, \\ f = 0 & \text{при } \int_{\Theta}^x \frac{1}{v(r)} dr > t. \end{cases} \quad (14)$$

Здесь Θ – координата, где образовался устойчивый зародыш с радиусом $a_{кр}$. Величина Θ является корнем уравнения $a = a_{кр} + \int_{\Theta}^r \frac{\dot{a}(r)}{v(r)} dr$. Из решения кинетического уравнения (12) следует,

что основную роль в формировании спектра частиц играет скорость зародышеобразования из-за ее сильной зависимости от термодинамических параметров среды. Система уравнений (1)–(4), (11), (12) с граничными условиями (5)–(10), (13) замыкается уравнениями идеального газа для компонент парогазовой смеси, динамикой радиуса испаряющейся и растущей частиц и может быть решена с помощью численных методов.

Метод решения

Введя замену переменных $x^n = -R_0/r$, $dz = \lambda_0 dT$ и проинтегрировав уравнения (1)–(4), приведем (1) и (3) к виду

$$\frac{d^2 y_1}{dx^2} + \left[-\frac{1}{y_1} + \frac{1-n}{x} + \frac{1}{\rho_0(x) D(x)} \frac{d(\rho_0 D)}{dx} - \frac{x^{n-1} Q n}{4\pi \rho D R_0 y_1} \frac{1}{dx} - \frac{4\pi R_0^3 n^2 dM/dt}{4\pi \rho D R_0 m_0 y_1 x^{2n+2}} \right] y_1 = -1, \quad (15)$$

$$c_3(x, y_1) = \frac{4\pi R_0 n}{m_0} \int_{-1}^x \left(\frac{dM}{dt}(x, y_1) / x^{3n+1} \right) dx, \quad (16)$$

$$\frac{d^2 z}{dx^2} + \left(-\frac{1}{z} + \frac{1-n}{x} \frac{dz}{dx} + \frac{c_{p1} m \eta_0(z) x^{n-1}}{4\pi R_0 z} \frac{dg(x, z)}{dx} + \frac{c_{p1} n x^{n-1}}{4\pi R_0 \lambda_0(z) z} \frac{dz}{dx} (g(x, z) - Q) \right) z = -1 - \frac{R_0^2 n^2 \rho(x)}{x^{2n+2}}, \quad (17)$$

$$\text{где } \eta_0(z) = \int_0^z \frac{dz}{\lambda_0(z)}.$$

Граничные условия к уравнениям запишутся в виде

$$\begin{cases} y_1(x=-1) = y_{1s}, & (18) \\ y_1(x=0) = 0, & (19) \\ c_3(x=-1) = 0, & (20) \\ z(x=-1) = z_s, & (21) \\ z(x=0) = 0, & (22) \end{cases}$$

где $z_s = \int_{T_0}^{T_s} \lambda_0(T) dT$.

Уравнения (14), (16) взаимозависимы, поэтому концентрация пара $y_{1,s}$ на поверхности частицы может быть определена только методом итераций, при этом в качестве нулевого приближения нужно брать значение $y_{1,s}^0$, равное концентрации пара на поверхности частицы в отсутствие конденсации. В этом случае величина $y_{1,s}^0$ является корнем трансцендентного уравнения [2]

$$-\ln(1 - y_{1,s}^0) = (y_n(T_s) - y_{1,s}^0) R_0 (k_B T_s / 2\pi m_0)^{1/2} / D_{эф}, \text{ где } D_{эф} = 1 / \int_{R_0}^{\infty} \frac{T(r)}{T_s D(T) r^2} dr.$$

Из решения уравнения (15) с граничными условиями (18), (19) определяется диффузионный поток с поверхности испаряющейся частицы

$$j_D = -4\pi R_0^2 \rho_0 D(T_s) \frac{dy_1}{dr} / r = R_0.$$

Представляя dy_1/dr в виде разностной производной

$$\frac{dy_1}{dr} = \frac{y_1(R_0 + 2H) - y_1(R_0)}{2H} + O(H^2)$$

и используя граничное условие (5) для потока испарившегося вещества, найдем следующее приближение для концентрации пара на поверхности:

$$y'_{1,s} = (D \rho_0 y_1(R_0 + 2H) / 2H + y_n \alpha_s) / (\rho_0 V + \alpha_s + \rho_0 D / 2H), \quad (23)$$

где $\alpha_s = \xi \rho_0 (k_B T_s / 2\pi m_0)^{1/2}$, $H = R_0(1/x_1 - 1)$ – шаг разностной сетки. При разбиении отрезка интегрирования $[-1, 0]$ на 2^n частей $x_1 = -1 + 1/2^n$. Итерационное приближение $y'_{1,s}$ используется в качестве граничного условия для уравнения (16). С помощью полученного решения $y_1(x)$ на основе (23) строится следующее приближение для граничных условий (18, 19). Итерационный процесс обрывается при условии $(y_{1,s}^{i+1} - y_{1,s}^i) / y_{1,s}^i \leq 10^{-4}$. Уравнения (15, 17) имеют символический вид

$$d^2 U / dx^2 + V(x, U) U = g(x)$$

и решаются методом Мультигоппа [12].

Обсуждение результатов

Как показали численные расчеты, в окрестности испаряющейся частицы существует область высоких пересыщений пара, где степень пересыщения достигает высоких значений ($s \approx 2 \div 3$) (рис. 1).

Рост степени пересыщения связан с более высокой скоростью поступления в систему атомов паров углерода по сравнению со скоростью убыли атомов пара за счет конденсации. В этой области идет интенсивное зародышеобразование. Быстро возрастает суммарная площадь поверхности вторичных частиц, на которые конденсируется пар, что приводит к увеличению скорости убыли пара и, как результат, уменьшению степени пересыщения. Паровая фаза быстро истощается (рис. 2). Основная масса пара конденсируется в кольцевой зоне, где степень пересыщения существенно превосходит единицу (см. рис. 1). Здесь наблюдается скачок доли переконденсированного вещества, равной $f_k = \rho_3 / (\rho_3 + \rho_1)$ (рис. 3). При дальнейшем расширении гетерогенной смеси давление паров углерода медленно стремится к давлению насыщенного пара (протяженность этой зоны составляет $2 \div 4$ радиуса частицы). Это соответствует слабому приращению массы вторичных частиц.

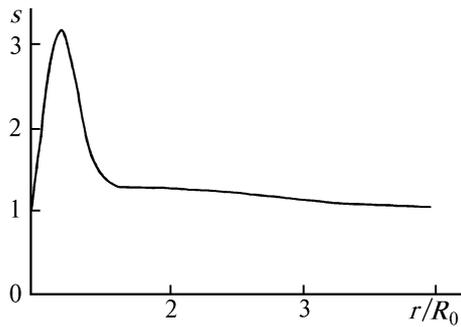


Рис. 1. Зависимость степени пересыщения s углеродного пара от расстояния r/R_0 в окрестности частицы радиусом $R_0 = 100$ мкм при интенсивности воздействующего излучения $I_0 = 2 \cdot 10^8$ Вт/м²

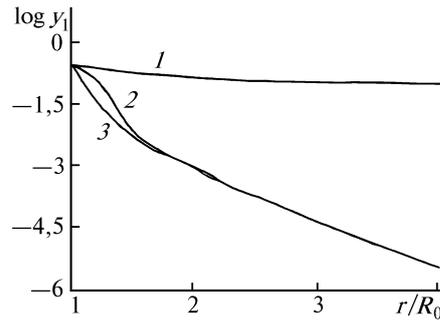


Рис. 2. Зависимость безразмерной концентрации углеродного пара в окрестности испаряющейся частицы от расстояния: 1 – без учета конденсации пересыщенных паров углерода, 2 – с учетом перекоонденсации, 3 – концентрация насыщенных паров углерода. Здесь $R_0 = 100$ мкм, $I_0 = 2 \cdot 10^8$ Вт/м²

Пройдя равновесное состояние, пар становится ненасыщенным. Полученные характерные зависимости (рис. 1 – 3) обусловлены резким изменением (в зависимости от расстояния) давления насыщенных паров, которое убывает по экспоненте $\sim \exp(-L/k_b T(r))$, а также скорости зародышеобразования.

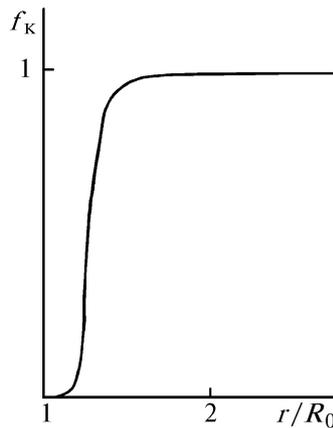


Рис. 3. Зависимость доли f_k перекоонденсированного вещества от безразмерного расстояния. Здесь $R_0 = 100$ мкм, $I_0 = 2 \cdot 10^8$ Вт/м²

Температура среды в окрестности частицы убывает как $\sim 1/r$. В зоне конденсации изменение температуры парогазовой смеси составляет $\Delta T \sim 1000$ К, что соответствует уменьшению давления насыщенных паров более чем на порядок. Как следствие, резко меняется скорость роста вторичных частиц (рис. 4). Непосредственно у поверхности испаряющейся частицы на расстоянии $r \sim 1,08 R_0$ наблюдается рост скорости изменения радиуса вторичных частиц, что связано с увеличением степени пересыщения. Как показали расчеты, в результате конденсации образуется субмикронный аэрозоль, что связано с малым временем активного роста вторичных частиц

$$t \sim \frac{dr}{v} = \frac{5 \cdot 10^{-5} \text{ м}}{10 \text{ м/с}} = 5 \cdot 10^{-6} \text{ с.}$$

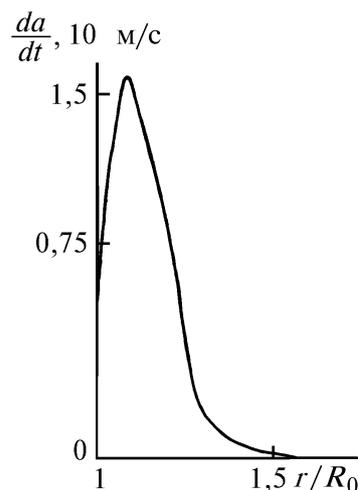


Рис. 4. Скорость изменения радиуса растущей частицы в зависимости от безразмерного расстояния.
 $R_0 = 100$ мкм, $I_0 = 2 \cdot 10^8$ Вт/м²

За это время при скорости роста $da/dt \sim 10^{-3}$ м/с радиус частицы достигает значения $a \sim 5 \cdot 10^{-9}$ м. Радиус устойчивого зародыша за это время составляет $\sim 10^{-9}$ м. Функция распределения вторичных частиц по размерам имеет узкий спектр, т.к. скорость зародышеобразования быстро убывает с расстоянием. В связи с малым временем активного роста частиц средний радиус с изменением расстояния практически не меняется, увеличивается лишь доля частиц модального радиуса. Таким образом, численная реализация задачи испарения частицы в атмосферном воздухе в мощном оптическом поле выявила следующие особенности:

1. Наблюдается двух-трехкратное пересыщение пара для крупных частиц $R_0 \sim 100$ мкм в предпробойном режиме.
2. Активное зародышеобразование и активный рост сконцентрировавшихся частиц происходят в узкой кольцевой зоне непосредственно вблизи поверхности первичной частицы.
3. В окрестности испаряющейся частицы формируется облако из субмикронного аэрозоля.

1. Мощное лазерное излучение в атмосферном аэрозоле / В.Е. Зуев, А.А. Землянов, Ю.Д. Копытин, А.В. Кузиковский Новосибирск: Наука, 1984. 224 с.
2. Букатый В.И., Суторихин И.А., Шайдук А.М. // Физика горения и взрыва. 1983. N 1. С. 73–76.
3. Пустовалов В.К., Хорунжий И.А. // Воздействие интенсивного лазерного излучения на твердый аэрозоль: Межвузовский научный сборник. Барнаул, 1987. С. 68–80.
4. Букатый В.И., Каплинский А.Е., Шайдук А.М. // IV Всесоюзное совещание по распространению лазерного излучения в дисперсной среде. (Тезисы докл.) Обнинск–Барнаул. 1988. Т. 2. С. 229–232.
5. Букатый В.И., Краснопевцев В.Н., Шайдук А.М. // Изв. вузов. Физика. 1986. N 10.
6. Букатый В.И., Краснопевцев В.Н., Шайдук А.М. // Физика горения и взрыва. 1988. №2. С. 41–48.
7. Волковицкий О.А., Седунов Ю.С., Семенов Л.П. // Распространение интенсивного лазерного излучения в облаках. Л.: Гидрометеоздат, 1982. 312 с.
8. Черняк В.Г., Маргилевский А.Е. // Теплофизика высоких температур. 1980. Т. 18. С. 1032–1039.
9. Зельдович Я.Б. // Журн. экспериментальной и теоретической физики. 1942. Т. 12. N 11–12. С. 525–534.
10. Беданов В.М., Ваганов В.С., Гадияк Г.В. и др. // Химическая физика. 1988. Т. 7. N 4. С. 555–563.
11. Баханов В.П. // Труды Укр. НИГМИ. М. 1971. Вып. 99. С. 11–20.
12. Дородницын А.А. // Кибернетика. 1988. N 4. С. 13–16.

Алтайский госуниверситет,
 Барнаул

Поступила в редакцию
 12 июля 1993 г.

V.I. Bukatyi, T.K. Kronberg. **Formation of Aerosol around a Carbon Particle Vaporized under the Action of Laser Radiation.**

In this paper we present a mathematical formulation of the problem on vaporization of an isolated fastmelting spherical aerosol particle taking into account recondensation of the evaporated substance. Algorithms of numerical solutions of the problem are given. As a result we obtained that a dense cloud of submicron particles is formed around a particle.