4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
5. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. М.: Наука, 1983.
6. Веселов М. Г., Лабзовский Л. Н. Теория атома. М.: Наука, 1986.
7. Джеммер М. Эволюция понятий квантовой механики. М.: Наука, 1985.

Геннадий Владимирович АНИКИН —
старший научный сотрудник
Института криосферы Земли СО РАН
кандидат физико-математических наук
Лев Степанович ПОДЕНКО —
старший научный сотрудник
Института криосферы Земли СО РАН
кандидат физико-математических наук
Александр Анатольевич ВАКУЛИН —
профессор кафедры механики многофазных систем,
доктор технических наук

УДК 541.18

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА РАБОТЫ ОБРАЗОВАНИЯ ЗАРОДЫША В ПРИСУТСТВИИ ИОНОВ ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ ПАР-ЖИДКОСТЬ

АННОТАЦИЯ. Предложен метод расчета работы образования зародыша в присутствии ионов при фазовых переходах пар-жидкость с учетом межфазной области.

Method of calculation for the work of formation of the critical nucleus in the presence of ion, including border of phases, by the vapon-liquid phase transition, to offer.

В присутствии ионов скорость конденсации пара может многократно возрастать [1, 2]. Это обстоятельство определяющим образом влияет на протекание многих природных и технологических процессов [3].

Считается, что величина и ширина максимума работы зародышеобразования определяет скорость образования зародышей в паре [4, 5]. В этой связи актуальной задачей является анализ влияния зарядов ионов на работу зародышеобразования.

Ранее получены аналитические выражения для работы образования сферического зародыша новой фазы в случае нахождения заряда внутри либо снаружи зародыша за исключением граничной области, заключенной между сферами радиуса R_1 и R_2 где $R_1 = R - r_u$, $R_2 = R + r_u$, R — радиус зародыша, r_u — радиус иона [6-9]. В настоящей работе предложен подход, позволяющий расширить область действия модели [6] на межфазный слой.

Как было показано в работе [8], энергия образования зародыша вблизи иона может быть записана в виде:

$$L = E_s\left(-\frac{2}{3}y^3 + y^2 - \frac{p}{y}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\varepsilon_2 l}{\varepsilon_2 l + \varepsilon_1 (l+1)}\left(\frac{y}{z}\right)^{2(l+1)}\right), \qquad (1)$$

когда ион находится вне зародыша (исключая пограничный слой);

$$L = E_s\left(-\frac{2}{3}y^3 + y^2 + \frac{p}{y}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\varepsilon_1(l+1)}{\varepsilon_2 l + \varepsilon_1(l+1)}\left(\frac{z}{y}\right)^{2l} + q_0\right), \qquad (2)$$

когда ион находится внутри зародыша (исключая пограничный слой). Здесь ε_1 — диэлектрическая проницаемость пара, ε_2 — диэлектрическая проницаемость жидкости, q_0 — константа.

$$E_s = 4\pi\sigma R_0^{\,2} \quad y = \frac{R}{R_0} \quad z = \frac{r}{R_0} \quad p = \frac{e^2 Z^2}{8\pi\varepsilon_0\varepsilon_2 R_0^{\,3}}\left(\frac{1}{\varepsilon_1} - \frac{1}{\varepsilon_2}\right) \qquad (3)$$

Здесь Z — кратность заряда иона, e — заряд электрона, ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, σ — коэффициент поверхностного натяжения, R_0 — критический радиус гомогенного зародышеобразования, r — расстояние от центра зародыша до центра иона, R — радиус зародыша. Для дальнейшего анализа введем функцию f(y,z), которая дается выражением:

$$f(y,z) = \frac{L}{E_s} \qquad (4)$$

С учетом (1), (2), (3):

$$f(y,z) = f2(y,z) \qquad (5)$$

$$f2(y,z) = -\frac{2}{3}y^3 + y^2 - \frac{p}{y}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\varepsilon_2 l}{\varepsilon_2 l + \varepsilon_1(l+1)}\left(\frac{y}{z}\right)^{2(l+1)} \qquad (6)$$

когда ион вне зародыша

$$f(y,z) = f1(y,z) \qquad (7)$$

$$f1(y,z) = -\frac{2}{3}y^3 + y^2 + \frac{p}{y}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\varepsilon_1(l+1)}{\varepsilon_2 l + \varepsilon_1(l+1)}\left(\frac{z}{y}\right)^{2l} + q_0 \qquad (8)$$

когда ион внутри зародыша.

Для расчета вклада в частоту зародышеобразования ионов, локализованных в пограничном слое, требуется знание зависимости f от y в интервале изменения y от $z-u$ до $z+u$, где $u = r_u/R_0$. Аппроксимируем полиномом функцию $f(y,z)$ в указанной области. Зададим полином следующим выражением:

$$f3(y,z,u) = a(z,u) + b(z,u)y + c(z,u)y^2 + d(z,u)y^3 \qquad (9)$$

Будем считать, что для функций *f1*, *f2*, *f3* выполняются следующие соотношения:

$$f2(z-u,z) = f3(z-u,z,u) \qquad (10)$$

$$\frac{\partial f2(z-u,z)}{\partial y} = \frac{\partial f3(z-u,z,u)}{\partial y} \qquad (11)$$

$$f1(z+u,z) = f3(z+u,z,u) \qquad (12)$$

$$\frac{\partial f1(z+u,z)}{\partial y} = \frac{\partial f3(z+u,z,u)}{\partial y} \qquad (13)$$

Поскольку

$$\frac{\partial f3(y,z,u)}{\partial y} = b(z,u) + 2c(z,u)y + 3d(z,u)y^2, \tag{14}$$

приходим к следующей системе уравнений:

$$f2(z-u,z) = a(z,u) + b(z,u)(z-u) + c(z,u)(z-u)^2 + d(z,u)(z-u)^3 \tag{15}$$

$$\frac{\partial f2(z-u,z)}{\partial y} = b(z,u) + 2c(z,u)(z-u) + 3d(z,u)(z-u)^2 \tag{16}$$

$$f1(z+u,z) = a(z,u) + b(z,u)(z+u) + c(z,u)(z+u)^2 + d(z,u)(z+u)^3 \tag{17}$$

$$\frac{\partial f1(z+u,z)}{\partial y} = b(z,u) + 2c(z,u)(z+u) + 3d(z,u)(z+u)^2 \tag{18}$$

Решаем данную систему уравнений с учетом:

$$\frac{\partial f1(y,z)}{\partial y} = -2y^2 + 2y - \frac{p}{y^2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\varepsilon_1(l+1)(2l+1)}{\varepsilon_2 l + \varepsilon_1(l+1)}\left(\frac{z}{y}\right)^{2l} \tag{19}$$

$$\frac{\partial f2(y,z)}{\partial y} = -2y^2 + 2y - \frac{p}{y^2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\varepsilon_2 l(2l+1)}{\varepsilon_2 l + \varepsilon_1(l+1)}\left(\frac{y}{z}\right)^{2(l+1)} \tag{20}$$

а также соотношений (6), (8). В результате приходим к следующим выражениям для коэффициентов полинома:

$$d(z,u) = \frac{1}{4u^2}\left[\frac{\partial f2(z-u,z)}{\partial y} + \frac{\partial f1(z+u,z)}{\partial y} + \frac{1}{u}\left(f2(z-u,z) - f1(z+u,z)\right)\right] \tag{21}$$

$$c(z,y) = \frac{1}{4u}\left(-12zud(z,u) + \frac{\partial f1(z+u,z)}{\partial y} - \frac{\partial f2(z-u,z)}{\partial y}\right) \tag{22}$$

$$b(z,u) = \frac{\partial f2(z-u,y)}{\partial y} - 2c(z,u)(z-u) - 3d(z,u)(z-u)^2 \tag{23}$$

$$a(z,u) = f2(z-u,y) - b(z,u)(z-u) - c(z,u)(z-u)^2 - d(z,u)(z-u)^3 \tag{24}$$

Как было показано в работе [6], частота зародышеобразования вычисляется путем интегрирования вблизи максимумов функции f. Экстремумы функций $f1$, $f2$ найдены в работе [6]. Рассчитаем экстремумы функции $f3$, получаем:

$$\frac{\partial f3(y,z,u)}{\partial y} = 0 \tag{25}$$

С учетом (14) :

$$b(z,u) + 2c(z,u)y + 3d(z,u)y^2 = 0 \tag{26}$$

Данное уравнение имеет два действительных корня:

$$y31(z,u) = -\frac{1}{3}\left(\frac{c(z,u) + \sqrt{c(z,u)^2 - 3d(z,u)b(z,u)}}{d(z,u)}\right) \tag{27}$$

$$y32(z,u) = -\frac{1}{3}\left(\frac{c(z,u) - \sqrt{c(z,u)^2 - 3d(z,u)b(z,u)}}{d(z,u)}\right) \quad (28)$$

Легко показать, что при $y = y31(z,u)$ $\frac{\partial^2 f3}{\partial y^2} < 0$, а при $y = y32(z,u)$ $\frac{\partial^2 f3}{\partial y^2} > 0$. Следовательно, в первом случае функция $f3$ имеет максимум, а во втором случае — минимум.

На рис. 1 представлена линия максимумов $y31$, рассчитанная с помощью выражения (27), а также линии максимумов $y1$ функции $f1$ и $y21$, $y21$ функции $f2$, найденные на основании результатов работы [7]. Как видно из рисунка, в значительном диапазоне изменения z модифицированная функция f имеет дополнительный максимум, который необходимо учитывать при вычислении частоты зародышеобразования.

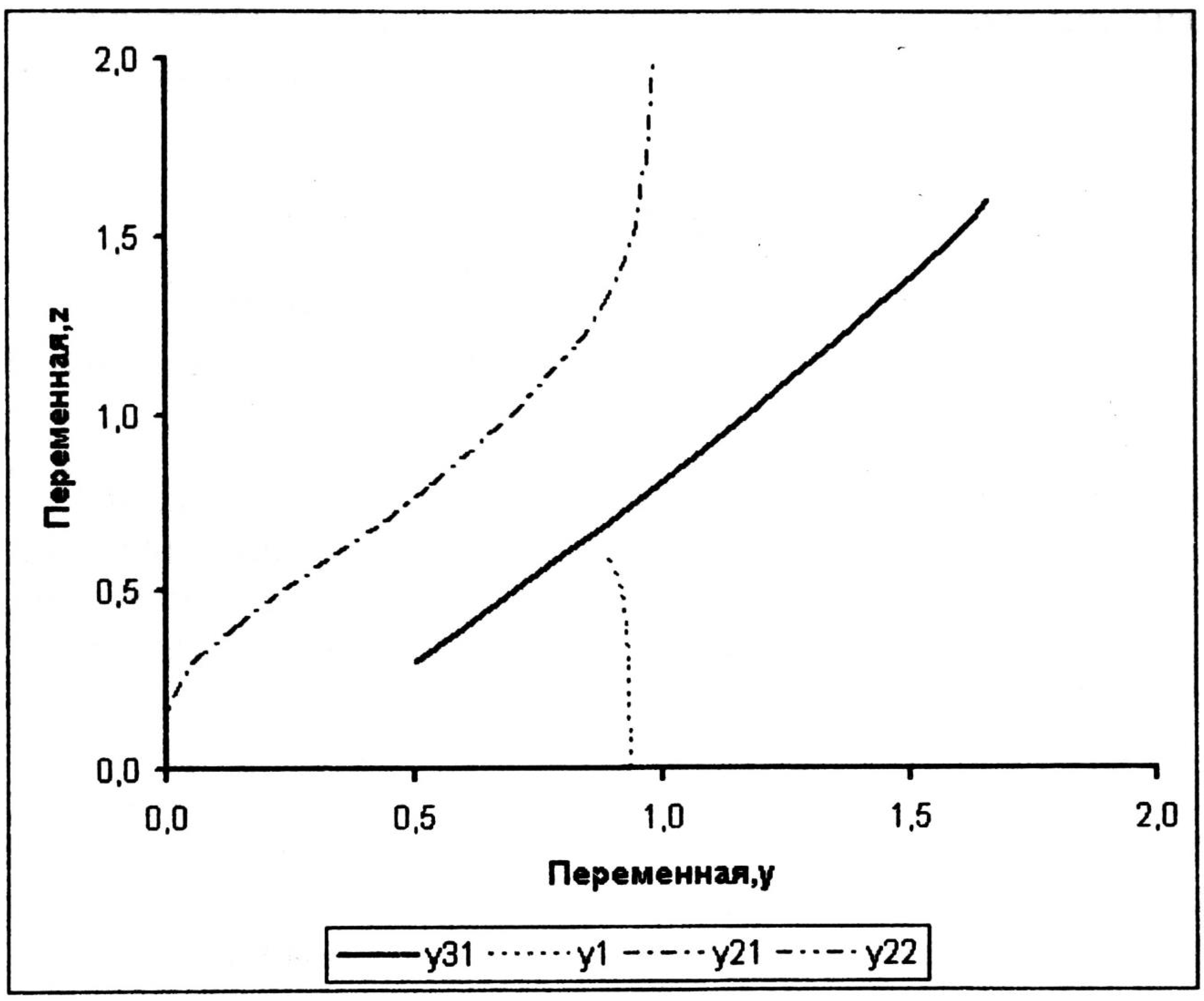

Рис. 1. Модифицированный метод расчета

Численные расчеты частоты зародышеобразования с использованием полученных аналитических выражений будут предложены в последующих работах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шевкунов С. В. // ЖЭТФ. 1994. Т. 105. Вып. 5. С. 1258.
2. Шевкунов С. В., Альмухрез А. А. // Коллоид. журн. 1995. Т. 57. № 1. С. 92.
3. Lelieveld J., Crutzen P. J. // Nature. 1990. V. 343. P. 227.
4. Русанов А. И., Куни Ф. М., Щекин А. К. // Коллоид. журн. 1993. Т. 55. № 2. С. 55.
5. Куни Ф. М., Щекин А. К., Русанов А. И. // Коллоид. журн. 1993. Т. 55. № 2. С. 64.
6. Аникин Г. В. // Деп. ВИНИТИ, 10.02.04 № 218-B2004.
7. Аникин Г. В. // Деп. ВИНИТИ, 24.03.2005 № 386-B2005.
8. Аникин Г. В. // Деп. ВИНИТИ, 15.05.06 № 657-B2006.
9. Аникин Г. В., Плотников С. Н. // Журнал физической химии. 2006. Т. 80. № 1. С. 85.