

# ОПИСАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ ПРИ ПЕРЕХОДЕ ОТ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО К СВОБОДНОМОЛЕКУЛЯРНОМУ РЕЖИМУ С УЧЕТОМ ЭФФЕКТА УСКОРЕНИЯ В ПОЛЕ ВНУТРЕННИХ И СТОРОННИХ СИЛ

С. Д. Шандаков<sup>a\*</sup>, А. Г. Насибулин<sup>b</sup>, Ю. И. Польшгалов<sup>a</sup>,  
Е. Ю. Самчинский<sup>a</sup>, Е. И. Кауппинен<sup>b,c\*\*</sup>

<sup>a</sup> Кемеровский государственный университет  
650043, Кемерово, Россия

<sup>b</sup> Center for New Materials and Department of Engineering Physics and Mathematics, Helsinki University of Technology  
P.O.Box 1602, FIN-02044 VTT, Espoo, Finland

<sup>c</sup> VTT Processes, Aerosol Technology Group  
P.O.Box 1602, FIN-02044 VTT, Espoo, Finland

Поступила в редакцию 20 июня 2005 г.

В рамках кинетической теории газов рассмотрено медленное поступательное движение частиц малой концентрации в однородном газе под действием внешней силы с учетом диффузии, обусловленной разностью ускорений частиц и молекул в поле сторонних и внутренних сил. Для рассматриваемого эффекта ускорения получено общее для гидродинамического, свободномолекулярного и переходного режимов выражение для силы сопротивления частиц, которое сводится к простому соотношению, связывающему величину силы сопротивления с ее значениями, определяемыми в предельных режимах, и силой межмолекулярного взаимодействия частицы с молекулами газа. Показано, что в случае взаимодействия частицы с молекулами газа посредством сферически-симметричного потенциала, величина силы сопротивления определяется гармоническим средним ее предельных значений.

PACS: 51.10.+y 51.50.+v 81.07.-b

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В течение последнего десятилетия исследования в области нанотехнологий получили наиболее бурное развитие (см., например, [1–3]). Актуальными задачами являются развитие и разработка методов синтеза, сбора и определения характеристик наноматериалов. Это в свою очередь стимулирует развитие теоретических методов предсказания этих характеристик на основе полученных экспериментальных данных. Сказанное выше, несомненно, касается широкого круга задач, относящихся к движению наночастиц или их образований в газовой фазе, например [4–9]. В этой области успешно применяют

методы кинетической теории газов, разработку которой в целом можно считать завершенной [10, 11]. При этом, конечно, остается проблема, связанная с определением межмолекулярного взаимодействия многоатомных молекул или атомов газа с частицей или ионом [10–14]. Другой проблемой является то, что выражения (в частности, для силы сопротивления или подвижности частиц или ионов), полученные в рамках одной и той же теории, но в разных пределах, а именно, свободномолекулярном и гидродинамическом режимах, не согласуются друг с другом [11]. Одним из простых способов определения свойств частиц в переходном режиме является формальное использование процедур усреднения или корректирующих множителей, включающих эмпирические параметры. Так, при опреде-

\*E-mail: cphys@kemsu.ru, Sergei.Shandakov@hut.fi

\*\*E. I. Kauppinen

лении скорости коагуляции в переходном режиме успешно используется приближение гармонического среднего [15, 16]. При вычислении силы сопротивления частиц наиболее успешным является использование коэффициента коррекции в формуле Стокса [17, 18]. Несмотря на многочисленные попытки согласования выражений для силы сопротивления, полученных в предельных режимах, в частности, через корректировку граничных условий или введение эмпирических параметров, данная проблема остается открытой [11].

В этой связи следует отметить, что при описании движения частиц или ионов под действием внешней силы, как в свободномолекулярном, так и гидродинамическом режимах предполагается, что частицы (ионы) или молекулы газа в силовом поле двигаются без ускорения. В свободномолекулярном пределе не учитывается возмущение газа при движении частицы, т. е. действующая на нее сила предполагается малой. При этом сила сопротивления частицы (иона), движущейся в газе со средней массовой скоростью  $\mathbf{V}_p$ , связана с коэффициентом бинарной диффузии  $D_{12}$  соотношением Эйнштейна [12]

$$\mathbf{F}_{diff} = -\frac{k_B T}{D_{12}} \mathbf{V}_p, \quad (1)$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура. Заметим, что это соотношение является точным только в предельном случае бесконечно малого внешнего поля [12]. В формуле (1) для обозначения свободномолекулярного предела использован индекс «*diff*». При этом мы подразумеваем не столько предел по размеру частиц, сколько предел, определяемый диффузионным характером их движения, т. е. в пренебрежении действия сил. Для обозначения гидродинамического предела ниже будем использовать индекс «*hydr*». Напротив, в гидродинамическом пределе мы полагаем силу конечной, но пренебрегаем наличием диффузии частиц, полагая скорость частицы постоянной. Таким образом, как в первом, так и втором пределе ускорение частиц не учитывается. Тем самым в этих пределах не было необходимости учитывать диффузию, обусловленную различием ускорения молекул и частиц в силовом поле. При переходе от гидродинамического к свободномолекулярному пределу с уменьшением размера частиц и, соответственно, частоты их столкновений с молекулами газа следует уже учитывать ускоренное движение частиц (ионов) в силовом поле. В настоящей работе мы рассмотрим движение частиц в предельных и переходном режимах с учетом их ускорения в силовом поле.

## 2. СУЩЕСТВУЮЩИЕ МОДЕЛИ

В свободномолекулярном режиме, а именно, без учета возмущения газа, создаваемого движением частицы, представляя коэффициент бинарной диффузии в рамках кинетической теории газов, выражение (1) для сферы можно записать в виде [10]

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{diff} &= -\frac{8p(R+R_g)^2\Omega_{12}^{*(1,1)}}{3(k_B T/2\pi\mu)^{1/2}} \mathbf{V}_p = \\ &= \frac{8\pi\eta_g(R+R_g)^2\Omega_{12}^{*(1,1)}}{3\lambda} \sqrt{\frac{\mu}{m_g}} \mathbf{V}_p, \quad (2) \end{aligned}$$

где  $p$  — давление газа,  $\mu = m_g m_p / (m_g + m_p)$  — приведенная масса,  $m_p$ ,  $m_g$  и  $R$ ,  $R_g$  — массы и радиусы частицы и молекулы газа, соответственно,  $\Omega_{12}^{*(1,1)}$  — приведенный интеграл столкновений, определяемый характером взаимодействия сталкивающихся объектов,  $\lambda$  — длина свободного пробега молекул, связанная с динамической вязкостью  $\eta_g$  газа соотношением

$$\lambda = \frac{(\pi k_B T / 2m_g)^{1/2} \eta_g}{p}.$$

В гидродинамическом режиме с учетом возмущения газа, создаваемого движением частицы, его движение в принимаемом приближении описывается уравнениями Стокса с граничными условиями (непроницаемости и прилипания)

$$U_{gn} = U_{pn}, \quad U_{g\tau} = U_{p\tau}. \quad (3)$$

Здесь  $U_g$  и  $U_p$  — гидродинамические скорости соответственно газа и частиц, « $n$ » и « $\tau$ » — индексы, обозначающие соответственно нормальную и тангенциальную (к поверхности частицы) проекции скорости.

Решения уравнений Стокса для большого ряда систем известны и соответственно получены выражения для силы сопротивления [19]. В частности, для поступательного движения сферы сила сопротивления определяется хорошо известной формулой Стокса

$$\mathbf{F}_{hydr} = -6\pi\eta_g R \mathbf{U}_p. \quad (4)$$

Как можно увидеть, последнее выражение для силы сопротивления, полученное в гидродинамическом приближении, не сводится к соответствующему выражению (2) для свободномолекулярного предела. Одной из попыток согласования двух предельных режимов явилась корректировка граничных условий в гидродинамическом подходе. В принимаемое при гидродинамическом описании условие

прилипания на поверхности обтекаемого газом тела вводится поправка на эффект скольжения. Решение уравнения Стокса для обтекания сферы с учетом эффекта скольжения было найдено Бассе [19]:

$$F_{hydr} = -6\pi\eta_g R U_p \frac{1 + 2\eta_g/R\beta}{1 + 3\eta_g/R\beta}, \quad (5)$$

где  $\beta$  — коэффициент скольжения, равный нулю и стремящийся к бесконечности соответственно при зеркальном и диффузном характере отражения молекул от поверхности частицы. Более точный расчет [11] приводит к выражению

$$F_{hydr} = -6\pi\eta_g R U_p \frac{1 + 2a_+ \sqrt{2/\pi} \lambda/R}{1 + 3a_+ \sqrt{2/\pi} \lambda/R} \quad (6)$$

с численным значением коэффициента  $a_+ = 1.0161$ .

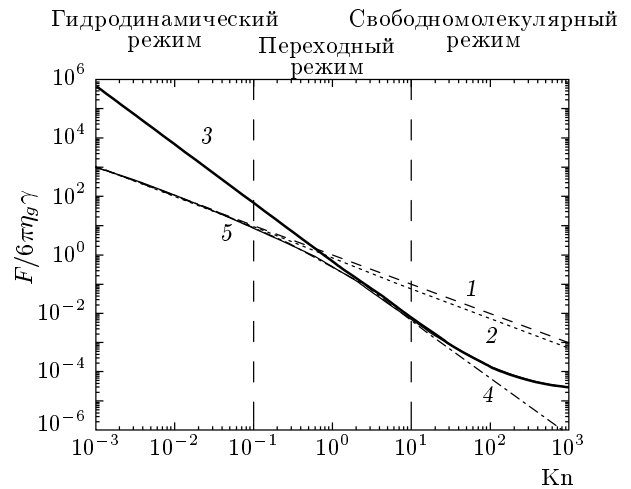
Введение в формулу Стокса коэффициента коррекции, включающего эмпирические параметры ( $A$ ,  $a_1$  и  $a_2$ ), приводит к выражению для силы сопротивления сферической частицы (формуле Каннингема–Кнудсена–Вебера–Милликена):

$$F = - \frac{6\pi\eta_g R U_p}{1 + Kn(A + a_1 \exp(-a_2/Kn))}, \quad (7)$$

где  $Kn = \lambda/R$  — число Кнудсена. Значения констант  $A$ ,  $a_1$  и  $a_2$  принимаются на основе экспериментальных данных Милликена и сотрудников для малых частиц. С учетом полученных в дальнейшем экспериментальных данных приняты следующие значения этих констант:  $A = 1.257$ ,  $a_1 = 0.40$ ,  $a_2 = 1.1$  [17]. Выражение (7), именуемое ниже формулой Милликена, как правило, используют как стандарт для проверки других теоретических моделей [18]. В то же время данное выражение при переходе к свободномолекулярному режиму не учитывает межмолекулярного взаимодействия, природа которого при переходе от одних молекул к другим меняется значительно [11].

Результаты расчетов на основании выражений (2), (4), (6) и (7) представлены на рисунке, как зависимость безразмерной силы от числа Кнудсена. В формуле (2) интеграл столкновений представлен в приближении Эпштейна ( $\Omega_{12}^{*(1,1)} = 1 + \alpha\pi/8$ ) при коэффициенте аккомодации  $\alpha = 1$ . Как видно на рисунке, результаты расчета согласно выражениям (4) и (6) не согласуются с соответствующими расчетами согласно выражением (2) с уменьшением радиуса частиц ( $Kn \rightarrow \infty$ ), т. е. гидродинамическая модель приводит к завышенным значениям силы.

Как уже отмечалось, для получения более общих выражений для силы сопротивления в гидродинами-



Сравнение различных моделей для силы сопротивления при переходе от гидродинамического к свободномолекулярному режиму: 1 — формула Стокса, 2 — формула Бассе, 3 — формула Эпштейна, 4 — формула Милликена, 5 — среднее гармоническое

ческом режиме с целью их согласования с соответствующими выражениями в свободномолекулярном режиме, в отличие от общепринятого рассмотрения, примем во внимание эффект, связанный с различием ускорений молекул и частиц в силовом поле. В этой связи мы рассмотрим возможные изменения решений уравнений Стокса, обусловленные учетом наличия силового поля в функциях распределения молекул газа и частиц.

### 3. ЭФФЕКТ УСКОРЕНИЯ ЧАСТИЦ В СИЛОВОМ ПОЛЕ

Рассмотрим влияние диффузии частиц, обусловленной разницей ускорений частиц и молекул газа во внешнем силовом поле, на их движение в переходном (от гидродинамического к свободномолекулярному) режиме. Для простоты ограничимся рассмотрением медленного поступательного движения частиц малой концентрации под действием внешней силы в однородном газе, что в то же время соответствует широкому кругу практических задач. Данное ограничение дает возможность пренебречь нелинейными членами по гидродинамической скорости частицы и изменением давления, температуры и концентраций частиц и молекул в смеси.

Принимая во внимание ускорение частиц и молекул в силовом поле, функцию распределения по скоростям частиц представим с учетом соответству-

ющей поправки (аналогично работе [11]). В первом приближении функции распределения  $f_k^{(1)}$  по скоростям молекул ( $k = 1$ ) и частиц ( $k = 2$ ) имеют следующий вид [11]:

$$\begin{aligned} f_k^{(1)} &= f_k^{(0)} \left( 1 + \varphi_k^{(1)} \right), \\ f_k^{(0)} &= n_k (\beta_k / \pi)^{3/2} \exp(-\beta_k C_k^2), \\ \mathbf{C}_k &= \mathbf{V}_k - \mathbf{U}_k, \quad \beta_k = m_k / 2k_B T, \end{aligned} \quad (8)$$

где  $f_k^{(0)}$  — функции распределения по скоростям в нулевом приближении,  $\mathbf{C}_k$  и  $\mathbf{V}_k$  — тепловая и полная скорости компоненты  $k$ ,  $n_k$  — концентрация компоненты  $k$ ,  $\varphi_k^{(1)}$  — поправка, учитывающая возмущение распределения молекул (частиц) по скоростям движением частиц (молекул) и определяемая для изотермического течения несжимаемой смеси как

$$\varphi_k^{(1)} = -\frac{2\beta_k \eta_k}{p} \mathbf{C}_k \mathbf{C}_k \nabla \mathbf{U}_k - \frac{1}{n} \sum_l D_k^l (\mathbf{C}_k \cdot \mathbf{d}_l). \quad (9)$$

Здесь  $n$  — суммарная концентрация компонент смеси,  $\eta_k$  — динамическая вязкость компоненты  $k$ ,  $D_k^l = D_k^l(C_k)$  — функции скорости  $C_k$ ,  $\mathbf{d}_k$  — диффузионная термодинамическая сила компоненты  $k$ , определяемая в отсутствие градиентов концентрации компонент и общего давления выражением

$$\mathbf{d}_k = -\frac{\rho_k}{p} \left( \frac{\mathbf{F}_k}{m_k} - \sum_l \frac{\rho_l}{\rho} \frac{\mathbf{F}_l}{m_l} \right) \quad (10)$$

или с учетом соотношения  $\mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2 = 0$  для бинарной смеси соотношением

$$\mathbf{d}_1 = -\mathbf{d}_2 = -\frac{\rho_1}{p} \frac{\rho_2}{\rho} \left( \frac{\mathbf{F}_1}{m_1} - \frac{\mathbf{F}_2}{m_2} \right), \quad (11)$$

где  $m_1$  и  $m_2$  — массы молекулы и частицы,  $\rho$ ,  $\rho_1$  и  $\rho_2$  — плотность смеси, газа и частиц,  $\mathbf{F}_1$  и  $\mathbf{F}_2$  — силы, действующие соответственно на молекулу и частицу. С учетом выражения (11) функция (9) принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \varphi_k^{(1)} &= -\frac{2\beta_k \eta_k}{p} (\mathbf{C}_k)_i (\mathbf{C}_k)_j (\nabla \mathbf{U}_k)_{ij} + \frac{\rho_1 \rho_2}{pn\rho} \times \\ &\times (D_k^1 - D_k^2) \left( \frac{1}{m_1} (\mathbf{C}_k \cdot \mathbf{F}_1) - \frac{1}{m_2} (\mathbf{C}_k \cdot \mathbf{F}_2) \right). \end{aligned} \quad (12)$$

В выражении (12) подразумевается суммирование по повторяющимся индексам,  $i, j = 1, 2, 3$ , которые относятся к соответствующим проекциям на оси системы координат  $(\mathbf{n}, \boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2)$ .

Функция  $D_k^l = D_k^l(C_k)$  определяется интегральным соотношением через коэффициенты диффузии  $\mathbf{D}_{kl}$  [11]:

$$\mathbf{D}_{kl} = \frac{1}{3nn_k} \int f_k^{(0)} C_k^2 D_k^l(C_k) d\mathbf{V}_k. \quad (13)$$

Данные коэффициенты  $D_{kl}$  и коэффициент бинарной диффузии  $D_{12}$  для бинарной смеси связаны соотношением, которое согласно [11] можно представить в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{11} &= \frac{\rho_2}{\rho_1} \frac{m_1 m_2}{(\rho/n)^2} D_{12}, \quad \mathbf{D}_{22} = \frac{\rho_1}{\rho_2} \frac{m_1 m_2}{(\rho/n)^2} D_{12}, \\ \mathbf{D}_{12} &= \mathbf{D}_{21} = -\frac{m_1 m_2}{(\rho/n)^2} D_{12}. \end{aligned} \quad (14)$$

Уравнение (12) получено без учета внутренних степеней свободы молекул и частиц. Проблемы, связанные с рассмотрением внутренних степеней свободы и формы сталкивающихся частиц, достаточно сложны, но тем не менее разработаны методы в рамках кинетической теории газов, пригодные для описания многоатомных газов [10, 11]. Следуя данным методам, зависимость функции распределения по скоростям от параметров, характеризующих вращательное движение молекул (частиц), сводится к зависимости от этих параметров коэффициентов переноса. В этой связи применение выражения (12) будем считать возможным и для случая многоатомных молекул (частиц), полагая при этом, что зависимость от параметров, характеризующих вращательное движение, определяется выражениями коэффициентов переноса (вязкости и диффузии).

В выражениях для силы сопротивления, полученных в гидродинамическом приближении, считается, что скорость движения частицы определяется только ее гидродинамической составляющей. В этой связи определим среднюю скорость частиц посредством усреднения по скоростям молекул и частиц и по объему, согласно определенной выше функции распределения для частиц и молекул газа, но уже с учетом ускорений частиц и молекул газа в силовом поле:

$$\begin{aligned} \langle V_p \rangle &= \frac{1}{n_p n_g} \left\langle \int_{\mathbf{v}_g} \int_{\mathbf{v}_p} (\mathbf{n}_z \cdot \mathbf{V}_p) f_p^{(0)} f_g^{(0)} \times \right. \\ &\times \left. \left( 1 + \varphi_g^{(1)} + \varphi_p^{(1)} \right) d\mathbf{V}_p d\mathbf{V}_g \right\rangle_v. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь угловые скобки в правой части обозначают усреднение по объему  $v$ . С учетом поступательного движения частиц в направлении внешней силы выражение (15) мы представили в скалярном виде, где  $\mathbf{n}_z$  — единичный вектор в направлении внешней силы. Данное выражение представим в виде

$$\langle V_p \rangle = U_p + U_{diff}, \quad (16)$$

где  $U_p$  — гидродинамическая скорость,  $U_{diff}$  — диффузионная скорость, определяемая разностью ускорений молекул и частиц в силовом поле:

$$U_{diff} = U_{diff}^{ext} + U_{diff}^{int}, \quad (17)$$

$$U_{diff}^{ext} = - \sum_{k=1}^2 \frac{\rho_1 \rho_2}{p m_2 n \rho} \left\langle \int_{\mathbf{V}_g} \int_{\mathbf{V}_p} (\mathbf{n}_z \cdot \mathbf{V}_p) \frac{f_p^{(0)} f_g^{(0)}}{n_p n_g} \times \right. \\ \left. \times (D_k^2 - D_k^1) (\mathbf{C}_k \cdot \mathbf{F}) d\mathbf{V}_p d\mathbf{V}_g \right\rangle, \quad (18)$$

$$U_{diff}^{int} = - \sum_{k=1}^2 \frac{\rho_1 \rho_2}{p \mu n \rho} \left\langle \int_{\mathbf{V}_g} \int_{\mathbf{V}_p} (\mathbf{n}_z \cdot \mathbf{V}_p) \frac{f_p^{(0)} f_g^{(0)}}{n_p n_g} \times \right. \\ \left. \times (D_k^2 - D_k^1) (\mathbf{C}_k \cdot \mathbf{F}_{int}) d\mathbf{V}_p d\mathbf{V}_g \right\rangle, \quad (19)$$

$$\mathbf{F}_{int} = - \frac{m_2}{\mu} \int n_g \mathbf{F}_1 dv = - \frac{m_2}{\mu} \langle \mathbf{F}_1 \rangle_v. \quad (20)$$

Здесь  $U_{diff}^{ext}$  и  $U_{diff}^{int}$  — диффузионные скорости, обусловленные действием на частицу сторонних и внутренних сил. При записи (18) мы учли, что внешняя сила действует только на частицы и при ее равномерном движении она уравновешена силой сопротивления ( $\mathbf{F}_2 = -\mathbf{F}_1$ ). При записи выражений (19) и (20) мы приняли во внимание, что внутренние силы, действующие на частицу со стороны окружающих ее молекул  $\langle \mathbf{F}_2 \rangle_v$  и, наоборот, действующие на эти молекулы со стороны частицы  $\langle \mathbf{F}_1 \rangle_v$  равны между собой и противоположны по направлению:

$$\langle \mathbf{F}_1 \rangle_v = - \langle \mathbf{F}_2 \rangle_v.$$

В выражении (20) величина  $\mathbf{F}_1$  есть сила, действующая на одну молекулу газа со стороны частицы. При этом, согласно приближению малой концентрации частиц, взаимодействие частиц между собой не учитывается.

Для диффузионной скорости в поле сторонних сил интегрирование выражения (18) по скоростям с учетом (13) приводит к соотношению

$$U_{diff}^{ext} = - \frac{\rho_1 \rho_2}{p \rho} (\mathbf{D}_{22} - \mathbf{D}_{21}) F \quad (21)$$

или с учетом (14), если выразить давление через концентрацию ( $p = n k_B T$ ), к соотношению

$$U_{diff}^{ext} = - (\rho_1 - \rho_2) \frac{n m_1 \rho_1}{\rho^3} \frac{D_{12}}{k_B T} F. \quad (22)$$

В случае малого содержания частиц в газе последнее выражение принимает вид

$$U_{diff}^{ext} = - \frac{D_{12}}{k_B T} F. \quad (23)$$

Для определения диффузионной скорости, обусловленной ускорением в поле внутренних сил и определяемой выражением (19), необходимо знать характер сил, действующих на молекулы и частицы. В случае центральных сил средние по объему значения ускорений молекул и частиц равны нулю и эти силы не дают вклада в диффузионную скорость. Ситуация меняется в случае, когда внутренние силы имеют асимметричный характер.

Для диффузионной скорости в поле внутренних сил интегрирование выражения (19) по скоростям с учетом (13) и (14) приводит к выражению

$$U_{diff}^{int} = (\rho_1 - \rho_2) \frac{n m_1 \rho_1}{\rho^3} \frac{D_{12}}{k_B T} F_{int,z}, \quad (24)$$

где  $F_{int,z}$  — проекция силы, действующая на частицу со стороны окружающих ее молекул, на направление внешней силы. В случае малого содержания частиц в газе выражение (24) принимает вид

$$U_{diff}^{int} = \frac{D_{12}}{k_B T} F_{int,z}. \quad (25)$$

Как видно из полученных выражений (24) или (25), если сила  $\mathbf{F}_{int}$ , действующая на частицу со стороны молекул газа, имеет асимметрию, то ее среднее значение по объему будет отлично от нуля. Например, если заряд частицы смещен относительно ее центра по ходу ее движения во внешнем электрическом поле, то сила, действующая на частицу со стороны поляризованных в ее поле молекул, и, соответственно, диффузионная скорость, будут иметь направление, совпадающее с направлением движения частицы. Определение среднего значения силы  $\mathbf{F}_{int}$ , имеющей асимметричный характер, при известном потенциале взаимодействия и ориентации частицы можно представить в явном виде. В частности, при известном распределении заряда можно найти силу ион-дипольного взаимодействия заряженной частицы с нейтральными молекулами, поляризованными в поле этой частицы [13].

Выражение (16) с учетом (23) и (25) принимает вид

$$\langle V_p \rangle = U_p - \frac{D_{12}}{k_B T} F + \frac{D_{12}}{k_B T} F_{int,z}. \quad (26)$$

Согласно выражениям (16) и (26), средняя скорость частицы складывается из гидродинамической

и диффузионной скоростей. Таким образом, в выражениях, полученных в гидродинамическом пределе, среднюю скорость движения частицы  $\langle V_p \rangle$ , которая ранее (без учета диффузии) принималась как гидродинамическая, необходимо заменить скоростью  $U_p$ , согласно выражению (26):

$$F = \frac{F_{hydr}}{\langle V_p \rangle} \left( \langle V_p \rangle - \frac{D_{12}}{k_B T} F + \frac{D_{12}}{k_B T} F_{int,z} \right). \quad (27)$$

С учетом представления силы сопротивления в свободномолекулярном режиме соотношением Эйнштейна (1) последнее выражение можно записать в виде

$$F = F_{hydr} \frac{F_{diff} + F_{int,z}}{F_{diff} + F_{hydr}}. \quad (28)$$

Таким образом, с учетом ускорения частиц и молекул в силовом поле сила сопротивления выражается через ее значения, полученные в гидродинамическом и свободномолекулярном пределах, и силу, определяющую взаимодействия частицы с окружающими ее молекулами газа. При этом значение силы в гидродинамическом приближении определяется без учета эффектов диффузии или скольжения. Последний учитывается в выражении силы, определяемой в свободномолекулярном режиме через коэффициент бинарной диффузии.

В случае сферически-симметричного потенциала взаимодействия частицы с молекулой (центрального характера сил) мы приходим к представлению силы сопротивления как гармонического среднего значений силы сопротивления, полученных в диффузионном и гидродинамическом приближениях:

$$\frac{1}{F} = \frac{1}{F_{diff}} + \frac{1}{F_{hydr}}. \quad (29)$$

На рисунке приведены результаты расчета согласно выражению (29). Как видно на рисунке, значения силы, полученные согласно приближению гармонического среднего и формуле Милликена, в области гидродинамического и переходного режимов практически совпадают. В области больших чисел Кнудсена расхождение указанных приближений можно отнести к пренебрежению взаимодействием частиц и молекул.

Выражения (28) и (29) получены на основе представления силы сопротивления через среднюю скорость движения частиц, которая, в свою очередь, определяется линейной суперпозицией предельных скоростей. В этой связи аналогичные полученным выше соотношения могут иметь место при вычислении других характеристик, определяемых через

скорость частиц. В частности, применение гармонического среднего приближения для скорости коагуляции частиц [15, 16] можно отнести к такому типу характеристик, предполагая при этом ее пропорциональность частоте столкновений частиц друг с другом, которая, в свою очередь, определяется средней скоростью их относительного движения.

Таким образом, как здесь было показано, приближение гармонического среднего теоретически обоснованно и применимо в случае взаимодействия частица–молекула посредством сферически-симметричного потенциала.

Соотношения (28) или (29) позволяют определять силу сопротивления частиц на основе выражений, полученных в предельных, а именно, гидродинамическом и свободномолекулярном, режимах. С учетом того что в предельных режимах движение частиц различной формы достаточно хорошо изучено, использование этих соотношений позволяет определять силу сопротивления частиц любого размера, в частности, в нанометровом диапазоне.

Следует отметить, что под свободномолекулярным режимом мы понимали такое движение частиц под действием внешней силы, когда оно не возмущает состояние газа, а именно, полагая, эту силу в пределе равной нулю. При этом это понятие мы используем только для определения коэффициента диффузии, не включая в его определение диффузионные потоки, обусловленные разницей между ускорениями молекул и частиц. Применение формул для коэффициента диффузии, полученных в свободномолекулярном режиме, к частицам большого размера проблематично из-за ограничения применения решения уравнения Больцмана к частицам большого размера. В то же время существуют отличные от классического (Чепмена–Энскогского) методы решения уравнения Больцмана. В частности, использование метода, учитывающего тот факт, что вероятность соударения молекул одного и того же сорта может быть больше вероятности соударения молекул разных сортов газа [20], позволяет применение полученного на основе данного метода решения к частицам, размеры которых могут существенно превосходить длину свободного пробега. При этом в приближении несжимаемого изотермического газа решение кинетических уравнений сводится к приближению Чепмена–Энскогского. Таким образом, использование в выражении (28) формул для силы сопротивления  $F_{diff}$ , полученных в свободномолекулярном режиме, по крайней мере, для частиц в нанометровом диапазоне будем полагать допустимым.

## 4. ВЫВОДЫ

В рамках кинетической теории газов проведено исследование влияния силового поля сторонних и внутренних сил на характер движения частиц в однородном газе в приближении медленного поступательного движения и малой концентрации частиц в газе. Введение поправки, учитывающей разность между ускорениями частиц и молекул в силовом поле, в выражения, полученные в гидродинамическом пределе для силы сопротивления, приводит к согласованию с соответствующими формулами, полученными в свободномолекулярном режиме. Представленное в работе простое соотношение связывает величину силы сопротивления с ее значениями, получаемыми в предельных, а именно, гидродинамическом и свободномолекулярном, режимах, и величиной силы межмолекулярного взаимодействия частицы с молекулами газа. В случае сферически-симметричного потенциала взаимодействия частицы с молекулами газа сила сопротивления определяется гармоническим средним ее предельных значений. Использование представленных в работе соотношений позволяет определять силу сопротивления частиц любого размера на основе уже известных выражений, полученных в предельных режимах.

Данная работа частично поддержана Академией наук Финляндии и Европейским Союзом (грант № HPRN-СТ-2002-00328). Один из авторов (С. Д. Ш.) благодарит за поддержку Фонд Марии Кюри (Marie Curie Incoming International Fellowships, индивидуальный проект № 022110-HYS, CNTs-2005).

## ЛИТЕРАТУРА

1. L. Fu, L. Cao, Y. Liu, and D. Zhu, *Adv. Colloid Interface Sci.* **111**, 133 (2004).
2. M. Pitkethly, *Materialstoday* **6**, 36 (2003).
3. Y. H. D. Pui and D. Chen, *J. Aerosol Sci.* **28**, 539 (1997).
4. J. Fernández de la Mora, L. de Juan, T. Eichler, and J. Rosell, *TrAC Trends in Analytical Chemistry* **17**, 328 (1998).
5. S. Ude and J. Fernández de la Mora, *J. Aerosol Sci.* **34**, 1245 (2003).
6. A. G. Nasibulin, E. I. Kauppinen, B. A. Thomson, and J. Fernández de la Mora, *J. Nanoparticle Res.* **4**, 449 (2002).
7. В. Я. Рудяк, С. Л. Краснолуцкий, *ДАН* **381**, 623 (2001).
8. В. Я. Рудяк, С. Л. Краснолуцкий, А. Г. Насибулин, Е. И. Кауппинен, *ДАН* **386**, 624 (2002).
9. A. Moisala, A. G. Nasibulin, S. D. Shandakov, H. Jiang, and E. I. Kauppinen, *Carbon* **43**, 2066 (2005).
10. S. Chapman and T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge University press, Cambridge, New York, Port Chester, Melbourne, Sydney (1990).
11. J. H. Ferziger and H. G. Kaper, *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam—London (1972).
12. E. W. McDaniel and E. A. Mason, *The Mobility and Diffusion of Ions in Gases*, Wiley, New York (1973).
13. S. D. Shandakov, A. G. Nasibulin, and E. I. Kauppinen, *J. Aerosol Sci.* **36**, 1125 (2005).
14. Z. Li and H. Wang, *Phys. Rev. E* **68**, 061206 (2003).
15. S. E. Pratsinis, *J. Colloid and Interface Sci.* **124**, 416 (1988).
16. F. O. Ernst and S. E. Pratsinis, submitted to *J. Aerosol Sci.* (2005).
17. Н. А. Фукс, *Механика аэрозолей*, Изд-во АН СССР, Москва (1955).
18. B. K. Annis, A. P. Malinauskas, and E. A. Mason, *J. Aerosol Sci.* **3**, 55 (1972).
19. J. Happel and H. Brenner, *Low Reynolds Number Hydrodynamics*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J. (1965).
20. В. В. Струминский, *Прикл. мат. мех.* **38**, 203 (1974).