

ОПТИМАЛЬНЫЙ РЕЖИМ КОНДЕНСАЦИОННОЙ ОЧИСТКИ СМЕСИ ПАРОВ ОТ ПАРА ПРИМЕСНОГО ВЕЩЕСТВА

Ф. М. Куни, А. П. Гринин, А. А. Мелихов, Ю. В. Трофимов

Найдены оптимальные параметры управления конденсационной очисткой смеси паров от примесного вещества адиабатическим расширением смеси паров.

Введение

Кинетическая теория конденсации в динамических условиях, в которых зарождение и рост частиц стабильной фазы происходят в самом процессе создания метастабильности, была развита в [1]. Исследованию кинетики конденсационной очистки смеси паров от примесного вещества на основе [1] посвящена предлагаемая работа. Способом создания метастабильности будет адиабатическое расширение материально изолированной смеси паров. Этот способ наиболее надежен и контролируем на практике.

Эффективность конденсационной очистки обусловлена тем, что она идет во всем объеме смеси паров, а не через границы объема (как при поверхностном разделении веществ). Конденсационная очистка осуществляется в два этапа [2]. На первом этапе происходит гомогенная конденсация пара примесного вещества. На втором этапе происходит гетерогенная конденсация пара основного, очищаемого вещества на возникших частицах примесного вещества.

Очистка смеси паров от примеси завершается по существу уже на первом этапе. Второй этап при этом нужен лишь для увеличения частиц до размеров, при которых они становятся доступными удалению из смеси паров.

Оптимальное в смысле наименьшего времени очистки предсказание управления очисткой адиабатическим расширением смеси паров — главное назначение работы.

В согласии с [2] используются следующие обозначения: t — время, отсчитанное от начала первого этапа; T и V — абсолютная температура и объем смеси паров; n_∞ и n_∞^b — плотности чисел молекул насыщенных паров примесного и основного веществ; β и β^b — выраженные в единицах $k_B T$ (k_B — постоянная Больцмана) молекулярные теплоты конденсации примесного и основного веществ; $n_{\text{полн}}$ и $n_{\text{полн}}^b$ — отнесенные к единице объема полные количества молекул примесного и основного веществ (и в смеси паров, и в частицах); n и n^b — плотности чисел молекул примесного и основного веществ в смеси паров этих веществ; $\chi \equiv n/n^b$ — концентрация пара примесного вещества в смеси паров; c^b — выраженная в единицах k_B теплоемкость молекулы пара основного вещества; индексы 0, 1 и 2 характеризуют величины в начале первого этапа, в конце первого и в конце второго этапов (начало второго этапа совпадает с концом первого этапа). Предполагается [2] $\beta \gg \beta^b \gg 1$.

1. Управление конденсационной очисткой от примесного вещества

Следуя [2], введем идеальное пересыщение Φ пара примесного вещества

$$\Phi = n_{\text{полн}}/\tilde{n}_\infty - 1. \quad (1)$$

Волнистая линия характеризует величины в отсутствие выделения теплоты конденсации, но при том же внешнем управлении процессом очистки. Выделение теплоты происходит лишь на втором этапе. Соответственно \dot{n}_∞ и \dot{T} отличаются от n_∞ и T лишь при $t_1 < t < t_2$.

Закон адиабатического увеличения объема смеси паров V и роста идеального пересыщения Φ со временем формулируется так [2]:

$$\left. \begin{aligned} V/V_1 &= \{1 + (1/\beta_1) \ln [(\Phi + 1)/(\Phi_1 + 1)]\}^{c^b} \\ \Phi &= (t/t_\infty)^m \end{aligned} \right\} (0 < t < t_2), \quad (2)$$

где m и t_∞ — положительные параметры; индекс 1 у c^b не является существенным (в (2) использовано предположение о независимости c^b от T).

Посредством определяемого согласно (2) адиабатического увеличения объема смеси паров со временем и осуществляется управление конденсационной очисткой от примесного вещества.

Как находить по исходным в начале первого этапа термодинамическим характеристикам n_0 , n_0^b величины n_∞ , T_0 , χ_0 , T_1 , χ_1 , а с ними и величины β_1 , β_1^b , c^b , было показано в [2]. В [2] было также установлено равенство

$$\Phi_1 = \chi_0/\chi_1, \quad (3)$$

которое совместно с вытекающим из (2) соотношением

$$t_1 = \Phi_1^{1/m} t_\infty \quad (4)$$

связывает t_1 и t_∞ .

Важными на практике являются радиус частиц R_2 и доля сконденсированного основного вещества G_2 в конце второго этапа: параметр R_2 характеризует размеры доступных удалению частиц, а параметр G_2 — допустимые потери очищаемого вещества.

Оптимальное предсказание трех кинетических параметров m , t_∞ и t_2 в (2) по заданным параметрам n_0 , n_0^b , R_2 , G_2 и даже только по заданным параметрам n_0 , n_0^b , R_2 — наша главная цель.

2. Работа образования критического зародыша примесного вещества

Величины в момент максимума интенсивности зарождения частиц примесного вещества помечаем звездочкой. Будем иметь в виду, что $\Phi_* \gg 1$ (только при этом интенсивность зарождения достаточно велика).

Понимая под v число молекул в частице, введем «обезразмеренный» линейный размер частицы $\rho = v^{1/3}$. При ρ , близком к размеру ρ_c критического зародыша примесного вещества, может быть существенным эффект [3] зависимости поверхностного натяжения γ частицы от ρ , описываемый формулой Толмена $\gamma = \gamma_\infty (1 - 2\varepsilon/\rho)$, где γ_∞ относится к плоской поверхности, ε — микроскопический параметр. При ρ , близком к ρ_c , может быть существенным и эффект [4-7] зарождения частицы не в каком-то заданном месте объема смеси паров примесного и основного веществ, а на одной из молекул пара примесного вещества (которая в итоге и служит центром гомогенного образования частицы).

Учитывая оба эффекта, имеем [1] при $\Phi = \Phi_*$ для работы F_c образования критического зародыша примесного вещества (в тепловых единицах $k_B T_*$)

$$F_c = (a_0/3) \rho_c^2 (1 - 6\varepsilon/\rho_c) - \ln(1/vn_0), \quad (5)$$

$$a_0 = (4\pi\gamma_\infty/k_B T_0) (3v/4\pi)^{2/3}, \quad (6)$$

$$\rho_c = 2a_0/3 \ln \Phi_*, \quad (7)$$

где v — молекулярный объем конденсированного примесного вещества, звездочка у F_c и ρ_c опущена.

Ввиду (7) и равенства [1].

$$(T_* - T_0)/T_0 \simeq -(1/\beta_0) \ln \Phi_* \quad (8)$$

формула (5) будет учитывать и зависимость γ_{∞}/T от T , если под ε в (5) понимать $\varepsilon_{\text{эф}}$, равное $\varepsilon - (a_0 \varepsilon' / 3\beta_0)$, где ε' — параметр в аппроксимации

$$\gamma_{\infty}/T_* = (\gamma_{\infty}/T_0) [1 - \varepsilon' (T_* - T_0)/T_0]. \quad (9)$$

Условием макроскопичности критического зародыша является $\rho_c \geq 3$. Условием же малости поправки Толмена служит $2|\varepsilon|/\rho_c \ll 1$.

3. Кинетические характеристики в момент максимума интенсивности зарождения частиц примесного вещества

Имеем [1]

$$F_c = 4 \ln (\alpha_0 t_{\infty} / m \tau_0 \Phi_*), \quad (10)$$

что совместно с (5) и (7) дает уравнение для Φ_* . Здесь

$$\tau_0 = 12 / [(36\pi v^2)^{1/3} n_{\infty} \omega_0], \quad (11)$$

α_0 и ω_0 — коэффициент конденсации и средняя тепловая скорость молекулы пара примесного вещества (они отнесены к температуре T_0).

Сильная зависимость n_{∞} от T учтена в (10) с помощью соотношения $n_{\infty} = n_{\infty 0} / \Phi_*$, вытекающего из (8) и формулы Клапейрона—Клаузиуса.

Введем величину ξ по определению

$$\xi = (1/v n_0)^{1/3} (\alpha_0 t_{\infty} / m \tau_0 \Phi_*). \quad (12)$$

Вместо t_{∞} примем за независимый параметр x , положив

$$\rho_c = 2x. \quad (13)$$

Из (5), (7), (10) и (12) тогда следует

$$\ln \xi = (a_0/3) x (x - 3\varepsilon), \quad \ln \Phi_* = a_0/3x. \quad (14)$$

Условия $\rho_c \geq 3$ и $2|\varepsilon|/\rho_c \ll 1$ записываются с помощью (13) как

$$x \geq 3/2, \quad |\varepsilon|/x \ll 1. \quad (15)$$

Используя (14), (15) и (8), имеем

$$\ln \xi \geq 3a_0/4, \quad \ln \Phi_* \leq 2a_0/9, \quad |T_* - T_0|/T_0 \leq 2a_0/9\beta_0. \quad (16)$$

Из (16) следует $\ln \xi \geq 1$, что является [1] условием применимости уравнения (10). Из (16) с учетом (3) и чрезвычайно сильного неравенства $\chi_0/\chi_1 \geq 1$ [2] вытекает $\Phi_* \ll \Phi_1$. Наконец, из (16) с учетом $\beta_0 \geq 1$ вытекает $|T_* - T_0|/T_0 \ll 1$, что подразумевалось в (8) и (9).

4. Кинетическая теория первого этапа очистки

Поскольку $\Phi_* \ll \Phi_1$, то коллапс пара примеси, в результате которого практически весь избыточный пар примеси оказывается в сконденсированных частицах и становится справедливым равенство

$$n = n_{\infty}, \quad (17)$$

происходит [1] еще задолго до окончания первого этапа.

По мере уменьшения температуры T с ростом времени величина n , согласно (17) и неравенству $\beta \geq 1$, быстро уменьшается — смесь паров интенсивно очищается от примеси.

Несмотря на это, частицы примеси практически уже не растут по завершении коллапса: остающееся по завершении коллапса количество пара примеси весьма мало (и с течением времени делается все меньше и меньше). Соответственно распределение частиц по их размерам ρ (и по радиусам R) практически не меняется после завершения коллапса и вплоть до окончания первого этапа.

Максимум распределения частиц приходится на размер ρ_1 , для которого в [1] было получено выражение

$$\rho_1 = 6^{1/3} (3/2a_0)^2 (vn_0)^{1/4} \xi \Phi_*^{(m+1)/m} \ln^2 \Phi_*, \quad (18)$$

где учтены (7), (12) (и $\Phi_* \gg 1$).

В [1] было также показано, что относительный разброс размеров частиц равен величине $(9/16 \rho_1^2)^{1/3}$, которая мала в силу $\rho_c \gg 3$.

Начиная с завершения коллапса частицы примеси, таким образом, оказываются практически монодисперсными, т. е. характеризуются размером ρ_1 . Разумеется, общее количество частиц в системе остается неизменным.

Соблюдение соотношения (17) и описанного поведения системы по завершении коллапса предполагает [1] ограничение на m сверху

$$m < \beta/c^b. \quad (19)$$

При больших m это ограничение следует держать под контролем. Из (4) и (12) имеем

$$t_1 = \frac{\tau_0}{a_0} (vn_0)^{1/4} m \Phi_1^{1/m} \xi \Phi_*. \quad (20)$$

Используя (14) в (18) и (20), получим

$$\rho_1 = \frac{6^{1/3}}{4} (vn_0)^{1/4} \frac{1}{x^2} \exp \left\{ \frac{a_0}{3x} \left[\frac{1}{m} + x^2(x - 3\varepsilon) + 1 \right] \right\}, \quad (21)$$

$$t_1 = \frac{\tau_0}{a_0} (vn_0)^{1/4} m \Phi_1^{1/m} \exp \left\{ \frac{a_0}{3x} [x^2(x - 3\varepsilon) + 1] \right\}. \quad (22)$$

Поделив (22) на (21), получим также

$$t_1/\rho_1 = (4\tau_0/6^{1/3}a_0) m \Phi_1^{1/m} x^2 \exp(-a_0/3mx). \quad (23)$$

5. Зависимость идеального пересыщения пара основного вещества от времени

На втором этапе конденсируется уже и основное вещество, количество которого в согласии с $\chi_0 \ll 1$ [2] является подавляющим в системе. Позволив на первом этапе пренебречь выделением теплоты конденсации, неравенство $\chi_0 \ll 1$ означает, что на втором этапе, наоборот, выделение теплоты конденсации будет [1] весьма существенным.

Идеальное пересыщение Φ^b пара основного вещества определяется (по аналогии с (1)) равенством

$$\Phi^b = n_{\text{полн}}^b / \tilde{n}_{\infty}^b - 1. \quad (24)$$

На долю сконденсировавшегося основного вещества G наложим [1] ограничение сверху

$$G \ll c^b/\beta_1^b. \quad (25)$$

При этом тем более соблюдается ограничение $G \ll 1$, означающее малость потерь очищаемого вещества. Как убедимся впоследствии, из (25) вытекает

$$|\tilde{T} - T_1|/T_1 \ll 1. \quad (26)$$

Поскольку $\tilde{T} < T < T_1$, то тем более будет мало относительное отклонение T от T_1 . Ограничения (25) и (26) позволяют [1] написать

$$V/V_1 = (\Phi^b + 1)^{(c^b/\beta_1^b)(1+c^b/\beta_1^b)} \quad (27)$$

и свести (2) с учетом $\Phi_1 \gg 1$ к

$$V/V_1 = (t/t_1)^{m c^b/\beta_1^b} \quad (t_1 < t < t_2). \quad (28)$$

Сравнивая (27) и (28), заключаем

$$\Phi^b + 1 = (t/t_1)^{[(m\beta_1^b/\beta_1)/(1+c_1^b/\beta_1^b)]} \quad (t_1 < t < t_2). \quad (29)$$

6. Кинетическая теория второго этапа очистки

Поскольку к началу второго этапа частицы поглотили практически весь пар примеси, а в каждой частице находится ρ_1^3 молекул примеси (частицы монодисперсны), то отношение общего числа частиц к общему числу молекул пара основного вещества равно чрезвычайно малой величине χ_0/ρ_1^3 . Учитывая, кроме того, что при $\rho_1 \gg 1$ активационный барьер гетерогенной конденсации пара основного вещества на частицах примеси преодолевается уже при ничтожных пересыщениях Φ^b (порядка $1/\rho_1$), заключаем следующее. Практически мгновенно после начала второго этапа все частицы примеси становятся гетерогенными центрами конденсации пара основного вещества. В последующем общее число частиц не меняется, т. е. остается равным тому, которое возникло на первом этапе. Конкретное знание активационного барьера гетерогенной конденсации не является важным. Имеем тогда [1]

$$G = [c_1^b/(\beta_1^b)^2] \ln(\Phi^b + 1) = [(mc_1^b/\beta_1\beta_1^b)/(1 + c_1^b/\beta_1^b)] \ln(t/t_1), \quad (30)$$

$$(T - T_1)/T_1 = -(1 + c_1^b/\beta_1^b)G, \quad (31)$$

$$(\tilde{T} - T_1)/T_1 = -(\beta_1^b/c_1^b)(1 + c_1^b/\beta_1^b)G, \quad (32)$$

причем в (30) учтено (29). Имеем также

$$(v_1 + v^b)/v_1 = (n_0 + Gn_0^b)/n_0, \quad (33)$$

где $v_1 \equiv \rho_1^3$ — число молекул примеси в частице, которое по крайней мере с момента t_1 практически не меняется; а v^b — число молекул основного вещества в частице в текущий момент второго этапа.

Из (33) с учетом $\chi_0 = n_0/n_0^b$ вытекает

$$v^b/v_1 = G/\chi_0. \quad (34)$$

Поскольку второй этап предназначен для укрупнения частиц, то должно быть $v^b \gg v_1$, а вследствие (34) также и

$$G \gg \chi_0. \quad (35)$$

Вводя тогда «обезразмеренный» линейный размер частицы $\rho = (v^b)^{1/3}$, связанный с ее радиусом R соотношением

$$\rho = (4\pi/3v^b)^{1/3} R, \quad (36)$$

где v^b — молекулярный объем конденсированного основного вещества, получим из (34)

$$\rho/\rho_1 = (G/\chi_0)^{1/3}. \quad (37)$$

Замечая, что (17) сохраняет силу и на втором этапе, учитывая (25), (27), (30), (31) и формулу Клапейрона—Клаузиуса, имеем для степени очистки χ_1/χ на втором этапе

$$\chi_1/\chi = \exp\{\beta_1[1 + (c_1^b/\beta_1^b) - (\beta_1^b/\beta_1)]G\}. \quad (38)$$

Очевидно, (25) и (32) обосновывают (26).

Кинетическая теория второго этапа не связана с тем, какой конкретно режим обмена молекулами между конденсирующимися частицами и смесью паров осуществляется. Теория предполагает, однако, что коллапс пара основного вещества уже произошел. Это налагает [1] на G ограничение снизу

$$G \geq (mc_1^b/\beta_1\beta_1^b)\delta, \quad (39)$$

$$\delta \sim (p^1/\tau_0\rho_1/3t_1)^{3/2} [\chi_0^2\rho_1^3 c_1^b/m^2(\beta_1^b)^4]^{1/6}, \quad (40)$$

p — отношение масс молекул основного и примесного веществ, обычно $\delta \ll 1$.
Равенства (30)—(32), (38) согласуются с [2].

7. Кинетические характеристики очистки

Помимо n_0 и n_0^b считаем заданными еще R_2 и G_2 . Ввиду (36) можем вместо R_2 считать заданным ρ_2 .

Согласно (37), имеем

$$\rho_1 = (\chi_0^b G_2)^{1/3} \rho_2. \quad (41)$$

Рассматривая (21) как уравнение для m , решая уравнение, учитывая при этом (41), получим

$$m = [\lambda x - x^2(x - 3\varepsilon) - 1]^{-1}, \quad (42)$$

$$\lambda = \frac{3}{a_1} \ln \left[\frac{4}{6^{1/3}} \left(\frac{\chi_0}{G_2} \right)^{1/3} \rho_2 (vn_0)^{-1/4} x^2 \right]. \quad (43)$$

Рассматривая (30) как уравнение для t/t_1 и решая уравнение, полагая затем $G=G_2$ и $t=t_2$, находим

$$t_2/t_1 = \exp [(\beta_1 \beta_1^b / m c_1^b) (1 + c_1^b / \beta_1^b) G_2]. \quad (44)$$

Из (23) и (44) с учетом (3) и (41) имеем

$$t_2 = \frac{4\tau_1}{6^{1/3} x_0} \left(\frac{\chi_0}{G_2} \right)^{1/3} \rho_2 x^2 m \exp \left\{ \frac{1}{m} \left[\ln \left(\frac{\chi_0}{\chi_1} \right) + \frac{\beta_1 \beta_1^b}{c_1^b} \left(1 + \frac{c_1^b}{\beta_1^b} \right) G_2 - \frac{a_0}{3x} \right] \right\}. \quad (45)$$

Из (4) и (44) имеем также

$$t_\infty = \left(\frac{\chi_1}{\chi_0} \right)^{1/m} t_2 \exp \left[- \frac{\beta_1 \beta_1^b}{m c_1^b} \left(1 + \frac{c_1^b}{\beta_1^b} \right) G_2 \right]. \quad (46)$$

Формулы (42), (43), (45) и (46) выражают все три кинетических параметра m , t_2 и t_∞ в (2) через x .

8. Минимальное время очистки

Представим x в виде

$$x = \sigma - s, \quad (47)$$

где σ — такое значение величины x , при котором $m = \infty$.

Согласно (42), (43), имеем

$$\lambda \sigma - 1 = \sigma^2 (\sigma - 3\varepsilon), \quad (48)$$

$$\lambda = \frac{3}{a_1} \ln \left[\frac{4}{6^{1/3}} \left(\frac{\chi_0}{G_2} \right)^{1/3} \rho_2 (vn_0)^{-1/4} \sigma^2 \right]. \quad (49)$$

Обращаясь к нахождению минимального времени очистки t_2 при заданных n_0 , n_0^b , ρ_2 , G_2 , возьмем σ вместо ε за независимый параметр.

В силу (48) тогда ε будет функцией σ

$$\varepsilon = \frac{1}{3} [\sigma - (\lambda \sigma - 1) / \sigma^2]. \quad (50)$$

Учитывая (47) и предполагая выполненным

$$s/\sigma \ll 1. \quad (51)$$

запишем (15) как

$$\sigma \geq 3.2, \quad |\varepsilon|/\sigma \ll 1. \quad (52)$$

В главном порядке по малому параметру условия (51) имеем из (42), (43), (47) и (48):

$$1/m = hs, \quad (53)$$

$$h = \sigma^2 - 2/\sigma + \lambda - 6/a_0. \quad (54)$$

Согласно (49) и (52), при этом $h \geq 1$ и $s > 0$; λ в (50) и (54) дается формулой (49). В главном же порядке имеем из (45), (47) и (53)

$$\frac{\partial \ln t_2}{\partial s} = h \left[\ln \left(\frac{\chi_0}{\chi_1} \right) + \frac{\beta_1 \beta_1^b}{c_1^b} \left(1 + \frac{c_1^b}{\beta_1^b} \right) G_2 - \frac{a_1}{3\sigma} \right] - \frac{2}{\sigma} - \frac{1}{s}. \quad (55)$$

Согласно (53) и (55), минимум времени t_2 достигается при

$$m = \ln \left(\frac{\chi_0}{\chi_1} \right) + \frac{\beta_1 \beta_1^b}{c_1^b} \left(1 + \frac{c_1^b}{\beta_1^b} \right) G_2 - \frac{a_1}{3\sigma} - \frac{2}{n^2}, \quad (56)$$

$$s = 1/mh. \quad (57)$$

Минимальное время t_2 выражается через найденные m и s вытекающей из (45) и (47) формулой

$$t_2 = \frac{4\tau_0}{6^{1/3}\alpha_1} \left(\frac{\chi_0}{G_2} \right)^{1/3} \rho_2 (\sigma - s)^2 m \exp \left\{ \frac{1}{m} \left[\ln \left(\frac{\chi_0}{\chi_1} \right) + \frac{\beta_1 \beta_1^b}{c_1^b} \left(1 + \frac{c_1^b}{\beta_1^b} \right) G_2 - \frac{a_1}{3(\sigma - s)} \right] \right\}. \quad (58)$$

Формулы (49), (50), (54), (56)–(58) дают оптимальные в смысле наименьшего времени очистки при заданных n_0 , n_0^b , ρ_2 , G_2 кинетические характеристики. Оптимальное время t_∞ легко находится затем с помощью (46).

Коэффициент конденсации α_0 входит только в формулы (58) и (46). Согласно (58) и (46), времена t_2 и t_∞ обратно пропорциональны α_0 .

Условие (51) записывается с помощью (57) как

$$1/\sigma mh \ll 1. \quad (59)$$

Из (56) и (58) видно, что чрезвычайно сильное неравенство $\chi_0/\chi_1 \gg 1$ [2] гарантирует сильное неравенство $m \gg 1$, а с ним при (52) и $h \geq 1$ также и условие (59) и, кроме того, обеспечивает слабую зависимость величин m и t_2 от σ , а вследствие (49), (50) их слабую зависимость от ε . Вместе с m и t_2 слабо зависит от ε , согласно (46), время t_∞ .

9. Зависимость минимального времени очистки от потери очищаемого вещества

Исследуем зависимость минимального времени очистки при заданных внешних параметрах n_0 , n_0^b , ρ_2 , G_2 от значения параметра G_2 . Считаем, что G_2 лежит в интервале

$$c_1^b/\beta_1\beta_1^b \leq G_2 \leq mc_1^b/\beta_1\beta_1^b, \quad (60)$$

в котором обычно соблюдаются ограничения (25), (35), а ввиду (40) также и ограничение (39).

Из (58) с учетом (48), (49), (54), (56) и (57) имеем в интервале (60) в главном порядке по малому параметру условия (59)

$$\frac{\partial \ln t_2}{\partial G_2} = -\frac{1}{3G_2} + \frac{\beta_1 \beta_1^b}{mc_1^b} \left(1 + \frac{c_1^b}{\beta_1^b} \right). \quad (61)$$

Производная по G_2 берется при постоянстве n_0 , n_0^b , ρ_2 и ε (ε для заданного очищаемого вещества полностью определяется температурой T_0). Согласно (61), зависимость $\ln t_2$ от G_2 посредством σ , m и s относительно незначительна. На основании (61) заключаем

$$\partial t_2 / \partial G_2 < 0 \quad (G_2 < G_{кр}), \quad \partial t_2 / \partial G_2 > 0 \quad (G_2 > G_{кр}), \quad (62)$$

$$G_{кр} = (mc_1^b / 3\beta_1\beta_1^b) / (1 + c_1^b/\beta_1^b), \quad (63)$$

где $G_{кр}$ — «критическое» значение величины G_2 , доставляющее времени t_2 абсолютный минимум при заданных n_0 , n_0^b , ρ_2 (и ε). Значения других величин при $G_2 = G_{кр}$ не снабжаем индексом кр.

Из (56), (58), (46), (38) имеем с учетом (63) при $G_2 = G_{кр}$

$$m = \frac{3}{2} \left[\ln \left(\frac{\chi_0}{\chi_1} \right) - \frac{a_0}{3\tau} - \frac{2}{h\sigma} \right], \quad (64)$$

$$t_2 = \frac{4\tau_0}{6^{1/2}a_0} \left[\frac{3\chi_0\beta_1\beta_1^2(1+c_1^2/\beta_1^2)}{mc_1^2} \right]^{1/2} \rho_2 (\tau - s)^2 m \exp \left\{ \frac{1}{m} \left[\ln \left(\frac{\chi_0}{\chi_1} \right) + \frac{m}{3} - \frac{a_0}{3(\tau - s)} \right] \right\}, \quad (65)$$

$$t_\infty = (\chi_1/\chi_0)^{1/m} t_2 \exp(-1/3), \quad (66)$$

$$\chi_1/\chi_2 = \exp[(mc_1^2/3\beta_1^2)(1 - \beta_1^2/\beta_1)]. \quad (67)$$

При $G_2 = G_{кр}$ ограничения (25), (35) и (39) на G_2 обычно соблюдаются даже и с запасом. При $G_2 = G_{кр}$ из (44) следует $t_2/t_1 = \exp(1/3)$.

Поскольку зависимость λ от G_2 , согласно (49), слабая, то для нахождения λ при $G_2 = G_{кр}$ (когда G_2 и λ зависят от m) можно использовать формулу

$$\lambda = \frac{3}{a_0} \ln \left\{ \frac{4}{3^{1/2}} \left[\frac{(\chi_0\beta_1\beta_1^2/c_1^2)(1+c_1^2/\beta_1^2)}{\ln(\chi_0/\chi_1) - a_0/3\tau} \right]^{1/2} \rho_2 (m\tau_0)^{-1/2} \tau^2 \right\}, \quad (68)$$

которая следует из (49), (63) и вытекающего из (64) с высокой точностью выражения, в котором пренебрежено относительно малым членом $2/h\sigma$.

Если ограничение (19) слегка нарушается (частицы не успевают поглотить весь избыточный пар примеси), то полученное в [2] выражение для χ_0/χ_1 и выражение (67) для χ_1/χ_2 приводят к слегка завышенным результатам.

Формулы (63)–(68) дают оптимальные в смысле наименьшего времени очистки при заданных n_0 , n_0^b , ρ_2 кинетические параметры.

10. Приложения теории

Результаты расчета по формулам (68), (50), (54), (64), (57), (65)–(67) и (63) представлены в таблице для практически важного случая, когда примесным и очищаемым веществами являются кислород и водород.

Характеристики оптимального режима очистки при заданных n_0 , n_0^b , R_2

σ	λ	ε	h	m	$\rho \cdot 10^2$	$t_2 \cdot 10^2, [c]$	$t_\infty \cdot 10^2, [c]$	χ_1/χ_2	$G_{кр} \cdot 10^2$
1.5	2.57	0.08	3.1	27.3	1.20	6.1	2.0	6.30	4.60
1.6	2.60	0.12	3.5	27.7	1.04	7.0	2.3	6.47	4.67
1.7	2.63	0.17	3.9	28.1	0.91	7.9	2.6	6.62	4.73
1.8	2.65	0.21	4.3	28.4	0.81	9.0	3.0	6.75	4.78
1.9	2.68	0.26	4.8	28.6	0.73	10.0	3.4	6.87	4.82
2.0	2.70	0.30	5.3	28.8	0.66	11.2	3.8	6.98	4.86
2.1	2.72	0.34	5.7	29.0	0.60	12.4	4.2	7.07	4.89
2.2	2.74	0.39	6.2	29.2	0.55	13.6	4.7	7.16	4.92
2.3	2.76	0.43	6.7	29.4	0.51	15.0	5.1	7.23	4.95
2.4	2.78	0.47	7.3	29.5	0.47	16.3	5.6	7.31	4.97

Примечание. $n_0 = 1.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $n_0^b = 3.5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$, $R_2 = 10^{-4} \text{ см}$, $T_0 = 62.46 \text{ К}$, $\alpha_0 = 1$, $a_0 = 13.76$, $\tau_0 = 6.8 \cdot 10^{-8} \text{ с}$, $\rho_2 = 1.16 \cdot 10^4$, $T_1 = 23.3 \text{ К}$, $\chi_0 = 4.3 \cdot 10^{-4}$, $\chi_0/\chi_1 = 2.7 \cdot 10^6$, $\beta_1 = 38.4$, $\beta_1^2 = 6.2$, $c_1^2 = 3/2$.

Нужные для расчетов величины a_0 , τ_0 , ρ_2 были найдены по формулам (6), (11), (36) и по данным из [2, 8]. Положено $R_2 = 10^{-4} \text{ см}$. Внизу таблицы указаны также остальные важные сведения, взятые из [2, 8]. Возможное отклонение α_0 от выбранного значения 1 легко учитывается умножением полученных t_2 и t_∞ на $1/\alpha_0$. Видно, что во всем приведенном в таблице характерном диапазоне изменения параметра σ соблюдаются условия (52) и (59).

Показываемая таблицей слабая зависимость m , t_2 , t_∞ от микроскопического параметра ε во всей физически разумной области его значений подтверждает сказанное в конце раздела 8. Эта слабая зависимость, обязанный [1] динамическим условием конденсации, позволяет предсказывать оптимальный режим очистки с достаточной для практики точностью без конкретных сведений о ε . То, что m лежит вблизи к верхней границе условия (19), подтверждает [2] представительность принятого в (2) степенного по t роста Φ .

Список литературы

- [1] Куни Ф. М. // Проблемы теоретической физики. III. Л., 1988. С. 192—236.
- [2] Грипин А. П., Куни Ф. М., Мелизов А. А., Трофимов Ю. В. // ЖТФ. 1991. Т. 61. Вып. 4. С. 7—14.
- [3] Русанов А. И. Фазовые равновесия и поверхностные явления. Л.: Химия, 1967. 338 с.
- [4] Reiss H., Katz J. L., Cohen E. R. // J. Chem. Phys. 1968. Vol. 48. N 12. P. 5553.
- [5] Kikuchi R. // J. St. Phys. 1969. Vol. 1. N 2. P. 351.
- [6] Куни Ф. М., Грипин А. П., Щекин А. К., Русанов А. И. // Вопросы физики формирования и фазовых превращений. Калинин, 1987. С. 25—30.
- [7] Русанов А. И., Куни Ф. М., Щекин А. К. // Коллоид. журн. 1987. Т. 49. № 2. С. 309—315.
- [8] Справочник химика. Л.; М.: Госхимиздат, 1962. Т. 1. 1072 с.

Ленинградский государственный
университет

Поступило в Редакцию
21 марта 1990 г.
