

УДК 536.423.4

Равновесные распределения ионных кластеров по размерам в квазихимической модели. Дубровский В.Г. // Научное приборостроение. Формирование пучков заряженных частиц. Л.: Наука, 1990. - С. 14-21.

Предложен статистический метод нахождения равновесной функции распределения ионных кластеров по размерам, основанный на квазихимической модели конденсации. Полученные распределения устраняют многие трудности классической теории и допускают наглядную интерпретацию в терминах фазового перехода газ-жидкость. Лит. - 6 назв., ил. - 2.

В.Г.Дубровский (НТО АН СССР)

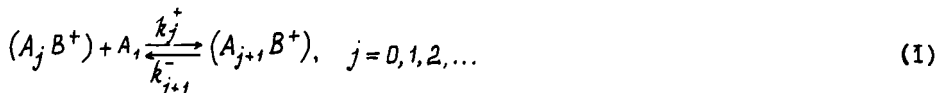
РАВНОВЕСНЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИОННЫХ КЛАСТЕРОВ ПО РАЗМЕРАМ В КВАЗИХИМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Экспериментальные масс-спектрометрические исследования распределений ионных кластеров по размерам стимулируют развитие кинетической теории кластерообразования. Одной из важнейших и до конца не решенных задач в этой области является изучение дискретной квазихимической модели (КМ) с реальными зависимостями констант скоростей реакций от размера [1]. Первый шаг при аналитических исследованиях КМ состоит в нахождении ее равновесных решений, играющих существенную роль в теории. В работе [2] предложен новый метод построения равновесных решений КМ гомогенной конденсации.

О с н о в н ы е п о л о ж е н и я К М

В рамках КМ процесс образования ионных кластеров рассматривается в следующей постановке. Изучаемая дисперсная среда представляет собой пространственно однородную смесь идеальных газов молекул пара A_1 , ионов B^+ , пассивного газа и кластеров различного размера ($A_j B^+$), помещенную в конечный объем V . Полное число молекул пара и ионов в системе равны, соответственно, $N_A^{tot} \equiv N$ и N_B^{tot} . Если концентрация пассивного газа значительно превосходит концентрацию пара, иерархия времен энергетической и химической релаксации приводит к равенству температур кластеров температуре среды, то есть обеспечивает изотермичность процесса.

Считается, что в системе протекают реакции соединения между кластерами и молекулами пара и мономолекулярного распада кластера на молекулу пара и кластер меньшего размера



Прямая реакция (1) трактуется как процесс конденсации, обратная – как процесс испарения. Константы скоростей $k_j^\pm$ предполагаются зависящими от номера j и не зависящими от концентраций $n_j = [(A_j B^+)]$. Не учитываются процессы взаимодействия между кластерами, а также непарные столкновения и реакции фрагментации кластеров на несколько осколков.

При сделанных допущениях состояние системы в момент времени t в отсутствие химического равновесия полностью определяется средними концентрациями свободных молекул пара $n_A(t)$, кластеров различного размера $n_j(t)$ (при $j=0$ $n_0(t)$ есть концентрация свободных ионов $n_B(t)$), объемом V и температурой T . Система кинетических уравнений КМ для реакций (1) имеет вид

$$\begin{cases} dn_A/dt = - \sum_{j=1}^N I_j; \\ dn_j/dt = I_j(1-\delta_{j,0}) - I_{j+1}(1-\delta_{j,N}), \quad j=0, 1, \dots, N; \\ I_j = n_A n_{j-1} k_{j-1}^+ - n_j k_j^- \end{cases} \quad (2)$$

Величина I_j по физическому смыслу есть поток кластеров с уровня $j-1$ на уровень j . Символ Кронекера $\delta_{j,0}$ запрещает распад иона B^+ , а $\delta_{j,N}$ – появление в системе кластера с размером, большим общего числа молекул пара N . Система (2) имеет два первых интеграла, выражающих законы сохранения полного числа молекул A_i в единице объема $n_A^{tot} = N/V$ и полного числа ионов в единице объема $n_B^{tot} = N_B^{tot}/V$:

$$\sum_{j=0}^N n_j(t) = n_B^{tot}; \quad n_A(t) + \sum_{j=1}^N j n_j(t) = n_A^{tot}. \quad (3)$$

Система (2) представляет собой систему зацепляющихся нелинейных дифференциальных уравнений огромной размерности. Дело усложняется еще и тем, что зависимость констант скоростей реакций $k_j^\pm$ от j для любых j обычно неизвестна. Поэтому при изучении кинетики роста больших кластеров (капель) часто переходят к диффузионному приближению КМ, заменяя дискретную систему (2) одним уравнением в частных производных типа Фоккера–Планка [3]. Оно имеет вид уравнения диффузии в потенциальном поле, обусловленном работой образования кластера. Зависимость $k_j^\pm$ от j при $j \gg 1$ аппроксимируется простым геометрическим фактором $k_j^\pm \sim S_j$, где S_j – площадь поверхности кластера, предполагаемого сферическим, а константа скорости распада k_j^- восстанавливается из k_j^+ по принципу детального баланса. Отметим, что переход к диффузионному приближению существенно "обедняет" исходную дискретную систему КМ. Во-первых, из рассмотрения исключаются малые кластеры, наиболее интересные с точки зрения масс-спектрометрических экспериментов. Во-вторых, уравнения (2), в отличие от диффузионного уравнения, в принципе позволяют описать процесс релаксации к равновесному распределению от начала до конца, оставаясь справедливыми на сколь угодно больших временах.

Уравнения КМ (2) записаны для системы с конечными N, V , то есть еще до совершения термодинамического предельного перехода $N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, N/V = \text{const}$.

В соответствии с этим в системе (2) учтена принципиальная возможность появления кластера ($A_N B^+$), содержащего все N молекул пара системы.

Термодинамическая квазиравновесная функция распределения

Известный термодинамический способ нахождения квазиравновесных распределений гетерогенных кластеров по размерам [4] дает результат

$$n_j^{(q)} \sim \exp\left(-\frac{\Delta \mathcal{F}_j}{k_B T}\right); \Delta \mathcal{F}_j = -\ell n s j + \sigma S_j + \frac{q^2}{2} (\epsilon_v^{-1} - \epsilon_\ell^{-1}) n_j^{-1}, \quad j \gg 1, \quad (4)$$

где $\Delta \mathcal{F}_j$ есть минимальная работа, идущая на образование комплекса ($A_j B^+$); σ - коэффициент поверхностного натяжения; q - заряд иона, $S_j = 4\pi n_j^2$; n_j - радиус сферического кластера; $\epsilon_v, \epsilon_\ell$ - диэлектрические проницаемости пара и жидкости, $s(t) = n_A(t)/n_{A,s}^e$ - зависящее от времени пересыщение пара. Первое слагаемое в выражении для $\Delta \mathcal{F}_j$ представляет собой работу, необходимую для испарения j молекул A_i с бесконечной поверхности жидкости, второе - поверхностную энергию кластера, третье возникает за счет электростатического взаимодействия иона с молекулами кластера. Качественный вид квазиравновесной функции приведен на рис.1. Функ-

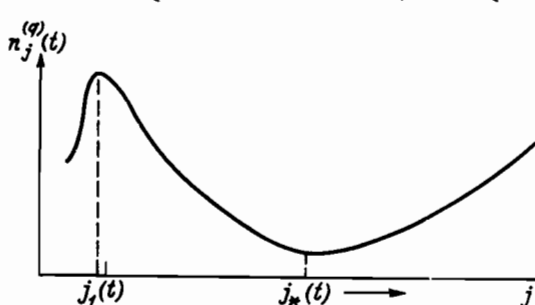


Рис.1. Качественный вид квазиравновесной функции распределения в момент времени $t < \infty$. Критический размер $j_*(t)$ растет с увеличением t

ция $n_j^{(q)}$ может иметь максимум в области небольших j , положение которых зависит от значений физических параметров в выражении (4). Если $j_1(t) \sim 1$, то есть лежит в области, где деление $\Delta \mathcal{F}_j$ на объемную, поверхностную и электростатическую части перестает быть справедливым, значение $j_1(t)$ используется как оценка. Размер $j_*(t)$, в котором $n_j^{(q)}$ имеет минимум, называется критическим. При невысоких пересыщениях ($s \lesssim 5$) размер $j_* \gg j_1$ может находиться из формулы Томсона для гомогенной теории:

$$j_*(t) = \frac{32}{5} \pi v_\ell^2 \left(\frac{\sigma}{k_B T \ell n s(t)} \right)^3, \quad (5)$$

где v_ℓ - объем, занимаемый одной молекулой в жидкости. По достижении критического размера $n_j^{(q)}$ неограниченно возрастает с ростом j при $t < \infty$ и не удовлетворяет законам сохранения (3). Поэтому квазиравновесная функция может иметь физический смысл лишь в докритической области, представляя собой гиббсовское распределение вдали от активационного барьера нуклеации, подстраивающееся под мгновенные значения $s(t)$ и $n_B(t)$ [3]. С другой стороны, в финальном равновесном состоянии системы при $t \rightarrow \infty$ $s(t) \rightarrow 1$ и, согласно (5), $j_*(t) \rightarrow \infty$. Таким образом, обычная в теории конденсации трактовка жидкости как кластеров закритического размера становится с трудностями.

В равновесном состоянии поток $I_j = 0$ для всех $j = 1, 2, \dots, N$. Из последнего уравнения системы (2) имеем следующие выражения для равновесных концентраций:

$$n_j^e = n_B^e d_j [n_A^e]^j; \quad d_j = \prod_{i=0}^{j-1} K_i, \quad (d_0 = 1), \quad (6)$$

где $K_i = k_{i+1}^+(T)/k_i^-(T)$ - термодинамическая константа равновесия реакции (1). В формулы (6) входят две неизвестные величины: равновесная концентрация ионов n_B^e и пара n_A^e , для которых из выражений (3) получаем уравнения:

$$n_B^e = \frac{n_B^{tot}}{1 + F_N(n_A^e)}; \quad n_A^e \left[1 + n_B^{tot} \frac{F'_N(n_A^e)}{1 + F_N(n_A^e)} \right] = n_A^{tot}, \quad (7)$$

$$F_N(x) \equiv \sum_{j=1}^N d_j x^j; \quad F'_N(x) \equiv \frac{dF_N(x)}{dx}.$$

Таким образом, вид финального равновесного распределения полностью определяется константами равновесия $K_j(T)$, фигурирующими в выражении (6) для d_j . Следуя [2], для их нахождения поступим следующим образом. При равновесном протекании реакций справедливо соотношение

$$\mu_j = \mu_{j-1} + \mu_A, \quad j = 1, \dots, N \quad \text{или} \quad \mu_j = \mu_B + j\mu_A,$$

где $\mu_{j,A,B}$ - химические потенциалы кластера ($A_j B^+$), молекулы пара A , и иона B^+ соответственно. Используя известную формулу [5]

$$\mu_{j,A,B} = K_B T \ln \left(\frac{n_{j,A,B}^e \lambda_{j,A,B}^3}{Z_{j,A,B}} \right), \quad (8)$$

где $\lambda_{j,A,B} = \frac{h}{(2\pi m_{j,A,B} K_B T)^{1/2}}$, h - постоянная Планка; $m_{j,A,B}$ - массы кластера, молекулы пара и иона ($m_j = j m_A + m_B$); $Z_{j,A,B}$ - статистические суммы внутренних степеней свободы ($A_j B^+$), A , и B^+ , и сравнивая формулу (8) с выражением (6) для n_j^e , получаем:

$$d_j = \lambda_A^{3j} (1 + m_j)^{3/2} \frac{Z_j}{Z_A^j Z_B}; \quad m \equiv m_A/m_B. \quad (9)$$

Формула (9) сводит задачу о нахождении равновесных распределений к вычислению статистических сумм $Z_{j,A,B}$, определяемых внутрикластерными потенциалами взаимодействий и являющихся функциями температуры и параметров потенциалов. В качестве примера использования выражения (9) для определения констант равновесия найдем $K_0(T)$ для кластера ($B^+ A$), состоящего из двух бесструктурных частиц B^+ и A , с энергией взаимодействия

$$\mathcal{E}_{vk} = \mathcal{E}_0 + \hbar \omega (v + 1/2) + \frac{\hbar^2}{2I} k(k+1),$$

где $\mathcal{E}_0$ - электрическая энергия взаимодействия, отсчитываемая от суммы электрических энергий разведенных частиц B и A ; v, k - колебательное и вращательное квантовые числа; $I = (m_A + m_B)^{-1} m_A m_B r_0^2$ - момент инерции кластера, r_0 - среднее расстояние между частицами.

Тогда $Z_1 = \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_0}{K_B T}\right) Z_{BP} Z_{k01}$, при $K_B T \gg \frac{\hbar^2}{2I}$ $Z_{BP} \approx \frac{2I}{\hbar^2} K_B T$ и, согласно (9),

$$K_0(T) \equiv \frac{k_0^+}{k_1^-} = (1+m)^{3/2} \lambda_A^3 \frac{2I}{\hbar^2} K_B T Z_{\text{кол}} \exp\left(-\frac{\xi_0}{K_B T}\right),$$

$$Z_{\text{кол}} = \frac{\exp\left(-\frac{\hbar \omega}{2 K_B T}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar \omega}{K_B T}\right)}.$$

Полученное представление для n_j^e (6), (9) можно записать в эквивалентной форме, используя формулу связи статсуммы и свободной энергии в каноническом ансамбле

$$Z_{j,A,B} = \exp\left(-\frac{G_{j,A,B}}{K_B T}\right),$$

где $G_{j,A,B}$ — свободная энергия ($A; B^+$), A , и B^+ . При этом из формул (6), (9) для равновесной функции имеем точное выражение, справедливое при всех j :

$$n_j^e = \lambda_A^{3j} (1+m)^{3/2} n_B^e [n_A^e]^j \exp\left(-\frac{\Delta G_j}{K_B T}\right). \quad (10)$$

Величина $\Delta G_j = G_j - j G_A - G_B$ есть свободная энергия, потраченная на образование кластера ($A_j B^+$) из j молекул пара и иона B^+ в равновесных условиях.

Р а в н о в е с н а я ф у н к ц и я р а с п р е д е л е н и я
д л я п р о с т о й а п п р о к с и м а ц и и ΔG_j .

Как уже отмечалось, вычисление ΔG_j при произвольных j требует знания внутрикластерных потенциалов взаимодействия. Однако, при $j \gg 1$ возможно разделение величины ΔG_j на три части, соответствующие объемной, поверхностной и электростатической энергии кластера. Считая форму больших кластеров сферической, представим ΔG_j в виде

$$\Delta G_j = (G - \xi_V^0) j + (\alpha - \xi_S^0) S_j + \frac{q^2}{2} (\epsilon_v^{-1} - \epsilon_\ell^{-1}) n_j^{-1}. \quad (11)$$

где G , ξ_V^0 — по физическому смыслу есть плотность свободной энергии и энергии связи на одну молекулу; α , ξ_S^0 — поверхностная плотность свободной энергии и связи (аналог поверхностного натяжения в выражении (4)). Последний член в правой части уравнения (11) имеет тот же смысл, что и в (4). Подставляя (11) в (10) и выражая площадь поверхности кластера S_j и радиус r_j через j , получим представление для n_j^e при $j \gg 1$:

$$n_j^e = (1+m)^{3/2} n_B^e \exp(a_j - b_j^{2/3} - c_j^{-1/3}), \quad (12)$$

$$a = \ln n_A^e + 3 \ln \lambda_A + \frac{\xi_V^0 - G}{K_B T}; \quad (13)$$

$$b = \frac{4\pi \eta^2 (\alpha - \xi_S^0)}{K_B T}; \quad c = \frac{q^2}{2 K_B T} (\epsilon_v^{-1} - \epsilon_\ell^{-1}) \eta^{-1}; \quad \eta = \left(\frac{3m_A}{4\pi \rho_\ell}\right)^{1/3}$$

где ρ_ℓ — плотность жидкости в кластере.

Из формулы (12) видно, что при $a > 0$ $n_j^e \rightarrow \infty$ при $j \rightarrow \infty$, тогда как при $a < 0$ $n_j^e \rightarrow 0$ при $j \rightarrow \infty$. Следуя Френкелю [6], первый случай будем считать соответствующим пересыщенному пару, а второй — ненасыщенному пару. Тогда состояние с $a = 0$ есть состояние насыщения. Из (13) находим выражение для плотности насыщенного пара:

$$n_{A,S}^e = \lambda_A^{-3} \exp\left(-\frac{\xi_V^0 - G}{K_B T}\right), \quad (14)$$

которое с точностью до предэкспоненты совпадает с известным из термодинамики уравнением Клапейрона-Клаузиуса. Величина a , согласно (13), (14), есть логарифм равновесного пересыщения, то есть $a = \ln(n_A^e/n_{A,S}^e)$. Подчеркнем, что, в отличие от n_A^e , являющейся функцией температуры T и полного числа молекул A , в системе N , $n_{A,S}^e$ зависит только от температуры.

Законы сохранения (7), необходимые для определения величин a и n_B^e в выражении (12), для рассматриваемой аппроксимации ΔG_j имеют вид

$$n_B^e = \frac{n_B^{tot}}{1 + F_N(a)}; \quad n_{A,S}^e e^a + n_B^{tot} \frac{F'_N(a)}{1 + F_N(a)} = n_A^{tot}, \quad (15)$$

$$F_N(a) = \sum_{j=1}^N (1 + \pi_j)^{3/2} \exp[\varphi_j(a)]; \quad \varphi_j(a) = aj - b_j^{2/3} - c_j^{-1/3}, \quad j \geq 1. \quad (16)$$

В формуле (16) формально распространилось представление (11), справедливое только для $j \gg 1$, на все j вплоть до $j = 1$. Вопрос об уточнении (11) для малых j требует отдельного исследования. Рассмотрим поведение $\varphi_j(a)$ как функции j в случае пересыщенного пара ($a > 0$). Поскольку $a(N) \ll 1$ при больших N , в области малых размеров $\varphi_j \approx -b_j^{2/3} - c_j^{-1/3}$ и не зависит от a . Функция φ_j при $j \gg 1$ максимальна в точке $j = 1$, если $\frac{c}{2b} < 1$, и в точке $j = \frac{c}{2b}$, если $\frac{c}{2b} > 1$. В области больших j функция $\varphi_j(a)$ принимает максимальное значение при $j = N$. Имея в виду лишь получение качественных зависимостей параметров равновесного распределения a и n_B^e от N , перейдем в выражениях (16) от суммирования к интегрированию и заменим $F_N(a)$ и $F'_N(a)$ вкладами от двух точек максимума функции $\varphi_j(a)$. Вычисление этих вкладов по методу Лапласа дает следующий результат

$$F_N(a) \approx A(\max(1, j_1)) + A_N(a); \quad F'_N(a) \approx \max(1, j_1) A(\max(1, j_1)) + N A_N(a), \quad (17)$$

$$A(1) \sim \frac{3(1+\pi)^{3/2}}{2b-c} \exp(-b-c); \quad A(j_1) \sim \frac{(1+\pi_{j_1})^{3/2}}{2} \left(\frac{3\pi}{b}\right)^{1/2} j_1^{2/3} \exp(-3b j_1^{2/3}),$$

$$A_N(a) \sim \frac{(\pi N)^{3/2}}{a - \frac{2b}{3} N^{-1/3}} \exp(aN - bN^{2/3}).$$

Через j_1 здесь обозначен размер $\frac{c}{2b}$. Используя формулы (17) в выражениях (15), получаем искомые зависимости (с точностью до членов, пропорциональных N^{-1}):

$$a(N) \approx bN^{-1/3} + N^{-1} \ln \left[\frac{A_N}{(\pi N)^{3/2}} \right]; \quad n_B^e(N) \approx \frac{n_B^{tot}}{1 + A(\max(1, j_1)) + A_N}, \quad (18)$$

$$A_N = N^{-1} \left[\Gamma(1 + A(\max(1, j_1))) - \max(1, j_1) A(\max(1, j_1)) \right], \quad \Gamma \equiv \frac{n_A^{tot} - n_{A,S}^e}{n_B^{tot}}.$$

Видно, что равновесное пересыщение $a(N) = \ln \left(\frac{n_A(N)}{n_{A,S}^e} \right) \rightarrow 0$ при $N \rightarrow \infty$. Поскольку величины $A(1)$ и $A(j_1)$ малы за счет экспоненциальных факторов, лишь незначительная часть ионов в равновесном состоянии оказывается входящей в состав кластеров, то есть $n_B^e \approx n_B^{tot}$.

Интерпретация полученных результатов в терминах фазового перехода газ - жидкость

Распределение (12) с a и n_B^e в формуле (18) достигает минимума в точке

$$j_* = \frac{\delta N}{27} \left[1 - 3N^{-2/3} \ln \left(\frac{AN}{(mN)^{3/2}} \right) \right] \simeq \frac{\delta}{27} N.$$

Выясним связь характерных размеров равновесного распределения $\max(I, j_1)$ и j_* с зависящими от времени величинами $j_1(t)$ и $j_*(t)$ (см. рис. 1). Представив в формуле (5) логарифмы пересыщения в виде $\ln s(t) = \ln \left(\frac{n_A(t)}{n_A^e} \right) + a(N)$ и используя выражение (13) для коэффициента β , получаем $j_*(t) \rightarrow j_*$ при $t \rightarrow \infty$. Таким образом, размер j_* есть критический размер классической теории конденсации в конечном равновесном состоянии системы с конечными V и N . Аналогично, размер $\max(I, j_1)$ есть равновесное значение $j_1(t)$, то есть $j_1(t) \rightarrow \max(I, j_1)$ при $t \rightarrow \infty$, что следует из уравнения на $j_1(t)$:

$$3 \left[a(N) + \ln \left(\frac{n_A(t)}{n_A^e} \right) \right] = 2\beta j^{-1/3} \left(1 - \frac{\max(I, j_1)}{j} \right), \quad j \geq 1.$$

При замене $\sigma \leftrightarrow (\alpha - \varepsilon_s^0)$ связь между минимальной работой в выражении (4) и показателем экспоненты в (12) имеет вид:

$$-\frac{\Delta F_j}{k_B T} = \ln \left(\frac{n_A(t)}{n_A^e} \right) j + a_j - \beta j^{2/3} - c j^{-1/3}.$$

Очевидно, что при $t \xrightarrow{A} \infty$ ($n_A(t) \rightarrow n_A^e$) и после совершения термодинамического предельного перехода ($a \rightarrow 0$) квазиравновесная функция распределения (4) и равновесное решение КМ (12), (18) совпадают с точностью до предэкспоненты.

Все полученные результаты в термодинамическом пределе остаются в силе, а характеристики равновесного распределения перестают зависеть от N . Построенное решение удовлетворяет законам сохранения и в пределе бесконечного числа частиц. Согласно (12), (18) в этом случае

$$n_j^e = (1 + m_j)^{3/2} n_B^e \exp(-\beta j^{2/3} - c j^{-1/3}), \quad n_B^e \simeq \frac{n_B^{\text{tot}}}{1 + A(\max(I, j_1))}.$$

Зависимости n_j^e от j для различных N приведены на рис. 2, из которого ясно, что при $N < \infty$ равновесное распределение имеет два характерных максимума. Первый из них соответствует кластерам

(A, B^+) ($j_1 < 1$) или (A_1, B^+) ($j_1 > 1$), а второй - кластерам наибольших размеров, возможных в системе. Отождествим область I на рис. 2 с газообразным состоянием системы, а область II - с жидкостью. Все кластеры больших размеров стремятся либо слиться в одну большую каплю (максимум при $j = N$), либо, вследствие распада, пополнить число кластеров с $j = \max(I, j_1)$ (максимум в области малых размеров). Следовательно, гетерогенная система расслаивается на фазы, а распределение (12), (18)

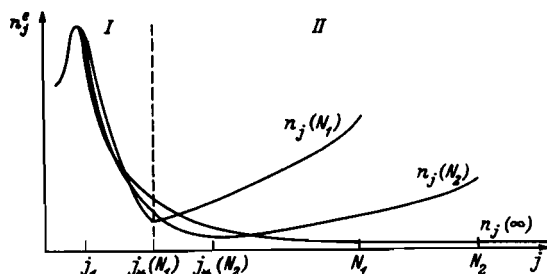


Рис. 2. Равновесная функция распределения в пересыщенном паре в случае $j_1 > 1$. Область I соответствует газообразному состоянию, область II - жидкости.

описывает это расслоение. Плотности образовавшихся фаз приближенно равны площадям областей I и II. Например, оценив площадь области II, найдем выражение для числа частиц жидкости в единице объема системы ("плотность" жидкой фазы)

$$n_l^e \approx \frac{19}{27} (n_A^{tot} - n_{A,S}^e).$$

Таким образом, статистические равновесные функции распределения оказываются свободными от расходимостей в термодинамическом пределе и позволяют описывать процесс равновесного кластерообразования в рамках КМ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Binder K./Theory for the dynamics of "clusters". II Critical diffusions in binary systems and the kinetics of phase separation//Phys.Rev. - 1977. - V.B15, N 9. - P. 4425-4447.
2. Богданов А.В. и др. Равновесные решения квазихимической модели конденсации. Препринт № II63. - Л.: ФТИ, 1987. - 40 с.
3. Куни Ф.М. Проблемы кинетики конденсации. Препринт № 83-79Р. - Киев: ИТФ, 1983. - 26 с.
4. Kotake S., Glass I.I. Froms with nucleation and condensation//Prog. aerospace sci. - 1981. - V.19, N 2-4. - P. 129-196.
5. Румер Ю.Б., Рывкин М.Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика. - М.: Наука, 1977. - 552 с.
6. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. - М.: Наука, 1975. - 592 с.

А.И.Григорьев, Е.И.Мухина (Ярославский ГУ)

УСТОЙЧИВОСТЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ КАПЛИ В ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Расчет равновесной формы, а также критических условий развития неустойчивости Тонкса-Френкеля, диэлектрической капли (в жидком мениске на срезе капилляра, по которому подается жидкость) в постоянном однородном внешнем электрическом поле $\vec{E}_0$ представляет интерес в связи с разработкой новых методов введения жидких веществ в масс-спектрометры, электростатическим распылением топлив и лакокрасочных материалов и изучением процессов разделения зарядов в грозовых облаках [1-3]. Основанием для такого интереса является тот факт, что при достаточно большой величине E_0 в капле развивается неустойчивость Тонкса-Френкеля, при которой на вершине капли, ориентированной по полю, появляется заостренный выступ, с вершины которого начинается эмиссия высокодисперсных сильно заряженных капелек [4-5]. Именно этот эффект и используется в перечисленных приложениях, а знание равновесной формы капли необходимо для понимания механизма эмиссии капель и расчета их характеристик.

В работе [2] предпринята, по-видимому, первая попытка расчета критических условий неустойчивости диэлектрической капли в поле $\vec{E}_0$. Но ее авторы не учли того обстоятельства, что равновесная в $\vec{E}_0$ форма капли отлична от сферической, на