

УДК 531.351

М.А. Бубенчиков, А.И. Потекаев, А.М. Бубенчиков,
И.И. Клыков, А.С. Маслов, В.В. Овчаренко

ДВИЖЕНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ПОЛЕ ГРАДИЕНТА ТЕМПЕРАТУРЫ¹

Показано, что для расчета движения углеродных нанотрубок (термофореза) может быть использована модель идеального газа, более того, монокинетическое приближение Р. Клаузиуса. Использование классического подхода позволяет определить и скорость частиц, и силу воздействия со стороны газовой фазы в случае наличия в ней градиента температуры. Предложенная схема простейшего расчета термофореза основана на теореме об изменении импульса системы для системы наночастица – молекулы в λ -слое. Рассчитан термофорез углеродных нанотрубок.

Ключевые слова: углеродная нанотрубка, идеальный газ, квазиоднородное распределение скоростей, схема скомпенсированных воздействий, среднестатистический угол контрпары, скорость и сила термофореза.

Термофорезу мелких, но не наноразмерных частиц посвящено значительное количество работ, среди которых можно указать следующие работы обзорного характера [1–5].

В настоящей статье используется подход, изложенный в [6, 7], с помощью которого мы определяем скорость термофоретического перемещения наночастицы в градиентном поле температур, а также силу термофоретического давления на перемещающуюся пробную частицу, которая в равновесном режиме сбалансирована силой сопротивления частицы.

Скорость термофореза частиц

Как и в случае определения сопротивления наночастиц [6], при расчете скорости термофореза будет достаточно рассмотреть процессы обмена импульсом между частицей и молекулами, находящимися в слое толщиной λ (где λ – средняя длина свободного пробега молекул). Примем, что в одном из выделенных направлений реализуется изменение температуры. На длине равной λ это небольшие изменения, однако они полностью определяют процессы термофоретического движения частиц. Заселяем λ -слой молекулами газовой среды, добываясь при этом их статистически однородного распределения в пространстве.

Таким образом, в нашей теории мы постулируем ступенчатое изменение температуры, причем размер ступеньки в этом распределении также равен λ .

На рис. 1 для примера показаны восемь температурных слоев, при этом нанотрубка укладывается в шесть слоев. Два торцевых слоя также содержат молекулы, входящие в полную сумму молекул, ударившихся о углеродную нанотрубку. Для

¹ Работа выполнена в рамках Программы повышения конкурентоспособности Томского государственного университета и при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 14-01-31365.

предлагаемой технологии расчетов не важно через сколько температурных слоев проходит нанотрубка. Их может быть два, четыре, шесть и т.д.

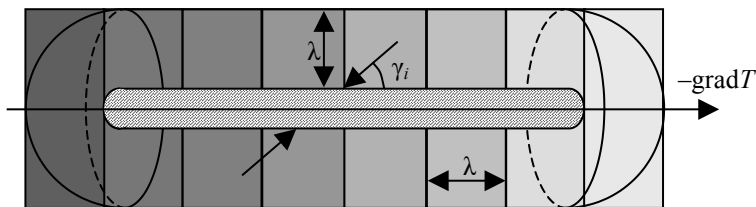


Рис. 1. λ -слой, окружающий закрытую нанотрубку, заключенную в шести температурных λ -слоях

Ориентируем нанотрубку по градиенту температуры и определим её скорость под действием силы термофореза. Кинетическая энергия поступательного движения распределена по трем степеням свободы, поэтому

$$\frac{3}{2} kT = \frac{mv^2(T)}{2}. \quad (1)$$

Из последнего соотношения, предполагая, что все молекулы одного сорта, найдем

$$v(T) = \sqrt{\frac{3kT}{m}}. \quad (2)$$

Пусть вектор $\text{grad } T$ направлен против оси Oz . Возьмем производную по z -координате от обеих частей (2), получим

$$\frac{dv}{dz} = \frac{dv}{dT} \frac{dT}{dz} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3k}{mT}} \frac{dT}{dz}. \quad (3)$$

Естественно принять, что в окрестности нанотрубки характер изменения температуры является линейным:

$$-\frac{dT}{dz} = q = \text{const}. \quad (4)$$

Левую часть (3) заменим разностями, отвечающими изменению скорости при переходе от одного изотермического слоя к другому. Таким образом, вместо (3) приближенно можем записать

$$\Delta v = \frac{\lambda}{2} \sqrt{\frac{3k}{mT}} q. \quad (5)$$

При определении воздействия молекул на частицу применим схему скомпенсированных воздействий [6]. Для этого всю совокупность молекул, находящихся в λ -слое, разбиваем на контрперемещающиеся пары. Это позволит существенно упростить расчеты процессов обмена импульсом между частицей и молекулами. Однако при этом, как будет видно из дальнейшего, среднестатистический результат останется неизменно верным.

Заметим, что в настоящей модели распределение по скорости в максвелловском понимании отсутствует. В своей основе представленная здесь модель является монокинетической (моноскоростной).

Поскольку на длине, меньшей λ , столкновения молекул отсутствуют, то будем полагать, что каждый из выделенных слоев имеет одинаковую температуру и одинаковую скорость теплового движения $v(T)$.

Мы ограничили число молекул окружения их количеством в λ -слое. Однако для простейшего расчета скорости термофореза этого не достаточно. Из массы взаимодействующих с частицей молекул выделим элементарный фрагмент взаимодействия, состоящий из частицы и контрперемещающейся пары. Таким образом, все реальные двойные столкновения мы заменяем модельными тройными, не вызывающими броуновских движений. Если при этом предположить, что реализуется зеркальное отражение молекул, то окончательный результат будет простой суммой актов взаимодействия контрпар с частицей.

Баланс проекции количества движения на ось Oz

На рис. 2, в верхней его части, показаны проекции на ось Oz скоростей молекул контрпары до момента встречи с частицей. В нижней части рисунка проекции скоростей после фронтального упругого и регулярного отражения от частицы.

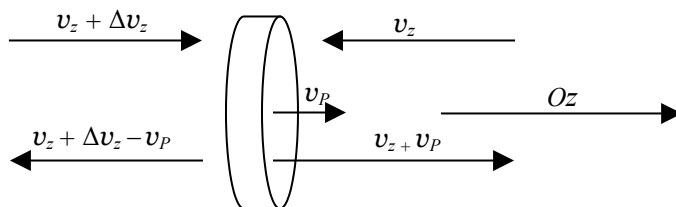


Рис. 2. Контактное упругое взаимодействие контрпары с перемещающейся частицей

Баланс проекции количества движения на ось Oz , рассматриваемый в лабораторной системе отсчета, для случая регулярного отражения будет следующим:

$$mv_z + m\Delta v_z - mv_z + Mv_P = Mv'_P + m(v_z + v_P) - m(v_z + \Delta v_z - v_P). \quad (6)$$

Откуда для i -й контрпары получим

$$M\Delta v_{Pi} = M(v'_{Pi} - v_{Pi}) = 2m\Delta v_{zi} - 2mv_{Pi}. \quad (7)$$

Здесь m , M – масса молекулы и частицы, v_{Pi} , v'_{Pi} – скорость частицы до и после удара i -й контрпары,

$$\Delta v_{zi} = \Delta v \cos \gamma_i. \quad (8)$$

Проводя суммирование в (8) по всем контрпарам, получим

$$M(v'_P - v_P) = nm\Delta v \sigma - nmv_P, \quad (9)$$

Здесь n – число ударившихся о частицу молекул, v_P – средняя скорость термофореза нанотрубки до ударов контрпар, находящихся в λ -слое, $v'_P = \sum_{i=1}^{n/2} v'_{Pi} / (n/2)$ – средняя скорость термофореза нанотрубки после ударов контрпар, которая в равновесном случае совпадает в v_P .

Отсюда с учетом того, что левая часть (9) равна нулю, получим

$$v_p = \sigma \Delta v. \quad (10)$$

Эта скорость и будет скоростью термофореза частиц.

В соотношении (10) σ определятся выражением

$$\sigma = \frac{\sum_{i=1}^{n/2} \cos \gamma_i}{n/2}. \quad (11)$$

В практических расчетах мы используем следующую формулу для σ :

$$\sigma = \frac{\sum_{i=1}^n |\cos \gamma_i|}{n}. \quad (12)$$

Таким образом, σ есть среднеарифметическое значение модулей косинусов углов наклона контрпар. Подставляя в (10) Δv из (5), окончательно получим

$$v_p = \frac{\lambda \sigma}{2} \sqrt{\frac{3k}{mT}} q. \quad (13)$$

Статистика вычислений

Введенный в рассмотрение λ -слой заключен между эффективной поверхностью нанотрубки и отстоящей от нее на λ эквидистантной поверхностью. Около внешней поверхности λ -слоя описываем параллелепипед. С помощью датчика случайных чисел, который используем три раза для каждой из молекул для задания ее пространственных координат, заселяем этот параллелепипед молекулами окружающего частицу газа. Вокруг каждой молекулы строим единичный куб и помещаем в него случайным образом пробную частицу, то есть используем датчик случайных чисел еще три раза. Соединяем эту частицу с молекулой, получившаяся прямая определяет направление движения молекул в пространстве. После этого определяем N – количество молекул, изначально находящихся в λ -слое (рис. 1). На промежутке времени $\tau = \lambda/v$ находим n – число столкновений молекул с частицей. Тогда доля столкнувшихся с частицей молекул определяется соотношением $\delta = n/N$. Эта величина входит в формулы, определяющие сопротивление частиц.

Величина σ , определяющая термофорез, находится как среднее арифметическое значение модулей косинусов углов наклонов траекторий молекул к направлению градиента температуры. Вычислением δ и σ заканчивается одно испытание. Таких испытаний делается 150, после чего значения δ и σ усредняются.

Ориентация перемещающихся нанотрубок

Движение углеродных нанотрубок в газе регламентируется принципом наименьшего действия или наименьшего принуждения, что в равновесном случае одно и то же. Оба эти принципа фиксируют тот факт, что в градиентной среде молекул нанотрубка фиксируется по направлению $\text{grad}T$, то есть испытывает при этом наименьшее сопротивление.

Скорость термофореза

Скорость частицы, найденная из (13), и будет скоростью термофореза. Как видим, она не зависит от числа ударов молекул (при этом их должно быть достаточно, чтобы обеспечить статистику в отношении определения σ) и слабо зависит от их массы. В диапазоне по числам Кнудсена $\text{Kn} = \lambda/r_p \in [10, 100]$, что соответствует собственно наночастицам, скорость термофореза не зависит и от размеров частицы, и определяется лишь атомностью газа, величиной градиента температуры и значением геометрического параметра σ (см. (11)).

Ю.В. Вальциферов, С.М. Мурадян [2] приводят следующую формулу для скорости частиц, обусловленной термофорезом:

$$v_p = f \frac{v}{T} q, \quad (14)$$

где f – безразмерный коэффициент, зависящий от числа Кнудсена и изменяющийся в диапазоне 0,05–1,56, v – коэффициент кинематической вязкости газа.

Сопоставляя (13) и (14), находим

$$f = \frac{\lambda \sigma}{2v} \sqrt{\frac{3kT}{m}}. \quad (15)$$

Сила термофореза

Сила термофореза может быть определена на основе третьего закона Ньютона. Другими словами, в условиях динамического равновесия

$$F_{\text{тф}} = \zeta v_p, \quad (16)$$

где v_p находится по (14), а коэффициент сопротивления ζ определен в [6, 7]:

$$\zeta = \frac{2}{3} \pi L \lambda v m N_L \frac{(\text{Kn} + 2)}{\text{Kn}(\text{Kn} + 5)}, \quad (17)$$

$$\text{Kn} \in [10, 100].$$

Здесь v – скорость теплового движения молекул, λ – длина свободного пробега молекул, Kn – число Кнудсена, N_L – число Лошмидта, отвечающее нормальным условиям, m – масса молекулы.

Результаты расчетов

Радиус нанотрубки можно оценить по числу Кнудсена: $\text{Kn} = \lambda/r_p$. Длины нанотрубок, для которых проведены расчеты, представленные на рис. 3: $L = 0,5\lambda$ (мелкий пунктир), $L = \lambda$ (пунктир), $L = 2\lambda$ (штрих-пунктир), $L = 6\lambda$ (сплошная линия).

Таким образом, при $L > 0,5 \lambda$ нам не удалось выявить влияния ни длины углеродных нанотрубок, ни их диаметра на σ , а значит, и на скорость термофореза. Оказалось, что в расчетном диапазоне изменения параметров $\sigma = 0,455$, что соответствует значению безразмерной скорости термофореза углеродных нанотрубок $f = 0,48$.

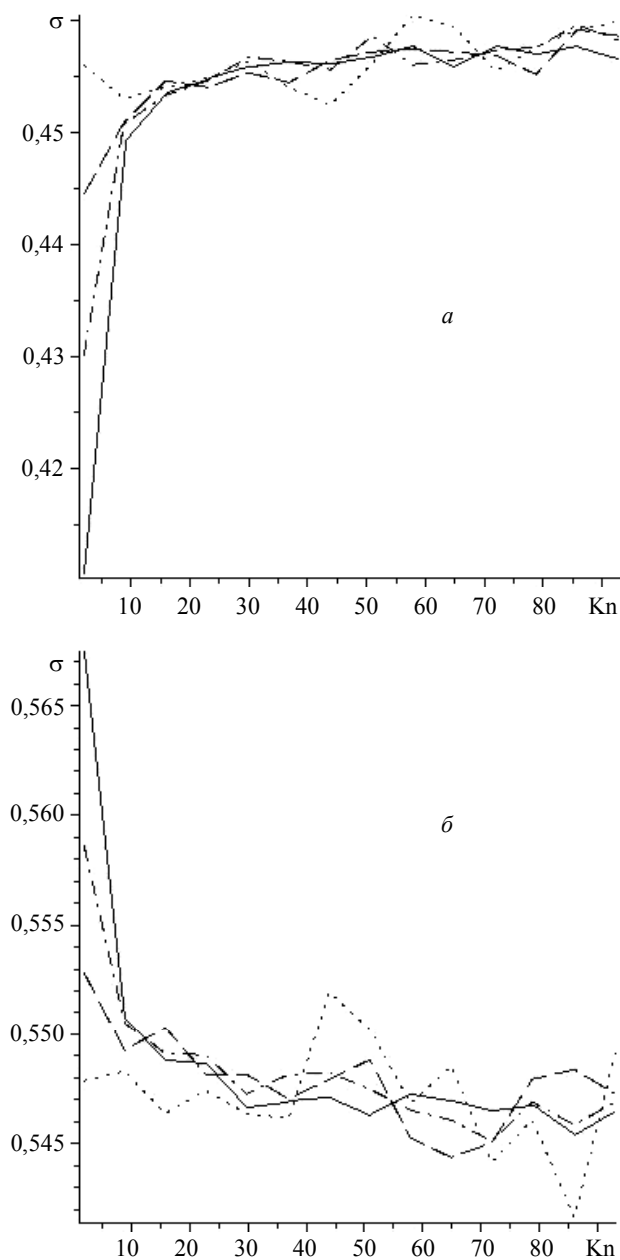


Рис. 3. Распределения геометрического параметра σ для нанотрубок, ориентированных по полю градиента температуры (а) и перпендикулярно этому полю (б)

Заключение

В работе показано, что скорость термофореза углеродных нанотрубок не зависит от их размеров ($10 < Kn < 100$), а зависит лишь от количества атомов в молекулах газового окружения и от градиента температуры в нем. При этом сила термофоретического воздействия на частицу зависит от всех упомянутых параметров. Расчетами установлено, что для углеродных нанотрубок, ориентированных по полю градиента температуры, безразмерный коэффициент в линейной зависимости скорости термофореза от градиента температуры $f = 0,48$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Горбис З.Р. Физическая модель и математическое описание процесса движения мелких частиц в турбулентном потоке газозвеси / З.Р. Горбис, Ф.Е. Спокойный // Теплофизика высоких температур. 1977. Т. 15. № 2. С. 399–408.
2. Вальциферов Ю.В. Численный расчет процессов тепломассопереноса при течении газа с частицами в прямолинейном цилиндрическом канале / Ю.В. Вальциферов, С.М. Мурадян // Теплофизика высоких температур. 1984. Т. 22. № 6. С. 1152–1157.
3. Баканов С.П. Термофорез в газах при малых числах Кнудсена / С.П. Баканов // УФН. 1992. Т. 162. № 9. С. 133–152.
4. Редчиц В.П. Термофорез несферической частицы в гидродинамическом режиме / В.П. Редчиц, Ю.И. Яламов // Вестник Московского государственного областного университета. Сер. Физика – математика. 2008. № 1. С. 3–8.
5. Баканов С.П. О термофорезе в газах / С.П. Баканов // Прикладная математика и механика. 2005. Т. 69. № 5. С. 855–860.
6. Потекаев А.И. Новые физические представления и метод описания и расчета сопротивления движению малых частиц в газообразной среде / А.И. Потекаев, А.М. Бубенчиков, М.А. Бубенчиков // Изв. вузов. Физика. 2012. № 12. С. 54–61.
7. Бубенчиков М.А. Три фундаментальные задачи молекулярной статистики / М.А. Бубенчиков, А.И. Потекаев, А.М. Бубенчиков // Изв. вузов. Физика. 2013. № 3. С. 94–100.

Статья поступила 26.06.2014 г.

Bubenchikov M.A., Potekayev A.I., Bubenchikov A.M., Klykov I.I., Korobitsyn V. A., Maslov A.S., Ovcharenko V.V. MOTION OF CARBON NANOTUBES IN THE TEMPERATURE GRADIENT FIELD

The motion of carbon nanotubes in the process of thermophoresis is calculated using the model of an ideal gas with the monokinetic approximation of R. Clausius. The proposed scheme of a simple calculation of thermophoresis is based on the theorem of the momentum change for the nanoparticle–molecule system in the λ -layer. The calculation involves the partition into eight temperature layers the size of which is equal to the free path length, and the nanotube is placed in six layers. In the vicinity of a nanotube, the temperature variation is assumed to be linear. In determining the effects of molecules on the tube, the scheme of compensated impacts is applied. This substantially simplifies calculating the process of the momentum exchange between particles and molecules. Thus, all real double collisions were modeled by triple ones causing no Brownian motions. Under the assumption of the specular reflection of molecules, the final result is a mere sum of interactions between counter-moving pairs and nanotube. It is shown that the speed of thermophoresis of carbon nanotubes does not depend on their sizes within the values of the Knudsen number ($10 < Kn < 100$) and depends only on the number of atoms in molecules of the gas environment and on the temperature gradient in it.

Keywords: carbon nanotubes, ideal gas, quasi-uniform velocity distribution, scheme of compensated impacts, statistically average angle of the counter-moving pair, rate and force of thermophoresis.

BUBENCHIKOV Aleksey Mikhaylovich (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: alexy121@mail.ru

BUBENCHIKOV Mikhail Alekseevich
(Gazprom Transgaz Tomsk Ltd., Tomsk, Russian Federation)
E-mail: m.bubenchikov@gtt.gazprom.ru

POTEKAEV Aleksandr Ivanovich (Siberian Physical-Technical Institute, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: kanc@spti.tsu.ru

KLYKOV Ivan Ivanovich (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: ykar@hotmail.ru

MASLOV Aleksey Stanislavovich
(Gazprom Transgaz Tomsk Ltd., Tomsk, Russian Federation)
E-mail: a.maslov@gtt.gazprom.ru

OVCHARENKO Vladimir Vladimirovich
(Gazprom Transgaz Tomsk Ltd., Tomsk, Russian Federation)
E-mail: v.ovcharenko@gtt.gazprom.ru

REFERENCES

1. Gorbis Z.R., Spokoynyy F.E., Fizicheskaya model' i matematicheskoe opisanie protsessa dvizheniya melkikh chastits v turbulentnom potoke gazovzvesi (1977) *Teplofizika vysokikh temperatur*, v. 15, no. 2, pp. 399–408. (in Russian)
2. Val'tsiferov Yu.V., Muradyan S.M. Chislenny raschet protsessov teplomassoperenosa pri techenii gaza s chastitsami v pryamolineynom tsilindricheskom kanale (1984) *Teplofizika vysokikh temperatur*, v. 22, no. 6, pp. 1152–1157. (in Russian)
3. Bakanov S.P. Termoforez v gazakh pri malykh chislakh Knudsen (1992) *Uspekhi fizicheskikh nauk*, v. 162, no. 9, p. 133–152. (in Russian)
4. Redchits V.P., Yalamov Yu.I. Termoforez nesfericheskoy chastitsy v gidrodinamicheskom rezhime (2008) *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Ser. Fizika – matematika*, no. 1, pp. 3–8. (in Russian)
5. Bakanov S.P. O termofereze v gazakh (2005) *Prikladnaya matematika i mekhanika*, v. 69, no. 5, pp. 855–860. (in Russian)
6. Potekaev A.I., Bubenichikov A.M., Bubenichikov M.A. Novye fizicheskie predstavleniya i metod opisaniya i rascheta soprotivleniya dvizheniyu malykh chastits v gazoobraznoy srede (2012) *Izv. vyssh. uchebn. zav. Fizika*, v. 55, no. 12, pp. 54–61. (in Russian)
7. Bubenichikov M.A., Potekaev A.I., Bubenichikov A.M. Tri fundamental'nye zadachi molekulyarnoy statistiki (2013) *Izv. vyssh. uchebn. zav. Fizika*, v. 56, no. 3, p. 94–100. (in Russian)