

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-04-11U

І.М. Мриглод, І.П. Омелян

Особливості руху субмікронних частинок у повітряному
середовищі

ЛЬВІВ

УДК: 621.039

PACS: 83.10.Pp; 47.11.+j; 02.60.Cb

Особливості руху субмікронних частинок у повітряному середовищі

І.М. Мриглод, І.П. Омелян

Анотація. Розглядається мезоскопічний підхід до вивчення особливостей руху субмікронного пилу у повітряному середовищі. Розроблено алгоритми для чисельного розв'язання отриманих рівнянь руху у комп'ютерному експерименті. В контексті наявності радіоактивних частинок субмікронного розміру в об'єкті "Укриття" (ОУ), проведені чисельні розрахунки та оцінки радіоекологічних ризиків. Показано зокрема, що основним механізмом переносу пилових частинок слід вважати потоко-електрогравітаційний, причому роль гравітаційної компоненти зменшуються зі зменшенням розміру частинок. Особливу небезпеку становлять субмікронні частинки радіуса $R < \sim 100$ нм, які можуть вийти за межі ОУ і мігрувати на великі відстані порядку 1000 км і більше.

Specificity of motion of submicron particles in air environment

I.M. Mryglod, I.P. Omelyan

Abstract. A mesoscopic approach for the study of specific features of motion of submicron dust particles in an air environment is considered. An algorithm for numerical solution of the obtained equations of motion in computer experiment is developed. In the context of the presence of radioactive particles of a submicron size in the object "Shelter" (OS), the numerical calculations and estimations of the radioecological risks are performed. It is shown that the flow-electrogravitational mechanism appears to be dominant in transport of dust particles, and the role of the gravitational component decreases with decreasing the sizes of the particles. A special danger presents submicron particles with radius of $R < \sim 100$ nm, which can go out of the OS and migrate on large distances of order 1000 km and more.

1. Вступ

Радіоактивний пил (РП) є однією з складових частин паливовмісних матеріалів (ПВМ), які знаходяться в об'єкті "Укриття" (ОУ). РП спостерігається практично в кожному приміщенні ОУ і по попереднім оцінкам його загальна вага на даний час складає приблизно 30 тонн [1–2]. По своєму походженню РП можна розділити на дві категорії: пил, який утворився в процесі аварії на 4-му енергоблоці ЧАЕС і пил, що постійно генерується поверхнею ПВМ. Згідно експериментальним даним [3,4], швидкість генерації пилових частинок приблизно однакова для всіх видів лавиноподібних ПВМ (ЛПВМ) і складає 5 – 15 Бк/см²доб для α -активності та 300 – 900 Бк/см²доб для β -активних випромінювачів. Для опроміненого ядерного палива (ОЯП) відповідні показники рівні 40 и 2400 Бк/см²доб. При перерахунку на весь ОУ отримуємо, що щорічно в пил перетворюється декілька десятків кілограмів ядерного палива. Проте немає жодної гарантії, що швидкість цього процесу не буде зростати з часом у зв'язку з загальною деградацією поверхні ЛПВМ.

Зараз добре відомо, що явище спонтанного пилоутворення тісно пов'язане з радіаційними ушкодженнями, які утворюються в поверхневому шарі ПВМ (як у виді ЛПВМ так і ОЯП). Деякі міркування про фізичні механізми пилоутворення викладені в роботах [4,5]. Проте до теперішнього часу залишається незрозумілим чи є відокремлення пилових частинок від поверхні ТСМ результатом електростатичних взаємодій (модель так званого "кулонівського вибуху", див. наприклад [6]), або ж це відбувається згідно механізмів електронного розшлювання. Одним з механізмів дефектоутворення всередині ЛПВМ і їх подальшої деградації може бути формування латентних треків високоенергетичними частинками продуктів розпаду [7]. Окрім цього, відкрито розташовані фрагменти палива можуть пошкоджуватися внаслідок його окислення [8,9].

Як слідує з попередніх досліджень [5], спонтанна емісія пилових часток з поверхні ЛПВМ і ОЯП має суттєво субмікронний характер. Таким чином, розміри частинок можуть змінюватися в широких межах: від сотень мікрон (в основному це частинки, які утворилися внаслідок макроскопічних механічних пошкоджень) до долей мікрона (майже до декількох десятків нанометрів для частинок, які утворилися у результаті спонтанної емісії). Очевидно, що частинки більших розмірів залишаються в основному всередині приміщень ОУ через швидке осідання під дією сили тяжіння. Легші частинки виявляються врівноважені у повітрі і сильно чутливі до повітряних

потоків та інших зовнішніх сил, наприклад електромагнітних полів. Такі частинки представляють основну радіаційну небезпеку, оскільки вони постійно виносяться вентиляційними потоками за межі ОУ і можуть мігрувати у подальшому на великі відстані (сотні кілометрів) під дією атмосферних потоків [10,11]. Надійні теоретичні оцінки швидкості цього процесу є відсутні, особливо для частинок субмікронного розміру. Крім цього, зовнішній викид РП можливий при гіпотетичному обвалі будівельних конструкцій ОУ.

Побудова фізичних моделей для вивчення особливостей руху субмікронного пилу у повітряному середовищі має отже першочергову важливість. Знання динаміки поведінки радіоактивних пилових частинок дозволить зробити обґрунтовані оцінки радіоекологічних ризиків, пов'язаних з ОУ, як для біжучого його стану, так і на зримо майбутнє. У цій роботі пропонується мезоскопічний підхід до опису руху пилових частинок. Отримані узагальнені рівняння динаміки, які враховують наявність усіх можливих сил діючих на частинки. Розроблений алгоритм для розв'язку цих рівнянь у комп'ютерному експерименті. У часткових випадках знайдені аналітичні розв'язки. Розглянені основні механізми переносу частинок і проведені чисельні розрахунки та оцінки.

2. Рівняння руху пилових частинок у повітряному середовищі

Серед існуючих підходів [12,13] для опису руху частинок при наявності (зовнішніх і внутрішніх) взаємодій варто зазначити метод молекулярної динаміки (МД) і мезоскопічний ланжевенівський підхід (ЛП). Метод МД може бути застосований в принципі до довільних систем. Однак на практиці цей мікроскопічний підхід виявляється ефективним тільки для відносно простих об'єктів, де відомі явні вирази для міжчастинкових потенціалів взаємодії. Більше того, МД рівняння можуть бути розв'язані тільки чисельно на мікроскопічних масштабах часу спостереження над системою і вимагає залучення потужних сучасних комп'ютерів. З точки зору досліджуваної проблеми найбільш доцільним виглядає застосування ЛП, де аналогічно до МД необхідно розв'язувати рівняння руху частинок з врахуванням всіх сил діючих в системі. Проте, на відміну від МД, найбільш швидкозмінні сили в ЛП не враховуються детально, а усереднюються на масштабах часу характерних для динамічних явищ, які представляють інтерес. Ми спочатку запишемо ЛП рівняння для частинок пилу в середовищі у найбільш загальній формі з врахуванням всіх

можливих сил, а потім проаналізуємо вклад кожної сили окремо, щоб зробити висновки про її важливість при кожному конкретному розмірі частинок.

Розглянемо пил як набір N взаємодіючих частинок $i = 1, 2, \dots, N$ приблизно сферичної форми об'єму $V_i = \frac{4}{3}\pi R_i^3$ з радіусом R_i і маси $m_i = \rho V_i$, де ρ позначає густину матеріалу (ПВМ у нашому випадку). Помістимо таку систему в повітряне середовище при наявності зовнішніх змінних з часом і просторі електричних та магнітних полів з напруженостями $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}, t)$ і $\mathbf{H}_0(\mathbf{r}, t)$ відповідно. Будемо вважати також, що кожна частинка володіє зарядом $q_i = Z_i e$ і має електричний \mathbf{p}_i та магнітний $\boldsymbol{\mu}_i$ дипольні моменти. Ці моменти будуть складатися, взагалі кажучи, з двох частин

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_i &= \mathbf{p}_i(t) + \mathbf{p}_E(\mathbf{r}_i, t), \\ \boldsymbol{\mu}_i &= \boldsymbol{\mu}_i(t) + \boldsymbol{\mu}_H(\mathbf{r}_i, t).\end{aligned}\quad (1)$$

Перша частина зумовлена існуванням власних (вбудованих) моментів, які присутні і за відсутності зовнішніх полів. Такі моменти можуть утворюватися внаслідок спонтанної поляризації або намагніченості пилінки (якщо, наприклад, її вихідний матеріал володіє властивостями сегнетоелектрика або феромагнетика). Вбудовані моменти вважаються жорстко зв'язаними з частинками як єдине ціле і отже модулі векторів $\mathbf{p}_i(t)$ і $\boldsymbol{\mu}_i(t)$ будуть залишатися постійними, якщо виключити деформацію геометрії пилінки (твердого тіла). Напрямок цих векторів звичайно змінюється з часом за рахунок обертового руху частинок. Друга частина утворюється у результаті електромагнітної поляризації матеріалу частинок під дією поля, що призводить до появи індукованих моментів.

Нехтуючи ефектами запізнення (динамічної поляризації) величини індукованих моментів можна представити у виді

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_E(\mathbf{r}_i, t) &= \epsilon V_i \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t), \\ \boldsymbol{\mu}_H(\mathbf{r}_i, t) &= \chi V_i \mathbf{H}(\mathbf{r}_i, t),\end{aligned}\quad (2)$$

де ϵ і χ – множники пов'язані з статичними діелектричною та магнітною сприйнятливостями матеріалу частинки відносно середовища (повітря). Наприклад, для сферичних частинок, величина ϵ зв'язана з діелектричною проникністю ϵ співвідношенням $\epsilon = \frac{3}{\epsilon+2} \frac{\epsilon-1}{4\pi}$ (тут діелектрична проникність повітря вважається рівною одиниці). Магнітна сприйнятливості може мати як діамагнітну ($\chi \sim -10^{-5}$) так і парамагнітну ($\chi \sim 10^{-3} \div 10^{-2}$) природу. У випадку ЛПВМ магнітна сприйнятливості складає 3.5×10^{-3} , 3.8×10^{-3} , і 7.0×10^{-3} для

поліхромної, чорної і коричневої керамік, відповідно [14]. Діелектрична проникність ЛПВМ [15] лежить у межах $\epsilon \approx 4 - 16$. Зауважимо, що впливом динамічної поляризації можна знехтувати оскільки на практиці резонансна частота атомних струмів на декілька порядків вища частоти зміни зовнішніх полів так і частоти обертового руху та швидкості зміни трансляційного положення частинок (які відповідають за частоту внутрішніх полів). Нагадаємо також, що навіть частинки з субмікронного діапазону складаються з великого числа ($10^6 - 10^{12}$) атомів, що дозволяє використовувати дані про сприйнятливості, які були отримані в експерименті [14–15] для матеріалів макроскопічних розмірів.

Сумарна напруженість електромагнітного поля в рівнянні (2) рівна зовнішньому плюс внутрішньому полям діючих на частинки в системі, тобто

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) &= \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_i, t) + \mathbf{e}(\mathbf{r}_i, t), \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}_i, t) &= \mathbf{H}_0(\mathbf{r}_i, t) + \mathbf{h}(\mathbf{r}_i, t),\end{aligned}\quad (3)$$

де вектор \mathbf{r}_i описує трансляційне положення частинки i . Внутрішнє поле зумовлене електромагнітною взаємодією частинок між собою і може бути визначене з відомих виразів для кулонівського $\varphi_{ij}^{\text{coul}}$ і класичного диполь-дипольного φ_{ij}^{d} потенціалів

$$\varphi^{\text{coul}}(q_i, q_j) = \frac{q_i q_j}{r_{ij}}, \quad \varphi^{\text{d}}(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j) = \frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{p}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \quad (4)$$

використовуючи співвідношення

$$\begin{aligned}\mathbf{e}(\mathbf{r}_i, t) &= - \sum_{j(j \neq i)}^N \left(\frac{\partial^2 \varphi^{\text{coul}}(q_i, q_j)}{\partial q_i \partial \mathbf{r}_i} + \frac{\partial \varphi^{\text{d}}(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j)}{\partial \mathbf{p}_i} \right) = \\ &= \sum_{j(j \neq i)}^N \frac{q_j \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^3} - \sum_{j(j \neq i)}^N \left(\frac{\mathbf{p}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3\mathbf{r}_{ij}(\mathbf{p}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right),\end{aligned}\quad (5)$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{r}_i, t) = - \sum_{j(j \neq i)}^N \frac{\partial \varphi^{\text{d}}(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\mu}_j)}{\boldsymbol{\mu}_i} = - \sum_{j(j \neq i)}^N \left(\frac{\boldsymbol{\mu}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3\mathbf{r}_{ij}(\boldsymbol{\mu}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right),$$

де $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ і $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$ – відстань між частинками i і j .

Тоді, з врахуванням рівнянь (1) і (2), повну силу електромагнітних взаємодій, яка діє на частинку i можна записати в виді

$$\mathbf{F}_i(t) = q_i \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \mathbf{p}_i \mathbf{grad} \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \boldsymbol{\mu}_i \mathbf{grad} \mathbf{H}(\mathbf{r}_i, t) = q_i \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \left(\mathbf{p}_i(t) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \boldsymbol{\mu}_i(t) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}_i, t) \right) + \frac{V_i}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \left(\epsilon E^2(\mathbf{r}_i, t) + \chi H^2(\mathbf{r}_i, t) \right), \quad (6)$$

де другий доданок представляє так-званий пондеромоторний вклад, а сила Лоренца $q_i \frac{\mathbf{v}_i}{c} \times \mathbf{H}(\mathbf{r}_i, t)$ була повністю виключена через очевидну малість швидкості \mathbf{v}_i розглядуваних частинок відносно швидкості світла ($v_i \ll c$). Моменти електромагнітних сил діючих на частинки (і зумовлюють їх обертання) будуть визначатися тільки першими складовими векторів \mathbf{p}_i і $\boldsymbol{\mu}_i$, тобто

$$\mathbf{L}_i = \mathbf{p}_i \times \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \boldsymbol{\mu}_i \times \mathbf{H}_i \equiv \mathbf{p}_i(t) \times \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \boldsymbol{\mu}_i(t) \times \mathbf{H}_i(\mathbf{r}_i, t), \quad (7)$$

оскільки другі складові є паралельні до напрямку полів $\mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t)$ і $\mathbf{H}(\mathbf{r}_i, t)$ (див. рівняння (2)) і отже не дають вкладу в значення \mathbf{L}_i .

Далі, необхідно враховувати що частинки перебувають у гравітаційному полі Землі і на них діє сила тяжіння $\mu_i \mathbf{g} = \rho V_i \mathbf{g}$, де \mathbf{g} – вектор прискорення вільного падіння. Виштовхувальною силою Архімеда $-\rho V_i \mathbf{g}$ можна знехтувати оскільки у нашому випадку густина ПВМ набагато більша ($\rho \gg \rho$) густини оточуючого середовища (повітря). Дійсно, густина ПВМ змінюється в межах від [16] $\rho \sim 2.5$ г/см³ для ЛПВМ до $\rho \sim 10$ г/см³ для UO₂, тоді як густина повітря при нормальних умовах складає всього $\rho = 1.3 \cdot 10^{-3}$ г/см³. Крім цього, оскільки частинки не можуть проникати одна в одну, то на близьких відстанях вони повинні відштовхуватися. Відштовхування можна змоделювати потенціалом м'якого кору і зобразити, наприклад, у виді зміщеного потенціалу Леннарда-Джонса:

$$\varphi_{ij}^c = \begin{cases} 4\xi \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \xi, & r_{ij} < 2^{1/6} \sigma_{ij} \\ 0, & r_{ij} \geq 2^{1/6} \sigma_{ij} \end{cases}, \quad (8)$$

де $\sigma_{ij} = (R_i + R_j)$, а ξ визначає жорсткість кору. Таким чином, загальний вклад сил тяжіння і міжчастинкового відштовхування є таким

$$\mathbf{f}_i = - \sum_{j(j \neq i)}^N \frac{\partial \varphi_{ij}^c}{\partial \mathbf{r}_i} + \rho V_i \mathbf{g} = \mathbf{f}_i^c + \rho V_i \mathbf{g}. \quad (9)$$

Перейдемо тепер до розгляду процесів взаємодії частинок з повітряним середовищем. Тут в першу чергу слід відмітити, що розмір і маса молекул повітря на декілька порядків менша за розміри і масу пилових частинок. Навіть якщо радіус останніх дуже малий і рівний

порядку десяти нанометрів ($R \sim 10^{-8}$ м), вони тим не менше складаються з великого числа атомів ПВМ і значно перевершують розміри молекул повітря ($\sim 5 \cdot 10^{-10}$ м). Отже середовище можна трактувати як неперервний континуум. В рамках ЛП, дія цього континууму на виділену частинку описується дисипативними силами тертя \mathbf{F}_i^s і їх моментами \mathbf{L}_i^s типу Стокса, які залежать від швидкості і форми частинки, а також випадковими силами \mathbf{F}_i^r і моментами \mathbf{L}_i^r , які характеризують рівень безладу в системі і залежать від температури. Задаючи коефіцієнт динамічної в'язкості середовища η і вводячи вектор гідродинамічної швидкості $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ макроскопічного потоку молекул повітря, отримуємо

$$\mathbf{F}_i^s(t) = -6\pi\eta R_i \left(\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{U}(\mathbf{r}_i, t) \right), \quad (10)$$

$$\mathbf{L}_i^s(t) = -6\pi\eta V_i \left(\boldsymbol{\omega}_i(t) - \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{r}_i, t) \right), \quad (11)$$

де \mathbf{v}_i і $\boldsymbol{\omega}_i$ – трансляційна і кутова швидкості i -тої частинки, відповідно. Гідродинамічна швидкість (швидкість вітру) $\mathbf{U}(\mathbf{r}_i, t)$ може залежати від положення \mathbf{r} точки в середовищі і часу t . Форма функції $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ визначається видом потоку мас повітря. Наприклад, для стаціонарних однорідних зсувних потоків вектор завихреності $\boldsymbol{\Omega} = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{U}$ буде постійним у середовищі, тобто $\boldsymbol{\Omega} = \text{const}$. При постійній гідродинамічній швидкості $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \text{const}$ завихреність потоку відсутня, $\boldsymbol{\Omega} = 0$. Для частинок що рухаються разом з середовищем, тобто коли $\mathbf{v}_i(t) = \mathbf{U}(\mathbf{r}_i, t)$ і $\boldsymbol{\omega}_i(t) = \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{r}_i, t)$, сили і моменти сил тертя будуть рівні нулю.

Слід відмітити, що рівняння (10) і (11) були отримані при умові ламінарності потоку і сферичності частинок. Для частинок довільної форми, дисипативні вклади будуть мати подібну структуру, яку проте неможливо представити в аналітичному вигляді. Умова ламінарності вимагає малості чисел Рейнольдса $\text{Re} = v\rho R/\eta \ll 1$. Вона буде виконуватися у нашому випадку за рахунок малості розмірів частинок. Дійсно, враховуючи що динамічна в'язкість повітря рівна $\eta = 1.86 \cdot 10^{-5}$ н · с/м², отримуємо для швидкостей $v < \sim 1$ м/с таку умову $R \ll \eta/(v\rho) \sim 10^{-5}$ м, яка очевидно буде задовільнятися для субмікронного діапазону.

Крім цього, оскільки радіус R частинок може бути співрозмірна з довжиною вільного пробігу молекул повітря, яка рівна при нормальних умовах $\lambda = 7 \cdot 10^{-8}$ м, то необхідно розглядати так звану поправку Каннінгема [17]. Згідно цієї поправки сила Стокса і її моменти повинні модифікуватися при $R < \sim \lambda$, що можна врахувати

ввівши ефективну в'язкість середовища

$$\eta(R) = \frac{\eta}{1 + \frac{\lambda}{R} \left(1.257 + 0.4 \exp(-1.1R/\lambda) \right)} \quad (12)$$

залежну від радіуса частинок R . При $R \gg \lambda$ ефективна в'язкість прямує до звичайної в'язкості середовища, $\lim_{R \rightarrow \infty} \eta(R) = \eta$. Однак при $R \sim \lambda$ функція $\eta(R)$ може суттєво відрізнитися від η . Наприклад, для $R = 3 \cdot 10^{-8}$ м отримуємо що $\eta(R) = 0.22\eta$, тобто $\eta(R)$ зменшується зі зменшенням R . Нижче, для компактності представлення формул, ми будемо писати просто η , виділяючи явно залежність $\eta(R)$ тільки в деяких місцях при проведенні конкретних розрахунків.

Випадкові сили \mathbf{F}_i^r і моменти \mathbf{L}_i^r описують зіткнення пилових частинок з молекулами середовища. Оскільки маса окремих частинок набагато перебільшує масу молекул повітря, то ці зіткнення можна розглядати як хаотичні на масштабах часу протягом яких трансляційні і орієнтаційні положення частинок суттєво зміняться. Амплітуди випадкових сил і їх моментів визначаються з флуктуаційно-дисипативної теореми, згідно з якою отримуємо

$$\mathbf{F}_i^r = \left(12\pi\eta R_i k_B T \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}_i(t), \quad (13)$$

$$\mathbf{L}_i^r = \left(12\pi\eta V_i k_B T \right)^{1/2} \boldsymbol{\zeta}_i(t). \quad (14)$$

Випадкові взаємодії будуть отже тим інтенсивніші чим вища температура T в системі. Вони не залежать від трансляційних та обертових швидкостей частинок і зникають тільки в границі $T \rightarrow 0$. Використовуючи теорему про рівномірний розподіл середніх кінетичних енергій між поступальними і обертovими ступенями вільності, температуру системи у стаціонарному стані можна визначити з таких співвідношень:

$$3k_B T = m_i \langle (\mathbf{v}_i - \mathbf{U})^2 \rangle = J_i \langle (\boldsymbol{\omega}_i - \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle, \quad (15)$$

де k_B – постійна Больцмана, а J_i – моменти інерції частинок. Компоненти $(\xi_{x_i}, \xi_{y_i}, \xi_{z_i})$ та $(\zeta_{x_i}, \zeta_{y_i}, \zeta_{z_i})$ векторів $\boldsymbol{\xi}_i$ та $\boldsymbol{\zeta}_i$ представляють собою випадкові числа, розподілені по закону Гауса. Такі числа повністю некорельовані між собою для різних частинок і для різних моментів часу (так званий білий шум), а також мають нульове середнє значення і одиничну дисперсію, тобто

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\xi}_i(t) \boldsymbol{\zeta}_j(t') \rangle &= 0, \quad \langle \xi_{p_i} \rangle = 0, \quad \langle \zeta_{p_i} \rangle = 0, \quad \langle (\xi_{p_i})^2 \rangle = 1, \quad \langle (\zeta_{p_i})^2 \rangle = 1, \\ \langle \xi_{p_i}(t) \xi_{q_j}(t') \rangle &= \delta_{pq} \delta_{ij} \delta(t - t'), \quad \langle \zeta_{p_i}(t) \zeta_{q_j}(t') \rangle = \delta_{pq} \delta_{ij} \delta(t - t'). \end{aligned} \quad (16)$$

Тоді систему рівнянь поступального і обертovого рухів можна записати в такому виді:

$$\begin{aligned} m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= q_i \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \rho V_i \mathbf{g} - 6\pi\eta R_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{U}(\mathbf{r}_i, t)) + \boldsymbol{\xi}_i(t) \sqrt{12\pi\eta R_i k_B T} + \\ &+ \mathbf{f}_i^c + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \left\{ \mathbf{p}_i(t) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \boldsymbol{\mu}_i(t) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}_i, t) + \frac{V_i}{2} \left(\epsilon E^2(\mathbf{r}_i, t) + \chi H^2(\mathbf{r}_i, t) \right) \right\}, \\ \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \mathbf{v}_i, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} J_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} &= -6\pi\eta V_i (\boldsymbol{\omega}_i - \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{r}_i, t)) + \boldsymbol{\zeta}_i(t) \sqrt{12\pi\eta V_i k_B T} + \\ &+ \mathbf{p}_i(t) \times \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \boldsymbol{\mu}_i(t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}_i, t), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_i(t)}{dt} = \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{p}_i(t), \quad \frac{d\boldsymbol{\mu}_i(t)}{dt} = \boldsymbol{\omega}_i \times \boldsymbol{\mu}_i(t).$$

Згідно рівнянь (1)–(4), електромагнітні поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t)$ і $\mathbf{H}(\mathbf{r}_i, t)$, які входять у рівняння руху (17) і (18) необхідно визначати самоузгоджено використовуючи співвідношення:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_i, t) + \quad (19)$$

$$\begin{aligned} &+ \sum_{j(j \neq i)}^N \left(\frac{q_j \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^3} + \frac{\mathbf{p}_j(t) + \epsilon V_j \mathbf{E}(\mathbf{r}_j, t)}{r_{ij}^3} - \frac{3\mathbf{r}_{ij}([\mathbf{p}_j(t) + \epsilon V_j \mathbf{E}(\mathbf{r}_j, t)] \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right), \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}_i, t) &= \mathbf{H}_0(\mathbf{r}_i, t) + \\ &+ \sum_{j(j \neq i)}^N \left(\frac{\boldsymbol{\mu}_j(t) + \chi V_j \mathbf{H}(\mathbf{r}_j, t)}{r_{ij}^3} - \frac{3\mathbf{r}_{ij}([\boldsymbol{\mu}_j(t) + \chi V_j \mathbf{H}(\mathbf{r}_j, t)] \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right). \end{aligned} \quad (20)$$

Ці співвідношення являють собою дві системи N лінійних рівнянь ($i = 1, 2, \dots, N$) для визначення $\mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t)$ і $\mathbf{H}(\mathbf{r}_i, t)$ при відомих значеннях просторових $\{\mathbf{r}_i(t)\}$ і орієнтаційних $\{\mathbf{p}_i(t), \boldsymbol{\mu}_i(t)\}$ координат всіх частинок.

3. Алгоритм розв'язку рівнянь руху в комп'ютерному експерименті

Отримана система диференціальних рівнянь руху (17) і (18) має доволі складну структуру і не може бути розв'язана аналітично в загальному виді. Навіть у випадку застосування чисельних методів

ми стикаємося з доволі складною проблемою, так як рівняння руху необхідно розв'язувати самоузгоджено з рівняннями (19) і (20) для (квазістатичних) електромагнітних полів. Тому використаємо специфічні особливості нашої конкретної задачі і зробимо ряд додаткових спрощень, нехтуючи тими типами взаємодій, які не можуть вплинути на рух пилових частинок суттєвим чином.

Перш за все відмітимо, що густина (концентрація) $n = N/V$ (тут V позначає досліджуваний об'єм простору) пилових частинок у повітрі є за звичай дуже низькою, тобто $n^* = nV_i \ll 1$. Тоді внутрішнім полем (яке пропорційне густині) можна повністю знехтувати, вважаючи $\mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) \approx \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_i, t)$ і $\mathbf{H}(\mathbf{r}_i, t) \approx \mathbf{H}_0(\mathbf{r}_i, t)$. При більш високих густинах, рівняння (19) и (20) можуть бути розв'язані шляхом ітерацій, покладаючи у нульовому наближенні $\mathbf{H}_i^{(0)}(\mathbf{r}_i, t) = \mathbf{H}_0(\mathbf{r}_i, t)$. Наприклад, обмежуючись першим наближенням, значення для полів отримується заміною \mathbf{E} і \mathbf{H} на \mathbf{E}_0 і \mathbf{H}_0 в правих частинах виразу (19). Тоді будемо мати систему диференціальних рівнянь (17) і (18) в явному виді, оскільки градієнти полів і їх квадрати тепер можна обчислити аналітично беручи похідну $\partial/\partial\mathbf{r}_i$. До таким рівнянь вже застосовні стандартні схеми інтегрування.

Крім цього, при $n^* \ll 1$ вплив зіткнень (відштовхувань) між частинками можна врахувати опосередковано покладаючи формально $\mathbf{f}_i^c = 0$, але модифікуючи при цьому коефіцієнт в'язкості [18]:

$$\bar{\eta} = \eta \left(1 + \frac{5}{2} \varphi \right),$$

де у нашому випадку (див. рівняння (12)) $\eta \equiv \eta(R)$ – коефіцієнт динамічної в'язкості за відсутності взаємодії між пиловими частинками, а $\varphi = \sum_{i=1}^N V_i/V$ – відношення об'єму всіх частинок до об'єму повітря. У випадку монодисперсного пилу, коли радіуси всіх частинок приблизно однакові ($R_i \equiv R$), маємо $\varphi = 4\pi n R^3/3$.

Наступний крок на шляху до спрощень полягає у нехтуванні власним електричними і магнітними дипольними моментами пилових частинок. Нагадаємо, що поява таких моментів можлива тільки коли вихідний матеріал частинки володіє сегнетоелектричними і/або феромагнітними властивостями. Але навіть тоді, утворення власних дипольних моментів стає вкрай сумнівною з погляду малості розмірів розглядуваних частинок. Справа у тому, що доменна структура внутрішніх диполів (спінів), яка приводить до спонтанної поляризації (намагніченості) у зразках макроскопічних розмірів, зникає у випадку частинок розміри яких набагато менші характерних розмірів доменів. Таким чином слід покласти $\mathbf{p}_i(t) = 0$ и $\boldsymbol{\mu}_i(t) = 0$.

При таких умовах рівняння трансляційного руху (17) стає повністю незалежним від рівняння обертового руху (18) і отже може розв'язуватися окремо. Тепер задача спрощується і набирає вигляду:

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \rho V_i \mathbf{g} - 6\pi\eta R_i \left(\mathbf{v}_i - \mathbf{U}(\mathbf{r}_i, t) \right) + \boldsymbol{\xi}_i(t) \sqrt{12\pi\eta R_i k_B T} + \frac{V_i}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \left(\epsilon E^2(\mathbf{r}_i, t) + \chi H^2(\mathbf{r}_i, t) \right), \quad (21)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i.$$

У роботі [19] був запропонований ефективний підхід до інтегрування ЛП рівнянь у комп'ютерному експерименті. Діючи у рамках цього підходу, отримуємо у нашому випадку

$$\mathbf{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) \mathbf{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) + \dot{\mathbf{v}}_i(t) \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (22)$$

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^3),$$

де

$$\dot{\mathbf{v}}_i(t) = \frac{1}{m_i} \left[q_i \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \rho V_i \mathbf{g} - 6\pi\eta R_i \left(\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{U}(\mathbf{r}_i, t) \right) + \sqrt{\frac{12\pi\eta R_i k_B T}{\Delta t}} \bar{\boldsymbol{\xi}}_i(t) + \frac{V_i}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \left(\epsilon E^2(\mathbf{r}_i, t) + \chi H^2(\mathbf{r}_i, t) \right) \right] \quad (23)$$

а Δt – крок по часу. Похибка інтегрування \mathcal{O} пропорційна Δt^3 і при достатньо малих значеннях Δt нею можна знехтувати. Відмітимо, що поява множника $1/\sqrt{\Delta t}$ зумовлена часовою дискретизацією, так що тепер

$$\langle \bar{\boldsymbol{\xi}}_{p_i}(t) \bar{\boldsymbol{\xi}}_{q_j}(t + \Delta t) \rangle = \delta_{pq} \delta_{ij} \delta_{\Delta t, 0}. \quad (24)$$

Врахуємо, що трансляційне прискорення $\dot{\mathbf{v}}_i(t)$ в рівнянні (22) залежить явно від швидкості $\mathbf{v}_i(t)$ взятої в момент часу t . З іншого боку, значення цієї швидкості фігурує у рівнянні (21) при $t - \Delta t/2$ та $t + \Delta t/2$. Необхідний зв'язок між цими величинами можна отримати використовуючи інтерполяційну формулу

$$\mathbf{v}_i(t) = \frac{1}{2} \left[\mathbf{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) + \mathbf{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) \right] + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (25)$$

На основі рівнянь (21), (22) и (24) приходимо до лінійної системи рівнянь відносно $\mathbf{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2})$ і $\mathbf{r}_i(t + \Delta t)$, яку можна розв'язати у квадратурах:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) &= \frac{1}{1 + \frac{6\pi\eta R_i \Delta t}{m_i}} \left[\left(1 - \frac{6\pi\eta R_i \Delta t}{m_i} \right) \mathbf{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) + \left(\frac{q_i}{m_i} \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \right. \right. \\ &+ \mathbf{g} + \frac{6\pi\eta R_i}{m_i} \mathbf{U}(\mathbf{r}_i(t), t) + \frac{V_i}{2m_i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \left[\epsilon E^2(\mathbf{r}_i(t), t) + \chi H^2(\mathbf{r}_i(t), t) \right] \Big) \Delta t + \\ &+ \left. \frac{1}{m_i} \sqrt{12\pi\eta R_i k_B T \Delta t} \bar{\xi}_i(t) \right] + \mathcal{O}(\Delta t^3), \end{aligned} \quad (26)$$

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^3).$$

Розглянемо тепер чи потрібно модифікувати алгоритм (26) враховуючи специфіку нашої задачі, тобто враховуючи що радіус частинок може приймати дуже малі значення. Для цього відмітимо перш за все що цей алгоритм вимагає дотримання по крайній мірі наступної умови на малість часового кроку

$$\Delta t \ll \tau = \frac{m}{6\pi R \eta(R)} = \frac{\frac{4}{3}\pi R^3 \rho}{6\pi R \eta(R)} \equiv \frac{2\rho R^2}{9\eta(R)}, \quad (27)$$

щоб мати право знехтувати похибкою інтегрування $\mathcal{O}(\Delta t^3)$. Тут τ – характерний час зміни швидкості частинок без врахування зовнішніх полів (так що в дійсності Δt повинно бути ще меншим). Далі, необхідно враховувати той факт, що швидкість обчислень на комп'ютері хоча і відносно висока та все ж обмежена. Нехай b – час необхідний для проведення обчислень (26) протягом одного кроку інтегрування. Тоді, повний комп'ютерний час для дослідження частинки на інтервалі часу t буде рівний

$$C = b \frac{t}{\Delta t} \gg b \frac{t}{\tau} \equiv \frac{9bt\eta(R)}{2\rho R^2}$$

і може виявитись недопустимо великим для достатньо малих R (де функція $\eta(R) \sim R$, див. рівняння (12), і отже $C \sim 1/R$).

Для потужних сучасних комп'ютерів швидкість обчислень складає порядку $b \sim 10^{-7}$ с. Тоді, наприклад, для $R \sim 5 \cdot 10^{-8}$ м отримуємо $\tau \sim 5 \cdot 10^{-7}$ с, так що $b/\tau \sim 1/5$ и $C \sim t$. Звідки слідує, що алгоритм (26) застосовний для дослідження руху частинок субмікронного розміру тільки для малих часів спостереження t , скажемо

не більше декількох дб. Він може бути успішно використаний в задачах електромагнітної сепарації субмікронних частинок, але очевидно неприйнятний для прогнозування руху таких частинок протягом довгого інтервалу часу t (декількох років чи десятків років). Така проблема не виникає для частинок більших розмірів $R \sim 10^{-5}$ де ми маємо $\tau \sim 10^{-2}$ с, так що $C \sim 10^{-5} t$ і отже для розрахунку траєкторії скажемо на 10 років наперед ($t \sim 3 \cdot 10^8$ с) необхідно всього $C \sim 3 \cdot 10^3$ с чистого комп'ютерного часу (тобто менше 1 години).

Розв'язати цю проблему малих часів релаксації τ , яка приводить до великих затрат обчислювального часу C можна враховуючи дві обставини. По-перше, характерні часи Δ зміни зовнішніх полів U , E и H на декілька порядків більші за величину $\tau(R)$ яка відповідає частинкам субмікронного розміру і співрозмірна з $\tau(R)$ для великих ($R \sim 10^{-5}$ м) частинок. Наприклад, швидкість повітряного потоку (вітру) очевидно не може змінитися суттєво по величині і напрямку за час порядку $\Delta \sim 10^{-2}$ с (а залежністю E и H від часу можна взагалі знехтувати у нашому випадку). По-друге, найбільш швидкі детерміновані зміни швидкості пов'язані тільки з дисипативними процесами тертя і їх можна проінтегрувати аналітично. Дійсно рівняння руху $d\mathbf{v}/dt = -\mathbf{v}/\tau$, яке враховує тільки дисипативні сили легко інтегрується як $\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}(0) \exp(-t/\tau)$. Використовуючи тепер метод декомпозицій [20,21] операторів еволюції, рівняння (26) модифікується до вигляду

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(\frac{\Delta t}{2}) &= \exp(-\frac{6\pi\eta R_i \Delta t}{m_i}) \left[\exp(-\frac{6\pi\eta R_i \Delta t}{m_i}) \mathbf{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) + \right. \\ &\left. \left(\frac{q_i}{m_i} \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \mathbf{g} + \frac{6\pi\eta R_i}{m_i} \mathbf{U}(\mathbf{r}_i(t), t) + \frac{V_i}{2m_i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \left[\epsilon E^2(\mathbf{r}_i(t), t) + \right. \right. \right. \\ &\left. \left. \left. \chi H^2(\mathbf{r}_i(t), t) \right] \right) \Delta t + \frac{1}{m_i} \sqrt{12\pi\eta R_i k_B T \Delta t} \bar{\xi}_i(t) \right] + \mathcal{O}(\Delta t^3), \end{aligned} \quad (28)$$

$$\mathbf{r}_i(\Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^3),$$

де швидкі релаксаційні процеси враховані точно. У частковому випадку коли $\frac{6\pi\eta R_i \Delta t}{m_i} \ll 1$ рівняння (28) зводиться до (26).

Модифікований алгоритм (28) вже застосовний для розрахунку довгих траєкторій ($t \sim 10^9$ с) субмікронних частинок, оскільки зараз крок інтегрування $\Delta t \ll \Delta$ можна вибрати значно більшим ($\Delta \gg \tau$) і необхідний комп'ютерний час $C = b \frac{t}{\Delta}$ виявляється цілком прийнятним (декілька годин). Таким чином, задаючи конкре-

тні значення для розміру частинок R_i (або об'єму $V_i = \frac{4}{3}\pi R_i^3$), їх маси m_i і зарядів q_i , а також параметри η , ϵ , χ та зовнішні поля $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ і $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$, отримуємо значення координат частинок $\mathbf{r}_i(t)$ в потрібний момент часу t .

4. Аналітичний підхід при розв'язанні рівнянь

Аналітичні розв'язки і оцінки можливі при додаткових спрощуючих обставинах, які в повній мірі застосовні до нашого випадку. До таких обставин слід віднести перш за все нехтування пондеромоторного вкладу $\frac{V_i}{2} \partial/\partial \mathbf{r}_i (\epsilon E^2(\mathbf{r}_i, t) + \chi H^2(\mathbf{r}_i, t))$ в загальне прискорення (див. рівняння (21)). Пондеромоторні сили важливі при наявності сильних просторових неоднорідностей електромагнітного поля, які можуть створюватися тільки в спеціальних установках, наприклад установках по електромагнітній сепарації [22–25]. У випадку ж руху частинок всередині ОУ або в атмосфері, таких неоднорідностей не спостерігається і просторові градієнти полів будуть малі. До того ж пондеромоторний вклад виявляється пропорційний об'єму частинок, тобто пропорційний $\sim R^3$, і такий вклад різко зменшується зі зменшенням R . Будемо вважати також що зовнішні поля $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ і $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ слабо залежать не тільки від просторових координат але й від часу. Тоді рівняння руху (21) прийме наступний вигляд

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q\mathbf{E} + \frac{4}{3}\pi\rho\mathbf{g}R^3 - 6\pi\eta R(\mathbf{v} - \mathbf{U}) + \boldsymbol{\xi}(t)\sqrt{12\pi\eta R k_B T},$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt}, \quad (29)$$

де нумеруючий частинки індекс i був опущений.

Для оцінки величини заряду $q = Ze$ використовуємо результати роботи [26] в якій розглядалися можливі механізми зарядки пилових частинок. Було показано, що заряд частинок може змінюватися від елементарного $Z = 1$ для субмікронного діапазону $R \sim 2.5 \cdot 10^{-8}$ м до величини порядку $Z = 10^3$ для радіусів $R \sim 10^{-6}$ м $\equiv 1$ мкм. Це приблизно відповідає критичним значенням вище яких відбувається розрядка частинок внаслідок електричного пробою повітря [27]. Враховуючи що напруженість електричного поля поблизу сферичної частинки $\sim q/R^2$, отримуємо $Z \approx aR^2$, де $a \sim 10^3$ мкм $^{-2}$. Для напруженості поля візьмемо значення електричного поля Землі, яке складає приблизно $E \approx 150$ в/м. Хоча електростатичне поле всередині ОУ особливо біля поверхні ПВМ може і дещо відрізнятись [28],

будемо вважати що приведені вище значення по порядку величини відповідає істинному значенню.

Порівнюємо тепер між собою вклади від електростатичної взаємодії $F_e = qE \equiv Z(R)eE$, гравітаційної сили тяжіння $F_g = \frac{4}{3}\pi\rho g R^3$ і зіткнення частинок $F_\xi = \sqrt{12\pi R \eta(R) k_B T}$ з молекулами повітря при різних значеннях радіуса R . Враховуючи що $g = 9.81$ м/с 2 і $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К, а також беручи “кімнатну” температуру $T = 300$ К отримуємо при середній густині ПВМ $\rho \sim 5$ г/см 3 результат приведений на Рис. 1. Як видно з рисунка, можна виділити три характерні області значень розміру частинок. Перша область відповідає великим частинкам з радіусами $R > \sim 1$ мкм, де домінування сили тяжіння $F_g \sim R^3$ є очевидним через її показникове кубічне зростання з ростом R . Електростатична сила $F_g \sim R^2$ і особливо амплітуда хаотичної (броунівської) компоненти $F_\xi \sim R^{1/2}$ змінюється зі зміною R набагато повільніше і отже вони будуть давати основний вклад для частинок малих розмірів, а саме в області $R < \sim 5 \cdot 10^{-2}$ мкм. Накінець, існує третя проміжна область середніх по розміру частинок, $5 \cdot 10^{-2}$ мкм $< \sim R < \sim 1$ мкм, яка характеризується необхідністю врахування всіх трьох силових складових. Цікаво зауважити, що при розгляданих параметрах задачі функції $F_e(R)$, $F_g(R)$, і $F_\xi(R)$ перетинаються майже в одній точці при $R \sim 10^{-1}$ мкм, де вони приймають приблизно однакове значення $F \sim 10^{-15}$ н.

4.1. Броунівський механізм переносу частинок

Оскільки для частинок малих розмірів, $R < \sim 5 \cdot 10^{-2}$ мкм, амплітуда броунівської компоненти сили $F_\xi(R)$ виявляється значною навіть у порівнянні з електростатичною складовою $F_e(R)$, логічно розглянути спочатку броунівський механізм переміщення частинок в його чистому вигляді. Нехтуючи електростатичною силою, $F_e(R) \ll F_\xi(R)$, і враховуючи що тут гравітаційна компонента стає зникаюче мала, $F_g(R) \ll F_e(R)$, а також вважаючи що направлений потік повітря відсутній, $\mathbf{U} = 0$, отримуємо виходячи з (29) рівняння

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -6\pi\eta R \frac{d\mathbf{r}}{dt} + \boldsymbol{\xi}(t)\sqrt{12\pi\eta R k_B T}, \quad (30)$$

яке можна розв'язати аналітично. Розв'язок має вигляд

$$\left\langle \frac{d\mathbf{r}^2}{dt} \right\rangle_t = \frac{k_B T}{\pi\eta R} + \left[2\mathbf{r}(0) \cdot \mathbf{v}(0) - \frac{k_B T}{\pi\eta R} \right] \exp(-t/\tau), \quad (31)$$

де $\langle \rangle_t$ позначає середнє значення на проміжку часу t (тобто $\langle f \rangle_t = \frac{1}{t} \int_0^t f(t) dt$ для довільної функції f), а $\mathbf{r}(0)$ и $\mathbf{v}(0)$ – положення і

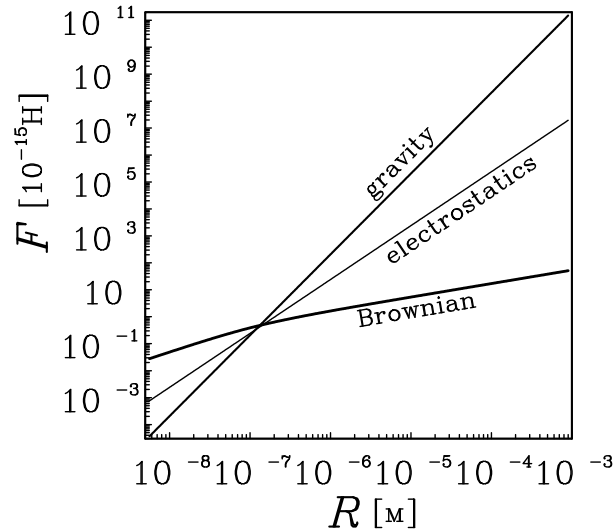


Рис. 1. Гравітаційна, електростатична і броунівська складові сили діючих на пилову частинку в залежності від її радіуса.

швидкість частинки відповідно у початковий момент часу. При виведенні розв'язку (31) було враховано, що $\langle \xi \rangle_t = 0$ і $m \langle \mathbf{v}^2 \rangle_t = 3k_B T$, а також $\langle \mathbf{r} \rangle_t = 0$ і $\langle \mathbf{r} \cdot \xi \rangle_t = 0$. Перші дві рівності безпосередньо слідує з рівнянь (15) і (16), а дві останні – з міркувань симетрії, оскільки виділений напрямок у нашому хаотичному пересуванні є відсутнім ($\mathbf{U} = 0$).

Так як час релаксації τ дуже малий (див. рівняння(27)) і змінюється від порядку 10^{-7} с до 1 с при зміні радіуса R від 10^{-8} м до 10^{-4} м, то на цікавлячих нас часах $t \gg \tau$ другим доданком у правій частині рівняння (31) можна повністю знехтувати. Тоді отримаємо добре відому формулу Смолюховського

$$\left\langle \left(\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0) \right)^2 \right\rangle = \frac{k_B T}{\pi \eta R} t \equiv 6Dt, \quad (32)$$

де D – коефіцієнт дифузії. Броунівський рух має імовірністний (стохастичний) характер, так що ми не можемо сказати точно де буде частинка через деякий інтервал часу t . Однак ми можемо обчислити її середньо-квадратичне зміщення і стверджувати що частинку

можна виявити з великою імовірністю на відстані

$$\delta(t) = \sqrt{\left\langle \left(\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0) \right)^2 \right\rangle} = \sqrt{\frac{k_B T}{\pi \eta R} t} \equiv \sqrt{6Dt} \quad (33)$$

від її початкового положення. Відмітимо, що цей результат не залежить від початкової швидкості частинок $\mathbf{v}(0)$ оскільки через наявність сил тертя і хаотичних зіткнень їх середня швидкість дуже швидко зменшується до нульової вже на часах $t > \sim \tau$, а середньо-квадратична швидкість згідно (15) приймає значення

$$v_{sq} = \sqrt{\langle \mathbf{v}^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}} = \sqrt{\frac{9k_B T}{4\pi \rho R^3}}. \quad (34)$$

Для $T = 300$ К швидкість v_{sq} змінюється від порядку 1 м/с до 10^{-6} м/с при збільшенні радіуса частинок R від 10^{-8} м до 10^{-4} м.

4.2. Потокowo-електрогравітаційний механізм

У протилежній області великих розмірів частинок, $R > \sim 1$ мкм, стохастичною компонентою можна знехтувати, так як $F_\xi(R) \ll F_e(R)$ і $F_\xi(R) \ll F_g(R)$, і розглядати рух при наявності тільки детерміністичних сил гравітаційного $F_g(R)$ і електростатичного $F_e(R)$ походження у присутності зовнішнього потоку повітря \mathbf{U} . Тоді рівняння (29) модифікується до вигляду

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = q\mathbf{E} + \frac{4}{3}\pi \rho \mathbf{g} R^3 - 6\pi \eta R \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} - \mathbf{U} \right). \quad (35)$$

Якщо прийняти додатково що напруженість електричного поля \mathbf{E} і швидкість потоку \mathbf{U} не залежать від часу і (і координат), то (35) інтегрується аналітично даючи параметричне рівняння для траєкторії частинок:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(t) &= \mathbf{r}(0) + \mathbf{U}t + \frac{\tau^2}{m} \left(q\mathbf{E} + \frac{4}{3}\pi \rho \mathbf{g} R^3 \right) \left(\exp(-t/\tau) - 1 + t/\tau \right) + \\ &+ \tau \left(1 - \exp(-t/\tau) \right) \left(\mathbf{v}(0) - \mathbf{U} \right), \quad (36) \\ \mathbf{v}(t) &= \left(\mathbf{v}(0) - \mathbf{U} \right) \exp(-t/\tau) + \mathbf{U} + \frac{\tau}{m} \left(q\mathbf{E} + \frac{4}{3}\pi \rho \mathbf{g} R^3 \right) \left(1 - \exp(-t/\tau) \right). \end{aligned}$$

Так як $t \gg \tau$ ми знову можемо знехтувати експонентами і отримати для стаціонарного руху особливо прості рівняння

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(t) &= \mathbf{r}(0) + \mathbf{V}t, \\ \mathbf{U} &= \frac{\tau}{m} \left(q\mathbf{E} + \frac{4}{3}\pi\rho\mathbf{g}R^3 \right) = \mathbf{U} + \frac{q\mathbf{E} + \frac{4}{3}\pi\rho\mathbf{g}R^3}{6\pi\eta R}, \end{aligned} \quad (37)$$

де \mathbf{V} позначає стаціонарну швидкість. Легко перевірити, що при $d\mathbf{r}/dt = \mathbf{V}$ права частина рівняння (35) зануляється і приводить до нульового прискорення, як і повинно бути для стаціонарних траєкторій. При відсутності електрогравітаційних сил частинки повністю захоплюються потоком повітря і стаціонарна швидкість \mathbf{V} точно рівна швидкості потоку \mathbf{U} .

Ми бачимо, що аналогічно до стохастичного руху, результат на великих часах не залежить від початкової швидкості $\mathbf{v}(0)$ (яка через наявність сил тертя швидко набуває своє стаціонарне значення \mathbf{V}). Однак зараз переміщення частинок $\delta(t) = |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)| \sim t$ пропорційно часу, а не його квадратному кореню $\sim \sqrt{t}$. Більше того, траєкторії не залежать від температури T і визначаються лише зовнішніми полями \mathbf{U} , \mathbf{E} і \mathbf{g} . Рівняння (37) повністю детерміновані і дають конкретне положення частинки у довільний як завгодно віддалений момент часу. Їх можна також застосовувати коли \mathbf{U} і/або \mathbf{E} повільно залежать від t , тобто мало змінюються протягом інтервалу τ . У цьому випадку \mathbf{U} і \mathbf{E} необхідно замінити в (37) середніми значеннями $\langle \mathbf{U} \rangle_t = \frac{1}{t} \int_0^t \mathbf{U}(t) dt$ і $\langle \mathbf{E} \rangle_t = \frac{1}{t} \int_0^t \mathbf{E}(t) dt$, відповідно.

4.3. Потоково-броунівський транспорт частинок при наявності електрогравітаційних сил

Як було вище встановлено, у проміжній області частинок середніх розмірів, $5 \cdot 10^{-2}$ мкм $< \sim R < \sim 1$ мкм, необхідно враховувати одночасно як стохастичні так і детерміністичні компоненти сил. Найбільш простий спосіб отримати розв'язки рівнянь руху (29) в цьому загальному випадку полягає у наступному. Перейдемо в інерційну систему відліку, яка рухається відносно лабораторної системи координат зі швидкістю \mathbf{V} (див. рівняння (37)). Тоді провівши перетворення $\mathbf{v} = \mathbf{v}' + \mathbf{V}$ і $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{V}t$, рівняння (29) в нових змінних перетвориться до вигляду

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}'}{dt^2} = -6\pi\eta R \mathbf{v}' + \boldsymbol{\xi}(t) \sqrt{12\pi\eta R k_B T}, \quad (38)$$

який співпадає по формі з рівнянням (30). Переходячи тепер знову в лабораторну систему отримаємо на основі (31) розв'язок

$$\left\langle \frac{d\mathbf{r}^2}{dt} \right\rangle_t = 2\mathbf{V}^2 t + \frac{k_B T}{\pi\eta R} + \left[2\mathbf{r}(0) \cdot (\mathbf{v}(0) - \mathbf{V}) - \frac{k_B T}{\pi\eta R} \right] \exp(-t/\tau), \quad (39)$$

де було враховано що $\langle \mathbf{r} \rangle_t = \mathbf{V}t$ (оскільки $\langle \mathbf{r}' \rangle_t = 0$). На часах $t \gg \tau$ експонентами можна знехтувати і ми приходимо до такого результату

$$\left\langle \left(\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0) \right)^2 \right\rangle = \left(\mathbf{U} + \frac{q\mathbf{E} + \frac{4}{3}\pi\rho\mathbf{g}R^3}{6\pi\eta R} \right)^2 t^2 + \frac{k_B T}{\pi\eta R} t \equiv \mathbf{V}^2 t^2 + 6Dt \quad (40)$$

який узагальнює розв'язки (32) та (37) і представляє собою суперпозицію хаотичного броунівського руху та направленою детерміністичного пересування у потоково-електрогравітаційних полях.

5. Чисельні розрахунки і оцінки

Як видно з рівняння (40) і слідує з нашого попереднього аналізу (див. Рис. 1) основний вклад у динаміку частинок при достатньо малих радіусах $R \rightarrow 0$ очікується від дифузійного члена. Дійсно при цьому гравітаційна складова

$$|\mathbf{U}|_g = \frac{\frac{4}{3}\pi\rho g R^3}{6\pi\eta(R)R} = \frac{2\rho g R^2}{9\eta(R)} \quad (41)$$

стаціонарної швидкості \mathbf{V} стає пропорційною до R і зникає, а її електростатична компонента

$$|\mathbf{U}|_e = \frac{qE}{6\pi\eta(R)R} = \frac{Z(R)Ee}{6\pi\eta(R)R} \quad (42)$$

прямує до деякої постійної величини (тут ми врахували, що $Z(R) \sim R^2$ і $\lim_{R \rightarrow 0} \eta(R) \sim R$, див. рівняння (12)). Швидкість вітру \mathbf{U} рівна деякій величині незалежній від R . З іншого боку, коефіцієнт дифузії D пропорційний $1/R^2$ і отже швидко наростає зі зменшенням R . Тоді стаціонарною швидкістю \mathbf{V} можна знехтувати і розглядати броунівський механізм переміщення в чистому вигляді $\delta = \sqrt{6Dt}$ (див. рівняння (33)). Чисельні значення отримані для броунівського переміщення δ при $T = 300$ К для різних радіусів частинок R і часів спостереження t наведені нижче в Табл. 1.

Табл. 1. Броунівське переміщення δ (в метрах) пилових частинок у повітряному середовищі при $T = 300$ К для різних значеннях їх радіусів R (в метрах) і часів t спостереження.

t	$R = 10^{-10}$	$2 \cdot 10^{-8}$	$5 \cdot 10^{-8}$	10^{-7}	10^{-6}	10^{-4}
1 сек	$2.9 \cdot 10^{-2}$	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$6.5 \cdot 10^{-5}$	$3.7 \cdot 10^{-5}$	$8.8 \cdot 10^{-6}$	$8.4 \cdot 10^{-7}$
1 хв	$2.2 \cdot 10^{-1}$	$1.2 \cdot 10^{-3}$	$5.1 \cdot 10^{-4}$	$2.9 \cdot 10^{-4}$	$6.8 \cdot 10^{-5}$	$6.5 \cdot 10^{-6}$
1 год	1.7	$9.0 \cdot 10^{-3}$	$3.9 \cdot 10^{-3}$	$2.2 \cdot 10^{-3}$	$5.3 \cdot 10^{-4}$	$5.1 \cdot 10^{-5}$
1 доба	8.4	$4.4 \cdot 10^{-2}$	$1.9 \cdot 10^{-2}$	$1.1 \cdot 10^{-2}$	$2.6 \cdot 10^{-3}$	$2.5 \cdot 10^{-4}$
1 міс.	$4.6 \cdot 10^1$	$2.4 \cdot 10^{-1}$	$1.1 \cdot 10^{-1}$	$6.0 \cdot 10^{-2}$	$1.4 \cdot 10^{-2}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$
1 рік	$1.6 \cdot 10^2$	$8.5 \cdot 10^{-1}$	$3.7 \cdot 10^{-1}$	$2.1 \cdot 10^{-1}$	$4.9 \cdot 10^{-2}$	$4.7 \cdot 10^{-3}$
10 р.	$5.1 \cdot 10^2$	2.7	1.2	$6.6 \cdot 10^{-1}$	$1.6 \cdot 10^{-1}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$
100 р.	$1.6 \cdot 10^3$	8.5	3.7	2.1	$4.9 \cdot 10^{-1}$	$4.7 \cdot 10^{-2}$

Результат отримується доволі несподіваним. Навіть для пилових частинок з мінімально можливим радіусом $R \sim 2 \cdot 10^{-8}$ м (нижній поріг зареєстрований в експерименті [5]) чисто броунівське переміщення виявляється надзвичайно малим і складає всього $\delta \sim 8.5$ м за 100 років! Для частинок більшого розміру таке переміщення є ще меншим і ним можна повністю знехтувати. У режимі великих значень $R > \sim 10^{-6}$ м функція $\delta(R)$ прямує до нульового значення як $\sim 1/\sqrt{R}$ (оскільки $\lim_{R \rightarrow \infty} \eta(R) = \eta$). При екстремально малих розмірах $R < \sim 10^{-8}$ м переміщення збільшується по закону $\sim 1/R$, але в дійсності воно не може ставати дуже великим з погляду на обмеження знизу на радіус частинок. Наприклад, значення R очевидно не може бути меншим за радіуса молекул $R \sim 10^{-10}$ м, що відповідає у цьому гіпотетичному випадку максимально можливим переміщенням $\delta \sim 1.6$ км при $t = 100$ років.

Основною причиною таких малих значень δ полягає в тому, що у випадку стохастичного броунівського руху функція δ пропорційна \sqrt{t} , а не просто t як у випадку звичайного направлено переміщення. У зв'язку з цим середня швидкість броунівського переміщення $v_\delta = \delta/t \sim 1/\sqrt{t}$ зменшується з ростом t . Тому на достатньо великих часах t вклад потокового члена $\mathbf{V}^2 t^2$ у квадрат загального переміщення δ^2 буде завжди домінуючим у порівнянні з дифузійним $6Dt$ якою б малою не була швидкість $\mathbf{V} \neq 0$ і великим коефіцієнт дифузії D . Найбільш заочний тому приклад – процес розповсюдження запаху якої-небудь речовини. Вважаючи розмір молекул речовини порядку $R \sim 10^{-10}$ м отримаємо згідно Табл. 1, що через 1 хвилину ($t = 60$ с) запах розповсюдиться на відстань $\delta = \sqrt{6Dt} \sim 20$ см. Це

відповідає швидкості $v_\delta \sim 4$ мм/с. Але у подальшому вступає в силу потокові механізми переносу. Так протягом місяця ($t = 2.6 \cdot 10^6$ с) броунівська компонента збільшиться всього до $\delta = \sqrt{6Dt} \sim 46$ м, тоді як наявність направлено потоку повітря навіть з малою швидкістю $|\mathbf{V}| \sim v_\delta \sim 4$ мм/с приведе до розповсюдження на макро відстані порядку $\delta = |\mathbf{V}|t \sim 10$ км.

Таким чином зовсім достатньо обмежитися розглядом потоково-електрогравітаційного механізму як основного при переносі частинок на великі відстані і на цікавлячих нас великих часах $t \gg 6D/\mathbf{V}^2 = k_B T / (\pi \eta R \mathbf{V}^2)$ (де броунівська компонента $6Dt$ стає зникаюче малою у порівнянні з детермінованою складовою $\mathbf{V}^2 t^2$). Тоді згідно результатам отриманим у розділі 4.2 маємо наступне рівняння для траєкторії частинок

$$\mathbf{r}(\mathbf{t}) = \mathbf{r}(0) + \int_0^t \mathbf{V}(t) dt, \quad (43)$$

$$\mathbf{U}(\mathbf{t}) = \frac{q\mathbf{E} + \frac{4}{3}\pi\rho\mathbf{g}R^3}{6\pi\eta R} \equiv \mathbf{U}(t) + \mathbf{U}_e + \mathbf{U}_g,$$

де \mathbf{U}_e і \mathbf{U}_g – електростатична та гравітаційна компоненти вектора швидкості \mathbf{V} (см. (41) і (42)). Знаючи швидкість повітряного потоку $\mathbf{U}(t)$ як функцію часу рівняння (43) далі чисельно інтегрується щоб отримати положення частинок $\mathbf{r}(t)$ для довільних t .

Так як у нашому випадку аналізується рух пилових частинок у повітряному середовищі як всередині ОУ так і поза ним (в атмосфері), то функція $\mathbf{U}(t)$ повинна безпосередньо залежати від конвекційних (погодних) умов. Передбачити зміни таких умов на великих часах не представляється можливим. Тому для проведення оцінок по порядку величини, зупинимося на простій моделі, коли швидкість конвекційних потоків (чи швидкість вітру) є деякою постійною величиною $\mathbf{U}(t) \equiv \mathbf{U} = \text{const}$. Тоді $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}(0) + \mathbf{V}t$, оскільки $\mathbf{V} = \mathbf{U} + \mathbf{U}_e + \mathbf{U}_g$ стає також незалежною від t , і всі наступні обчислення можна провести аналітично.

Для оцінки вкладу електростатичної \mathbf{U}_e і гравітаційної \mathbf{U}_g компонент у загальну швидкість \mathbf{V} їх амплітуди представлені на Рис. 2 для різних значень радіуса R . Гравітаційна складова U_g має простий фізичний зміст, а саме, вона описує швидкість осідання пилу при відсутності повітряних потоків ($U = 0$) і електричних полів ($U_e = 0$). Врахування електростатичної компоненти стає важливим для частинок особливо малого розміру $R < \sim 2 \cdot 10^{-8}$ м, де $U_e \sim 10^{-5}$ м/сек на порядок перевершує гравітаційну швидкість $U_g \sim 10^{-6}$ м/сек.

Оскільки \mathbf{U}_g і \mathbf{U}_e напрямлені вертикально вниз, то конвекційними потоками повітря (вертикальною складовою вектора \mathbf{U}) можна отже знехтувати якщо їхня швидкість $U_{\parallel} < \sim 10^{-5}$ м/сек. Горизонтальна складова U швидкості потоку (вітру) буде призводити до зміщення пилових частинок протягом часу їх вертикального падіння.

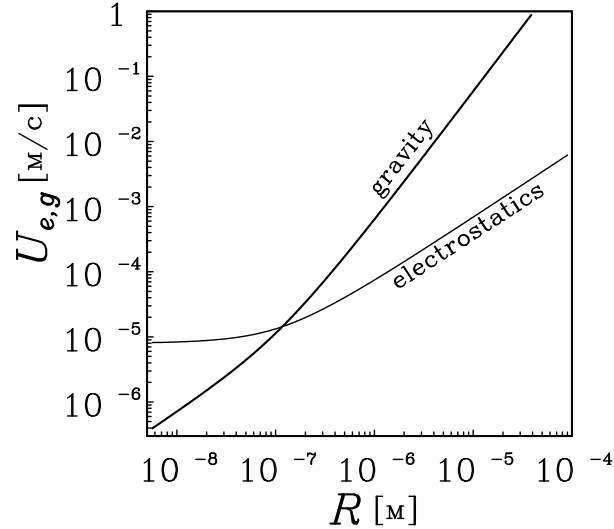


Рис. 2. Гравітаційна і електростатична складові швидкості стаціонарного руху пилових частинок для різних значень її радіуса.

Час падіння легко оцінити

$$t = \frac{z}{U_g + U_e - U_{\parallel}} = \frac{z}{\frac{2\rho g R^2}{9\eta} + \frac{qE}{6\pi\eta R} - U_{\parallel}} \quad (44)$$

знаючи початкову висоту z розташування частинок, де $U_g + U_e - U_{\parallel}$ позначає вертикальну складову їх швидкості. Тоді горизонтальне зміщення частинок за час падіння рівне

$$s = Ut = \frac{zU}{\frac{2\rho g R^2}{9\eta} + \frac{qE}{6\pi\eta R} - U_{\parallel}}. \quad (45)$$

Покладаючи швидкість горизонтального потоку (середня швидкість вітру) рівною $U \sim 0.1$ м/с, а висоту падіння $z \sim 10$ м отримаємо

результат зображений на Рис. 3. Тут ми розглянули три випадки: ($g \neq 0, E = 0, U_{\parallel} = 0$) (неперервна крива), ($g \neq 0, E \neq 0, U_{\parallel} = 0$) (верхня пунктирна крива) і ($g \neq 0, E = 0, U_{\parallel} \neq 0$) (нижня пунктирна крива). В останньому випадку швидкість конвекційного потоку була прийнята рівною $U_{\parallel} = 4 \cdot 10^{-7}$ м/с.

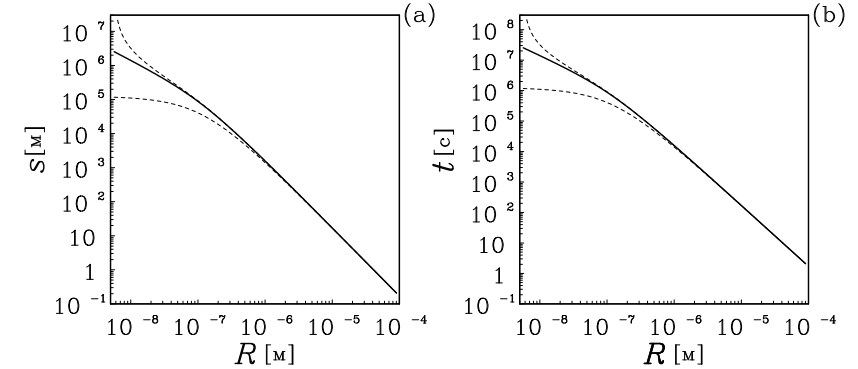


Рис. 3. Зміщення s пилових частинок (а) і час t їх падіння (б) з висоти $z = 10$ м у гравітаційному полі Землі при наявності повітряного потоку $U = 0.1$ м/с без (неперервна крива) і з врахуванням (пунктирні криві) електростатичного поля і конвекційних потоків.

Як видно з рисунку крупні частинки з радіусами $R > \sim 100$ мкм швидко ($t < \sim 1$ с) закінчують свій рух ударом (із швидкістю $U_g > \sim 1$ м/с) об підлогу (грунт) здійснивши при цьому лише незначне зміщення $s < \sim 20$ см від свого початкового положення. Середні за величиною частинки з $R \sim 1$ мкм осідають за декілька годин і встигають переміститися на відстань $s \sim 1000$ м, яка співрозмірна з розмірами ОУ. Найбільшу небезпеку являють особливо дрібні частинки з радіусами $R < \sim 2 \cdot 10^{-8}$ м = 20 нм, які можуть мігрувати на великі відстані $s > \sim 1000$ км протягом достатньо довгого часу t порядку одного року. Більше того такі частинки мають дуже малу швидкість осідання $U_{e,g} < \sim 10^{-5}$ м/с (див. Рис. 2) і отже дуже чутливі до (направлених вертикально вверх) конвекційних потоків. Наприклад наявність навіть дуже слабкої (але постійної) конвекції $U_{\parallel} = 4 \cdot 10^{-7}$ м/с збільшує час осідання і довжину переміщення субмікронних частинок на порядок (див. верхні пунктирні криві на Рис. 3). Якщо ж частинки попадуть в короткочасний (але інтенсивний) конвекційний потік

швидкість якого $U_{||} > U_g + U_e$ то вони почнуть підніматися збільшуючи тим самим свою висоту z і отже своє горизонтальне зміщення s (див. рівняння (45)) при подальшому русі. З іншого боку, наявність (додатнього) заряду частинок і електростатичного поля Землі (яке вважається направленим вертикально вниз) веде до зменшення часу їхнього падіння і довжини зміщення. Частинки великих розмірів ($R > \sim 1$ мкм) не чутливі ні до електростатичного поля ні до наявності конвекції і осідають виключно під дією сили тяжіння. Числові значення довжини зміщення s , отримані в трьох розглянутих вище випадках зібрані в Табл. 2. для декількох характерних радіусів R частинок.

Табл. 2. Зміщення s траєкторії пилових частинок (в метрах) за час їх падіння у гравітаційному полі Землі для різних значень їх радіусів R (в метрах) у трьох характерних випадках, коли електростатичне поле і/або конвекційні потоки враховуються додатково (I – $g \neq 0, E = 0, U_{||} = 0$; II – $g \neq 0, E \neq 0, U_{||} = 0$; III – $g \neq 0, E = 0, U_{||} \neq 0$).

	$R = 10^{-8}$	$2 \cdot 10^{-8}$	$5 \cdot 10^{-8}$	10^{-7}	10^{-6}	10^{-4}
I	$1.4 \cdot 10^6$	$6.6 \cdot 10^5$	$2.3 \cdot 10^5$	$8.8 \cdot 10^4$	$1.6 \cdot 10^3$	$1.7 \cdot 10^{-1}$
II	$1.1 \cdot 10^5$	$9.7 \cdot 10^4$	$6.8 \cdot 10^4$	$4.1 \cdot 10^4$	$1.4 \cdot 10^3$	$1.7 \cdot 10^{-1}$
III	$3.2 \cdot 10^6$	$9.0 \cdot 10^5$	$2.5 \cdot 10^5$	$9.1 \cdot 10^4$	$1.6 \cdot 10^3$	$1.7 \cdot 10^{-1}$

6. Висновки

На основі проведених досліджень можна зробити наступні висновки:

1. Мезоскопічний метод ланжевенівської динаміки виявляється найбільш ефективним підходом до опису руху пилових частинок у повітряному середовищі. На відміну від мікроскопічних підходів, рівняння руху ланжевенівської динаміки реально застосовні для довготривалого прогнозування траєкторій частинок і можуть бути використані як для чисельного розрахунку в рамках комп'ютерного експерименту так і для отримання аналітичних розв'язків.

2. Наявність субмікронного пилу веде до ряду особливостей динаміки руху, які не спостерігаються для частинок більших розмірів. Зокрема, тоді час релаксації руху до його стаціонарного протікання стає набагато меншим за характерні часи зміни зовнішніх силових полів. Таке одночасне існування швидких (пов'язаних з дисипативними взаємодіями частинок з середовищем) і повільних процесів

призводить до необхідності модифікації існуючих алгоритмів розв'язання рівнянь руху в комп'ютерному експерименті і аналітичних підходів.

3. Навіть у випадку дуже малого розміру частинок з радіусами $R < \sim 20$ нм броунівська компонента сили, хоча і виявляється співрозмірною по амплітуді з іншими складовими (такими як гравітаційні і електростатичні поля), не призводить до суттєвого впливу на рух частинок на цікавлячих нас масштабах часу спостереження за частинками. Броунівську дифузію отже необхідно виключити з можливих механізмів, які відповідають за переміщення частинок на великі відстані.

4. Основним механізмом переміщення пилових частинок треба вважати потоково-електрогравітаційний, причому роль гравітаційної компоненти зменшується зі зменшенням розміру частинок.

5. Середні і крупні частинки з радіусами $R > \sim 1$ мкм осідають під дією електрогравітаційних сил за декілька годин і встигають переміститися за рахунок горизонтальних потоків повітря на відстані порядку 1 км, які співрозмірні з розмірами ОУ.

6. Особливу небезпеку становлять субмікронні частинки з радіусами $R < \sim 100$ нм, які можуть вийти за межі ОУ і мігрувати в подальшому на великі відстані порядку 1000 км і більше. При цьому час осідання таких частинок стає надзвичайно довгим і може сягати декількох років лет. Вертикальні конвекційні потоки можуть на порядок збільшити час осідання і довжину переміщення субмікронних частинок.

Література

1. Боровой А.А. Разработка отчета по безопасности объекта "Укрытие". Анализ текущей безопасности объекта "Укрытие" и прогнозные оценки развития ситуации // МНТЦ "Укрытие" НАНУ, Арх.№3601, Чернобыль, 1996, 272 с.
2. Рабочий отчет за 2-й 6-ти месячный период "Состояние безопасности объекта "Укрытие" Чернобыльской АЭС. Ядерное топливо и радиоактивные отходы" // РНЦ КИ, ИВТЭМ, М., 1999.
3. Барьяхтар В.Г., Гончар В.В., Жидков А.В., Ключников А.А. О пылегенерирующей способности аварийного облученного топлива и лавообразных топливосодержащих материалов объекта "Укрытие" // Препринт МНТЦ "Укрытие" НАН Украины, No. 97-10, Чернобыль, 1997, 20 с.

4. Baryakhtar V., Gonchar V., Kluchnikov A., Zhidkov A. Dust productivity of fuel-containing materials of "Shelter" object: experimental data, physical mechanisms, possible technology of prevention // Проблемы Чернобыля 1999, вып. 5, с. 63–64.
5. Baryakhtar V., Gonchar V., Zhidkov A., Zhidkov V. Radiation damages and self-sputtering of high radioactive dielectrics: spontaneous emission of submicron dust particles // Condensed Matter Physics, 2002, Vol. 5, N3(31), p. 449–471.
6. Cheng H.-P., Gillaspay J. D. Nanoscale modification of silicon surfaces via Coulomb explosion // Phys. Rev. B, 1997, Vol. 55, p. 2628–2636.
7. Комаров Ф.Ф. Дефектообразование и трекообразование в твердых телах при облучении ионами сверхвысоких энергий // Успехи физических наук, 2003, том 173, №12, с. 1287–1318.
8. Ключников О.О. Современное состояние объекта "Укрытие" и реализация международного проекта его преобразования в экологически безопасную систему (SIP) // Проблемы Чернобыля, 2002, вып. 11, с. 6–11.
9. McEachern R.J., Taylor P. A review of the oxidation of uranium dioxide at temperatures below 400° C // J. Nucl. Mat., 1998, vol. 254, p. 87–121.
10. Pöllänen R., Valkama I., Toivonen H. Transport of radioactive particles from the Chernobyl accident // Atmospheric Environment, 1997, vol. 31, p. 3575–3590.
11. Pöllänen R. Nuclear fuel particles in the environment - characteristics, atmospheric transport and skin doses // Academic dissertation, Helsinki, 2002, STUK-A188 (Radiation and Nuclear Safety Authority, University of Helsinki, Department of Physics).
12. Allen M.P., Tildesley D.J., Computer Simulation of Liquids, (Clarendon, Oxford, 1987).
13. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications (Academic Press, New York, 1996).
14. Жидков А.В., Ферромагнетизм топливосодержащих материалов объекта "Укрытие".- Проблемы Чернобыля, вып. 6. Чернобыль, МНТЦ "Укриття" НАН України, 2000, с. 6–12.
15. Электродисперсионные и теплофизические характеристики ЛТ-СМ объекта "Укрытие" и возможные технологии управляемого разрушения их скоплений // Отчет МНТЦ "Укриття" НАН Украины, Чернобыль, 1998, Арх. No 3724.
16. Пазухин Э.М. Лавообразные топливосодержащие массы 4-го

- блока Чернобыльской АЭС: топография, физико-химические свойства, сценарий образования // Радиохимия, 1994, т. 36 (2), с. 97–142.
17. Пискунов В.Н. Теоретические модели кинетики формирования аэрозолей (Издательство НИИЭФ, г. Саров, 2000).
 18. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Гидродинамика (Москва, Наука, 1986).
 19. Омелян І.П., Мригloed І.М. Комп'ютерне моделювання динамічних процесів у системах дрібнодисперсних ЛПВМ при наявності зовнішнього магнітного поля та зсувних рідинних потоків // Препринт ІФКС НАН України, 2001, ICMP-01-19U, 22 с.
 20. Omelyan I.P., Mryglod I.M., Folk R. Algorithm for molecular dynamics simulations of spin liquids // Phys. Rev. Lett., 2001, vol. 86, p. 898–901.
 21. Omelyan I.P., Mryglod I.M., Folk R. Optimized Verlet-like algorithms for molecular dynamics simulations // Phys. Rev. E, 2002, vol. 65, p. 056706(1)–(5).
 22. Дувіряк А.А. Про можливість електростатичної та діелектричної сепарації радіоактивних відходів об'єкту "Укриття" // Препринт ІФКС НАН України, 2001, ICMP-01-25U, 7 с.
 23. Ebner A.D., Ritter J.A., Ploehn H.J. Feasibility and limitation of nanolevel high gradient magnetic separation // Sep. Pur. Techn., 1997, vol. 11, p. 199–210.
 24. Takayasu M., Gerber R., Friedlaender F.J. Magnetic separation of submicron particles // IEEE Trans. Magn., 1983, vol. MAG-19, p. 2112–2117.
 25. Vincent-Viry O., Mailfert A., Gillet G., Diot F. Magnetic percolation phenomenon in high-field high-gradient separators // IEEE Trans. Magn., 2000, vol. 36, p. 3947–3952.
 26. Дувіряк А.А., Яремко Ю.Г. З'ясування можливих механізмів зарядки радіоактивних пилових частинок об'єкту "Укриття" // Препринт ІФКС НАН України, 2003, ICMP-03-10U, 16 с.
 27. Gu Z., Schill R.A. Novel quasi-electrostatic air filter: a single-particle study // Journal of Electrostatics, 1997, vol. 39, p. 203–230.
 28. Fishchuk I.I., Golinye I.Yu., Sugakov V.I., Zinets O.S. Simulation of physical properties of fuel containing materials // Condensed Matter Physics, 1997, No 12, p. 27–36.

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Миронович Мриглод
Ігор Петрович Омелян

ОСОБЛИВОСТІ РУХУ СУБМІКРОННИХ ЧАСТИНОК У ПОВІТРЯНОМУ
СЕРЕДОВИЩІ

Роботу отримано 31 серпня 2004 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені