

УДК 551.594, 551.596

МОДЕЛЬ ОБРАЗОВАНИЯ КАПЕЛЬ НА ЛЕГКИХ ИОНАХ

Павлов Г.С.

MODEL OF DROP FORMATION OF ON LIGHT IONS

G.S.Pavlov

В работе исследуется модель молекул воды с электрическим взаимодействием между ними. Изучается кластер, состоящий из 55 молекул, первоначально ориентированных случайно. Вращением каждой молекулы достигается минимум суммарной энергии. Тем самым определяется энергия связи. Аналогичная операция производится в присутствии иона. Показано, что отрицательные ионы обладают более сильным взаимодействием с кластером.

In work the model of molecules of water with electric interaction between them is investigated. It is studied cluster, consisting of 55 molecules which are not correctly focused casually. Rotation of each molecule achieves a minimum of total energy. Thus energy of connection is determined. Similar operation is made at the presence of an ion. It is shown that negative ions possess stronger interaction with of cluster.

Введение

Многолетние наблюдения за космическими лучами показали, что в образовании погоды играет роль связь с ионизацией в атмосфере. Ионы образуются при столкновении высокоэнергичных частиц с молекулами воздуха. Вокруг ионов скапливаются молекулы воды, таким способом образуются облака. Чтобы описать процессы конденсации пара на ионах, мы строим феноменологическую модель взаимодействия молекул воды с каплями. Исследуется электростатическая модель взаимодействия молекул воды, с помощью которой вычисляется эффективная энергия связи и, соответственно, теплота парообразования. При помощи нашей модели также находится энергия связи для положительных и отрицательных ионов.

Процессы испарения воды и конденсации пара в случае насыщения образуют равновесное состояние – число частиц, превращающихся в газ и в жидкость одинаково. Часть частиц пара, падающих на поверхность, остается на поверхности и продолжает существовать в виде жидкости. Соответствующая доля – «коэффициент залипания» – берется из литературы. Этот коэффициент $\alpha_c = 0.04$ [2].

Частота попаданий молекул на поверхность в изотропной среде будет выглядеть таким образом:

$$v_1 = v_2; v_1 = \frac{1}{4} n_2 \langle v_2 \rangle; v_2 = \frac{1}{4} n_{ж} \langle v_{ж} \rangle,$$

где $n_2, n_{ж}$ – концентрация молекул пара в атмосфере и воде, соответственно, $\langle v_2 \rangle, \langle v_{ж} \rangle$ – средние тепловые скорости.

Среднюю тепловую скорость газа находим из условия распределения молекул по абсолютным значениям скорости:

$$\text{const} \int_0^{\infty} \exp \left[-\frac{E(v)}{kT} \right] v^2 dv = 1,$$

k – универсальная газовая постоянная. Здесь записано условие нормировки распределения молекул по скоростям.

Энергия молекулы в жидком состоянии выглядит следующим образом:

$$E(v) = \begin{cases} E_{nom} + \frac{mv^2}{2} = mv^2, v < v_*, \\ \frac{mv_*^2}{2} + \frac{mv^2}{2}, v > v_*. \end{cases}$$

Здесь m – масса молекул воды, v_* – предельная скорость молекулы до отрыва. Эта скорость определяется энергией связи молекулы ΔE :

$$mv_*^2 = \Delta E.$$

При $v < v_*$ молекула обладает одинаковой кинетической и потенциальной энергией. Из распределения Максвелла находим множитель A :

$$A \int_0^{\infty} v^2 e^{-\frac{mv^2}{kT}} dv = 1; A = \frac{4 \left(\frac{m}{kT} \right)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}.$$

Здесь учтено, что v_* значительно больше, чем средняя тепловая скорость. Энергия молекул в газообразном состоянии описывается проще, так как газ обладает только кинетической энергией:

$$B \int_0^{\infty} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv = 1; B = \frac{4 \left(\frac{m}{2kT} \right)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}.$$

В силу того что число частиц, покидающих поверхность воды, и число залипающих после столкновения с поверхностью частиц равны, имеем

$$n_2 \alpha_c B \int_0^{\infty} v^3 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv = n_2 A \int_{v_*}^{\infty} v^3 e^{-\left(\frac{\Delta E}{2} + \frac{mv^2}{2} \right) \frac{1}{kT}} dv.$$

Проинтегрировав, находим:

$$\frac{n_2 \alpha_c B}{2 \left(\frac{m}{2kT} \right)^2} = \frac{n_2 A}{2 \left(\frac{m}{2kT} \right)^2} \left(\frac{mv_*^2}{2kT} + 1 \right) e^{-\frac{\Delta E}{kT}}.$$

Из уравнения идеального газа мы находим концентрацию газа: $n_2 = P_c/kT$. Концентрацию воды мы берем, деля плотность воды на массу молекулы:

$$n_g = \rho / m .$$

Подставляя полученные концентрации для газа и для жидкости, мы находим давление насыщенного пара в зависимости от температуры:

$$P_c = \frac{\sqrt{2}}{\alpha_c} \frac{\rho}{m} (\Delta E + 2kT) e^{-\frac{\Delta E}{kT}} .$$

Давление насыщенного пара при температурах 0 °С и 100°С $P_0=0.00622$ атм, $P_{110}=1$ атм. Зная температуру и давление, путем подстановки находим энергию ΔE . Отношение давлений при температурах 0 и 100 °С дает нам уравнение:

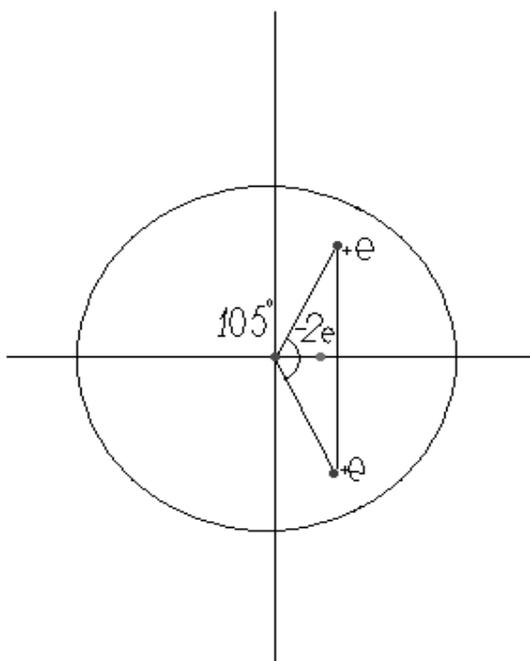
$$\frac{P_0}{P_{100}} = 0.00622 = \frac{(\Delta E + 2kT_0)}{(\Delta E + 2kT_{100})} e^{\Delta E \left(\frac{1}{kT_{100}} - \frac{1}{kT_0} \right)} .$$

Решая это уравнение, мы находим энергию отрыва молекулы $\Delta E \approx 7.09 \cdot 10^{-13}$ эрг.

Электростатическая модель молекулы воды, используемая нами, предполагает, что кислород притягивает электроны атомов водорода, тем самым протоны остаются голыми. Эффективный электронный заряд атома, равны 2 единицам, помещается так, чтобы он совпал с геометрическим центром треугольника Н–О–Н. Такое распределение зарядов дает табличное значение дипольного момента, равное 1.84 Д для момента воды [1].

Таким образом, модель молекулы воды представляет собой сферическую оболочку, в центре которой находится нейтральный атом кислорода, а атомы водорода находятся внутри сферы с углом 105° между ними. Электроны располагаются в геометрическом центре треугольника (рис. 1) и обладают зарядом $-2e$.

Мы предполагаем, что центры молекул нашей системы располагаются по осям косоугольной системы координат.



Расстояние между центром соседних молекул находим из представления, что молекулы воды находятся в плотной упаковке. Тогда объем, приходящийся на одну молекулу, будет равен:

$$\Delta V = \frac{m_0}{\rho_{\text{воды}}} \quad \text{где } \rho_{\text{воды}}, m_0 - \text{плотность воды и}$$

масса единичной молекулы воды, то радиус одной молекулы: $R_0 = 1.74 \cdot 10^{-8}$ см .

Рассматриваем молекулярный кластер, который представляется состоящим из двух слоев и центральной молекулы. Вокруг центральной молекулы расположен первый слой из 12 молекул, а второй слой состоит из 42 молекул. Вращением каждой молекулы добивается минимума потенциальной энергии. После многократного вращения молекулы устанавливаются в устойчивом положении. Находим энергию связи центральной молекулы.

Это энергия связи зависит от начальной ориентации молекул, и ее определение требует многократной реализации начального состояния с помощью генератора случайных чисел.

Результаты 200 реализаций в условных единицах представлены в таблице.

Энергия связи получается умножением табличных значений M на единичную энергию:

$$\Delta E_i = M_i \left(-\frac{e^2}{4R_0} \right) .$$

Мы усредняем данные двумя способами: первый – это обычное усреднение:

$$\Delta E = \sum_i^N \frac{\Delta E_i}{i} = 7.86 \cdot 10^{-13} \text{ эрг,}$$

-0.210874	-0.263323	-0.258508	-0.238934	-0.220589
-0.235672	-0.188069	-0.257755	-0.237164	-0.227228
-0.239137	-0.218736	-0.216453	-0.179635	-0.223756
-0.242462	-0.240818	-0.225714	-0.263729	-0.199388
-0.221431	-0.188842	-0.228126	-0.253814	-0.242092
-0.280904	-0.214814	-0.252969	-0.313087	-0.192475
-0.256252	-0.239264	-0.219016	-0.249536	-0.286194
-0.277166	-0.278192	-0.247668	-0.210912	-0.2644
-0.179715	-0.228618	-0.236466	-0.233003	-0.470262
-0.209592	-0.215432	-0.2549	-0.24087	-0.228692
-0.234207	-0.183579	-0.242824	-0.202533	-0.292352
-0.199267	-0.192547	-0.244948	-0.252291	-0.229877
-0.195878	-0.198962	-0.256995	-0.21564	-0.259043
-0.238422	-0.242907	-0.237733	-0.211051	-0.217126
-0.268392	-0.255508	-0.255508	-0.276479	-0.26052
-0.25766	-0.249973	-0.242987	-0.25456	-0.237197
-0.314541	-0.177065	-0.193018	-0.206816	-0.209906
-0.236463	-0.265461	-0.248364	-0.217119	-0.267148
-0.280617	-0.259981	-0.207618	-0.244563	-0.20882
-0.235421	-0.200684	-0.212876	-0.283964	-0.252391
-0.25108	-0.249439	-0.254191	-0.234792	-0.197945
-0.245918	-0.277695	-0.218059	-0.186754	-0.29411
-0.224603	-0.229832	-0.20975	-0.20546	-0.265817
-0.252322	-0.247536	-0.252793	-0.229259	-0.217136
-0.249055	-0.186791	-0.24344	-0.201222	-0.270793
-0.221148	-0.282384	-0.222327	-0.228761	-0.225079
-0.224895	-0.261991	-0.260217	-0.226994	-0.264721
-0.259803	-0.204194	-0.23393	-0.22962	-0.21714
-0.234824	-0.20804	-0.254545	-0.223929	-0.249626
-0.256654	-0.212367	-0.239766	-0.249128	-0.194974
-0.258959	-0.240406	-0.26269	-0.240406	-0.220226
-0.273012	-0.30424	-0.238269	-0.206659	-0.21617
-0.227668	-0.268841	-0.250065	-0.213943	-0.204315
-0.287623	-0.282115	-0.213949	-0.226671	-0.228978
-0.232726	-0.209818	-0.247634	-0.190176	-0.247761
-0.225335	-0.251351	-0.224985	-0.249929	-0.251704
-0.297341	-0.291405	-0.209575	-0.222972	-0.21299
-0.241925	-0.233286	-0.267684	-0.206512	-0.256433
-0.251234	-0.189807	-0.220708	-0.266966	-0.233991

а второй способ – это усреднение по давлениям:

$$P_0 = \frac{\rho\sqrt{2}}{m_0\alpha_c} \sum_i^N \{(\Delta E_i + 2kT_0) \exp\left[-\Delta E_i \frac{1}{kT_0}\right]\},$$

$$P_{100} = \frac{\rho\sqrt{2}}{m_0\alpha_c} \sum_i^N \{(\Delta E_i + 2kT_{100}) \exp\left[-\Delta E_i \frac{1}{kT_{100}}\right]\},$$

$$\eta = \frac{P_0}{P_{100}} = 0.0094 = \frac{(\Delta E + 2kT_0)}{(\Delta E + 2kT_{100})} e^{\Delta E \left(\frac{1}{kT_{100}} - \frac{1}{kT_0}\right)}.$$

Отношение давления насыщенного пара при $T=0^\circ$ и $T=100^\circ\text{C}$ η получается таким, если $\Delta E=6,5\cdot 10^{-13}$ эрг. Это значение получается из решения уравнения:

$$\Delta E' = \frac{1}{\left(\frac{1}{kT_{100}} - \frac{1}{kT_0}\right)} \ln\left(\frac{\Delta E + 2kT_0}{\Delta E + 2kT_{100}} \eta\right),$$

которое достигается итерациями.

Таким образом, истинное значение энергии находится в нутрии диапазона $\Delta E \approx (6.5 \div 7.86) \cdot 10^{-13}$ эрг. Эти значения близки к той величине энергии связи, которая соответствует кривой насыщения.

Кластер «молекула воды» с присоединением положительных и отрицательных ионов

Используем упомянутый кластер, состоящий из двух слоев, – первый из 12 и второй слой из 42 молекул воды, – расположенных в косоугольной решетке. Находим устойчивую ориентацию всех молекул кластера путем вращения каждой молекулы. Такая ориентация обеспечивает минимум потенциальной энергии кластера. Затем убираем второй слой и рядом с кластером помещаем ион на трех фиксированных расстояниях. Угловые координаты, где помещается ион, имеют 14 комбинаций, обеспечивая необходимое усреднение по сфере. Эти точки на сфере соответствуют вершинам и центрам граней куба, совмещенного с кластером. Расстояние мы

меняем три раза: 1.75, 2.25 и 2.75 в единицах диаметра молекулы воды. Затем усредняем, в результате у нас остается только 6 значений – по 3 значения для положительного и отрицательного иона. Затем эту операцию производим заново 14 раз и в конце по этим результатам тоже производим усреднение. В результате имеем набор значений энергии в эргах.

$$\begin{aligned} &(-2.76 \cdot 10^{-13}), (-3.17 \cdot 10^{-13}), \\ &(-2.54 \cdot 10^{-13}), (-2.65 \cdot 10^{-13}), \\ &(-2.45 \cdot 10^{-13}), (-2.48 \cdot 10^{-13}). \end{aligned}$$

Первый столбец – положительные заряды. Во втором столбце отрицательные заряды. При отрицательных зарядах у нас получилась энергия связи больше, чем при положительных [3]. Именно так и ведут себя в природных условиях молекулы воды, что является первопричиной грозового электричества. Можно предполагать, что электрическая модель воды отражает ее реальные свойства.

Выводы

Представленная модель молекулы воды обнаруживает более сильное притяжение к отрицательному заряду, чем к положительному. Это должно способствовать более скорой конденсации молекул именно на отрицательных зарядах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Брандт Н.Б., Кульбачинский В.А. Квазичастицы в физике конденсированного состояния. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 72 с.
2. Козырев А.В., Ситников А.Г. Испарение сферической капли в газе среднего давления // Успехи физ. наук. 2001. Т. 171, № 7. 771 с.
3. Мейсон Б. Дж. Физика облаков. Л.: Гидрометеоиздат, 1961. С. 44–45.

Институт космических исследований и аэронавтики им. Ю.Г. Шафера СО РАН, Якутск