

## ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ТЕМПЕРАТУРЫ ЧАСТИЦ ПО СПЕКТРУ ИЗЛУЧЕНИЯ

И. С. Альтман

National CRI Center for Nano Particle Control, Institute of Advanced Machinery and Design, Seoul National University, Seoul 151-742, Korea  
School of Environmental Engineering, Faculty of Environmental Sciences, Griffith University, 4111, Brisbane 4111, QLD, Australia, altman@snu.ac.kr

Обсуждается принципиальная возможность определения температуры наноксидов в пламенах по спектру теплового излучения. Показано, что экспериментально определенная температура может быть близкой к реальной температуре частиц только в случае достаточно высокой концентрации структурных дефектов в частицах. Отмечается необходимость учета энергии, запасенной в этих дефектах, при описании тепловыделения металлосодержащих пламен.

Ключевые слова: пламена, наночастицы, температура.

Знание температуры горения важно для понимания процессов, происходящих в пламенах. В частности, эта температура определяет интенсивность сажеобразования в пламенах органических соединений и скорость роста оксидных частиц в металлосодержащих пламенах.

Существуют различные методы определения температуры горения. В случае двухфазных пламен их можно разделить на две группы: определение температуры газовой фазы и определение температуры конденсированной фазы. На первый взгляд, эти методы должны давать близкие значения температур. Однако недавно полученные автором результаты заставляют задуматься об «очевидности» этого положения. Как показано в [1], коэффициент аккомодации энергии, описывающий интенсивность свободномолекулярного теплообмена наночастиц с газом, имеет нулевую асимптотику при высоких температурах. Вследствие этого температура наноксидных частиц в пламенах может быть как выше, так и ниже температуры газа в зависимости от стадии роста частиц [2]. Поэтому измерение температуры газа не дает информации о реальной температуре частиц в пламени, хотя и отражает некую «среднюю» величину. Таким образом, остается единственный корректный метод определения температуры частиц — восстановление ее по спектру излучения пламени, если это излучение обусловлено конденсированными частицами. Поскольку излучение частиц, кроме температуры, определяется еще и свойствами вещества частиц, процедура восстановления тем-

пературы может оказаться неоднозначной. Обсуждение этого вопроса и является целью настоящей работы.

Рассмотрим подробно, какая информация может быть получена с помощью экспериментально измеренной спектральной светимости пламени. В случае, если излучение обусловлено конденсированными частицами, измеренная регистрирующей аппаратурой светимость определяется согласно закону Кирхгофа выражением

$$I_{\lambda} = A\lambda^{-5} f_V \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} g(T) q(\lambda, T) \times \left[ \exp \frac{hc}{k_B \lambda T} - 1 \right]^{-1} dT. \quad (1)$$

Здесь  $\lambda$  — длина волны,  $c$  — скорость света,  $h$  — постоянная Планка,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $A$  — константа, определяемая собирающей оптикой и размером входной щели измерительной аппаратуры,  $f_V$  — объемная доля излучающих частиц,  $g(T)$  — функция, описывающая распределение температур излучающих частиц;  $T_{\min}$  и  $T_{\max}$  — соответственно минимальная и максимальная температура частиц в системе. Отношение излучательной способности частиц к их радиусу (коэффициент излучения — поглощения частиц) в рэлеевском пределе дается выражением [3]

$$q(\lambda, T) = \frac{24\pi}{\lambda} \frac{\varepsilon''}{(\varepsilon' + 2)^2 + (\varepsilon'')^2}, \quad (2)$$

где  $\varepsilon(\lambda, T) = \varepsilon'(\lambda, T) + i\varepsilon''(\lambda, T)$  — комплексная диэлектрическая проницаемость вещества частицы. Заметим, что коэффициент поглощения частицы подобен коэффициенту поглощения вещества ( $\alpha = 4\pi k/\lambda$ ) и в случае слабой зависимости действительной части диэлектрической проницаемости от длины волны величины  $q$  и  $\alpha$  пропорциональны друг другу в широком спектральном интервале.

Отметим, что уравнение (1) справедливо только в случае оптически тонкого слоя, что справедливо, например, для излучения горячей частицы магния. В то же время для оптически плотных систем, когда излучение отдельных частиц недоступно для наблюдения, говорить о возможности определения температуры этих частиц не приходится.

Для видимого излучения в уравнении (1) можно пренебречь единицей (предел Вина). Тогда уравнение (1) примет вид

$$I_\lambda = A\lambda^{-5} f_V \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} g(T)q(\lambda, T) \exp\left(-\frac{hc}{k_B\lambda T}\right) dT. \quad (1')$$

В простейшем случае серого источника излучения и изотермической системы, когда  $q(\lambda, T) = \text{const}$  и  $g(T) = \delta(T - T_p)$ , что практически всегда неявно полагается, получаем

$$I_\lambda = \text{const} \cdot \lambda^{-5} \exp\left(-\frac{hc}{k_B\lambda T_p}\right), \quad (3)$$

и температура частиц  $T_p$  может быть восстановлена по наклону зависимости экспериментально измеренной величины  $\ln(I_\lambda\lambda^5)$  от обратной длины волны. Обработка экспериментальных данных в соответствии с описанной выше процедурой называется полицветовым методом. При измерении же светимости пламени на двух длинах волн эта процедура сводится к обработке «сине-красного отношения».

Однако в общем случае не очевидно, что все частицы внутри реакционной системы имеют одинаковую температуру. Постоянство величины  $q(\lambda)$  также физически не обосновано. В случае узкого распределения частиц по температуре и слабой зависимости  $q$  от длины волны мы получаем некую «среднюю температуру», имеющую физический смысл. Но даже в случае изотермичности частиц и, например, экспоненциальной спектральной зависимости коэффициента излучения  $q(\lambda, T) = \exp(hc/k_B\lambda(1/T_p -$

$1/T^*))$  полицветовой метод дает температуру  $T^*$  вместо действительной температуры  $T_p$ .

Следует отметить, что при всей своей внешней парадоксальности, по-видимому, именно такая экспоненциальная зависимость коэффициента излучения частиц наиболее близка к реальной в случае оксидных частиц. Действительно, оксиды металлов являются широкозонными диэлектриками. Их поглощение в видимом диапазоне связано с переходами между хвостами в запрещенной зоне и описывается правилом Урбаха  $\alpha \sim \exp(E/E_0)$  [4]. Как было отмечено выше, коэффициент излучения частицы пропорционален коэффициенту поглощения вещества. Тогда температура частиц, восстановленная по спектру излучения, находится по формуле

$$T^* = T_p \frac{E_0}{E_0 - k_B T_p} = T_p \frac{1}{1 - k_B T_p / E_0} \quad (4)$$

и отличие полицветовой температуры  $T^*$  от действительной определяется глубиной хвостов состояний в запрещенной зоне  $E_0$ . Поскольку обычно принимается отсутствие спектральной зависимости коэффициента излучения (что означает  $E_0 \rightarrow \infty$ ), то получаемая при этом температура  $T^*$ , соответствующая конечному значению  $E_0$ , всегда выше действительной температуры  $T_p$ . Однако приводимые в различных работах значения полученных температур, как правило, более или менее реальны. Согласно (4) это возможно лишь при  $E_0/k_B T_p \gg 1$  и невозможно при малых значениях  $E_0$ .

Проиллюстрируем последнее утверждение с помощью простого примера. Пусть действительная температура частицы 2000 К. Тогда при  $E_0 = 0,1$  эВ полицветовая температура должна была бы быть отрицательной (положительные значения возможны только при  $E_0/k_B T_p \gg 1$ ). При  $E_0 = 0,5$  эВ значение полицветовой температуры, рассчитываемой с помощью полученных в эксперименте данных, было бы порядка 3000 К. Для получения же величины, отличающейся от реальной не более чем на 5 % (т. е. не превышающей 2100 К), должно быть  $E_0 \geq 3,62$  эВ.

В соответствии с общепринятыми представлениями об электронных свойствах диэлектриков [4–6] величина  $E_0$  определяется концентрацией структурных дефектов. Как видно из уравнения (4) и рассмотренного выше примера, для характерных температур горения

(2000 ÷ 3000 К) неотрицательные температуры могут быть получены только при  $E_0 \geq 0,2$  эВ. Даже при этом значении  $E_0$  концентрация дефектов гораздо выше равновесной. При значениях же  $E_0$  порядка нескольких электрон-вольт (позволяющих получить реальные температуры частиц) концентрация дефектов становится сравнимой с атомной.

На основании вышеизложенного можно сформулировать следующие выводы. Восстановление температуры по спектру излучения оксидных частиц в пламени является принципиально невозможной задачей в силу отсутствия знаний о спектральной зависимости коэффициента излучения частиц априори. В случае же высокой концентрации структурных дефектов температура частиц, полученная с помощью полицветового метода, может оказаться достаточно близкой к действительной. Таким образом, если экспериментально определенная температура представляется реальной (близкой к ожидаемому значению, полученному, например, путем термодинамических расчетов), то, на наш взгляд, это свидетельствует о высокой концентрации структурных дефектов в образующихся в пламени частицах. Напомним, что аналогичная гипотеза об образовании оксидов в сильновозбужденных состояниях была высказана в [7] на основании анализа абсолютных величин световых потоков от пламени.

Следует также отметить, что образование оксидов в сильновозбужденных (дефектных) состояниях может влиять на суммарное тепловыделение при горении металлосодержащих составов. В этом случае, если концентрация дефектов достаточно высока, значительная часть энергии горения оказывается запасенной в дефектах.

Автор признателен коллегам П. В. Пихице и Ю. Л. Шошину за плодотворное обсуждение.

### ЛИТЕРАТУРА

1. **Altman I. S.** High-temperature estimation of energy accommodation coefficient of gas molecules on surface // *J. Phys. Studies*. 1999. V. 3, N 4. P. 456–457.
2. **Altman I. S.** On condensation growth of oxide particles during gas-phase combustion of metals // *Combust. Sci. Technol.* 2000. V. 160. P. 221–230.
3. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982.
4. **Mott N. F., Davis E. A.** *Electron Processes in Non-Crystalline Materials*. Oxford, Clarendon Press, 1979.
5. **Seeger K.** *Semiconductor Physics*. Wien: Springer-Verlag, 1973.
6. **Ziman J. M.** *Models of Disorder*. Cambridge: Cambridge University Press, 1979.
7. **Альтман И. С.** О теплообмене при конденсации продуктов газозафазного горения металлов // *Физика горения и взрыва* 1998. Т. 34, № 4. С. 49–51.

*Поступила в редакцию 20/X 2000 г.,  
в окончательном варианте — 5/II 2003 г.*