

———— 1. Függelék ————

A Köhler elmélet és parametrizációja

A Köhler egyenlet levezetése a Kelvin- és Raoult-egyenletekből, ideálisan híg oldat esetén:

$$s = \frac{e_s}{e_s^\circ} = \exp\left(\frac{4 \sigma_w M_w}{R T \rho_w d_{wet}}\right), \quad (1)$$

$$e_s = a_w e_s^\circ, \quad (2)$$

A 2. sz. egyenletből a síkfelületű tiszta víz gőznyomása:

$$e_s^\circ = \frac{e_s}{a_w}, \quad K1$$

Ezt az 1. sz. egyenletbe helyettesítve:

$$s = \frac{e_s}{\frac{e_s}{a_w}} = \exp\left(\frac{4 \sigma_w M_w}{R T \rho_w d_{wet}}\right), \quad K2$$

A kifejezést egyszerűsítve:

$$s = a_w \exp\left(\frac{4 \sigma_w M_w}{R T \rho_w d_{wet}}\right), \quad (3)$$

κ intuitív parametrizációja:

$$\frac{1}{a_w} = 1 + \kappa \frac{V_s}{V_w}, \quad (4)$$

ahol a_w a víz aktivitása, κ a higroszkopicitási paraméter, V_s a szilárd anyag térfogata, V_w a kondenzált víz térfogata.

Többkomponensű, egyensúlyi oldat-rendszerekben a Zdanovskii, Stokes és Robinson (ZSR) közelítést alkalmazva a részecskéken kondenzálódott víz össztérfogata felírható az egyes részecskéken kondenzálódott víz térfogatainak összegével:

$$V_w = \sum_i V_{w,i},$$

ahol V_w a kondenzálódott víz össztérfogata, $V_{w,i}$ az i -edik részecskén kondenzálódott víz térfogata.

Az egyes V_w térfogatokot a 4. sz. egyenlet átrendezésével, a ZSR közelítésből fakadó $a_{w,i} = a_w$ feltétel mellett kapjuk meg:

$$V_w = \frac{1}{\frac{1}{a_w} - 1} V_s \kappa, \quad K3$$

$$V_w = \frac{a_w}{1 - a_w} \sum_i V_{s,i} \kappa_i. \quad (5)$$

Tudjuk, hogy az aeroszol rendszer össztérfogata a száraz részecskék, valamint a víz össztérfogatának összege:

$$V_T = \sum_i V_{s,i} + \sum_i V_{w,i} = V_s + V_w. \quad K4$$

A száraz komponensek térfogat-aránya:

$$\varepsilon_i = \frac{V_{s,i}}{V_s}, \quad K5$$

A víz össztérfogata a K3 kiegészítő egyenlet alapján pedig:

$$V_w = V_T - V_s. \quad K6$$

A K5 és K6 kiegészítő egyenletek segítségével az 5. sz. egyenlet eképpen alakul:

$$V_w = V_T - V_s = \frac{a_w}{1-a_w} V_s \sum_i \varepsilon_i \kappa_i. \quad (6)$$

Vezessük be a térfogatekvivalens átmérőt:

$$d_{ekv} = \sqrt[3]{\frac{6 V_p}{\pi}}, \quad K7$$

$$d_{ekv}^3 = \frac{6 V_p}{\pi} \quad K8$$

$$V_p = \frac{\pi}{6} d_{ekv}^3. \quad (7)$$

A 6. sz. egyenletben a V_T -t és V_s -t fejezzük ki ekvivalens átmérőkkel a 7. sz. egyenlet szerint:

$$V_T - V_s = \frac{a_w}{1-a_w} V_s \sum_i \varepsilon_i \kappa_i,$$

$$\frac{\pi}{6} d_{T,ekv}^3 - \frac{\pi}{6} d_{S,ekv}^3 = \frac{a_w}{1-a_w} \frac{\pi}{6} d_{S,ekv}^3 \sum_i \varepsilon_i \kappa_i, \quad K9$$

$$\frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{S,ekv}^3} = \frac{a_w}{1-a_w} \sum_i \varepsilon_i \kappa_i. \quad K10$$

A szummás kifejezést egyszerűsítsük κ -ra:

$$\frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{S,ekv}^3} = \frac{a_w}{1-a_w} \kappa, \quad K11$$

majd oldjuk meg az egyenletet a vízaktivításra:

$$(1 - a_w) \frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{S,ekv}^3 \kappa} = a_w, \quad K12$$

$$\frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{S,ekv}^3 \kappa} - a_w \frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{S,ekv}^3 \kappa} = a_w, \quad K13$$

$$\frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{S,ekv}^3 \kappa} = a_w + a_w \frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{S,ekv}^3 \kappa}, \quad K14$$

$$\frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{S,ekv}^3 \kappa} = a_w \left(1 + \frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{S,ekv}^3 \kappa} \right), \quad K15$$

$$a_w = \frac{\frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{S,ekv}^3 \kappa}}{\frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{S,ekv}^3 \kappa} + 1}, \quad K16$$

$$a_w = \frac{\frac{(d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)(d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)}{d_{S,ekv}^3 \kappa (d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)}}{\frac{(d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)(d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)}{d_{S,ekv}^3 \kappa (d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)} + \frac{d_{S,ekv}^3 \kappa (d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)}{d_{S,ekv}^3 \kappa (d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)}}, \quad K17$$

$$a_w = \frac{\frac{(d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)^2}{d_{S,ekv}^3 \kappa (d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)}}{\frac{(d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)^2 + d_{S,ekv}^3 \kappa (d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)}{d_{S,ekv}^3 \kappa (d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)}}, \quad K18$$

$$a_w = \frac{(d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)^2}{(d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)^2 + d_{S,ekv}^3 \kappa (d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3)}, \quad K19$$

$$a_w = \frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3 + d_{S,ekv}^3 \kappa} = \frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{T,ekv}^3 + d_{S,ekv}^3 (\kappa - 1)} = \frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3 (1 - \kappa)}. \quad (8)$$

A 8. sz. egyenletet a 3. sz. egyenletbe visszaírva pedig:

$$s(d_{T,ekv}^3) = \frac{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3}{d_{T,ekv}^3 - d_{S,ekv}^3 (1 - \kappa)} \exp\left(\frac{4 \sigma_{sol} M_w}{R T \rho_w d_{wet}}\right), \quad K20$$

A K20 kiegészítő egyenlet megfontolásai:

$d_{T,ekv}$ – a már nedves cseppek összterfogatából származtatott nedves, vagy cseppátmérő (d_{wet})

$d_{S,ekv}$ – a száraz részecskék összterfogatából származtatott száraz átmérő (d_s)

Így a K20 kiegészítő egyenlet már egyértelműbben leírható

$$s(d_{wet}) = \frac{d_{wet}^3 - d_s^3}{d_{wet}^3 - d_s^3 (1 - \kappa)} \exp\left(\frac{4 \sigma_{sol} M_w}{R T \rho_w d_{wet}}\right). \quad (9)$$