Динамика адсорбции токсичных газов на частицах аэрозоля, распыленного импульсным способом

© О.Б. Кудряшова, А.Б. Ворожцов, В.А. Клименко

Национальный исследовательский Томский государственный университет,
634050 Томск, Россия
e-mail: olgakudr@inbox.ru

Поступило в Редакцию 29 апреля 2026 г.
В окончательной редакции 25 июня 2026 г.
Принято к публикации 23 октября 2026 г.

В связи с опасностью аварийных выбросов токсичных газов встает проблема их быстрой нейтрализации. Предложена математическая модель адсорбции токсичных веществ на частицах высокодисперсного аэрозоля, созданного импульсным способом, учитывающая изменение площади поверхности частиц. Получены зависимости концентрации токсичных газов от времени, учитывающие изменение площади поверхности аэрозольных частиц, и выявлены параметры, определяющие эффективность адсорбции.

Ключевые слова: высокодисперсный аэрозоль, импульсное распыление, поверхность частиц, концентрация газов, адсорбция.

DOI: 10.61011/JTF.2026.12.64056.269-26

Существует проблема быстрой очистки воздуха от выбросов токсичных веществ. Один из способов нейтрализации газовых выбросов — это мгновенная импульсная генерация высокодисперсного аэрозоля (диаметр Заутера $\sim 4-8\,\mu$m) на основе наноструктурированных частиц порошков (например, оксидов металлов). Импульсная генерация происходит за доли секунды при использовании специального устройства на основе энергии ВЭМ (пиротехнического заряда), после чего за 10–20 s облако аэрозоля заполняет пространство объемом $\sim 10-50\,\mathrm{m}^3$ [1]. Преимущество такого метода заключается в том, что частицы долго остаются в воздухе без полного осаждения и обладают высокой удельной поверхностью. Именно на поверхности частиц и в системе их нанопор происходит адсорбция токсичных газов.

Современные материалы для нейтрализации токсичных газов сочетают адсорбционные и каталитические свойства и обеспечивают высокую эффективность удаления загрязнителей из воздуха. Последний обзор [2] показывает, что современные материалы объединяют адсорбцию и каталитическое разрушение загрязнителей, демонстрируя высокую эффективность удаления ЛОС (летучих органических соединений) и других токсикантов. Этот обзор показывает развитие темы исследований различных сорбционных материалов для нейтрализации токсичных газов. Но недостаточно статей по адсорбции таких газов именно на распыленных частицах аэрозолей. Настоящая работа стремится преодолеть этот пробел.

Если рассматривать адсорбцию газов на частицах, то важнейшей характеристикой, влияющей на эффективность адсорбции газов, является площадь поверхности частиц. С уменьшением размеров частиц увеличивается площадь контакта, скорость массообмена и скорость сорбции. С ростом площади поверхности частиц увеличивается число активных центров и повышается емкость сорбции. Кроме того, высокодисперсные частицы дольше остаются в воздухе помещения, продолжая взаимодействовать с газами. В работе [1] получено выражение для изменения со временем суммарной площади поверхности частиц аэрозоля, полученных импульсным способом. Это выражение получено с учетом полидисперсности аэрозоля, осаждения на стенках и полу помещения, коагуляции частиц.

Цель настоящей работы — исследовать динамику адсорбции газов на частицах высокодисперсного аэрозоля, созданного импульсным методом, с учетом изменения площади поверхности частиц со временем.

Рассматривается камера кубической формы объема V, с характерным размером H (соответствует длине стороны камеры, высоте помещения). В этой камере импульсно за несколько секунд создается и равномерно распределяется облако аэрозоля с характерным диаметром частиц (диаметр Заутера) D_p и с начальной концентрацией C_0. Частицы аэрозоля коагулируют, осаждаются на стенках и дне; известна функция от времени суммарной площади поверхности частиц, доступной для адсорбции газов $S_p(t)$ [1]:

$$\frac{S_p(t)}{S_p(0)} = \exp\left(-\frac{2}{3}\gamma(D_p)t\right), \tag{1}$$

где γ — коэффициент скорости осаждения частиц, [1/s]: $\gamma(D_p) = \frac{\rho_p D_p^2}{18\mu H}g + \frac{\beta_0}{H}\frac{T}{\mu D_p}$, T — температура, ρ_p — плотность частицы, g — ускорение свободного падения, μ — динамическая вязкость воздуха, β_0 — свободный параметр модели. Пусть поток вещества на единицу поверхности $J(t)$. Тогда уменьшение концентрации газа [3,4]:

$$V\frac{dC}{dt} = -S_p(t)J(t). \tag{2}$$

При массообмене, ограниченном диффузией газа, поток к поверхности выразится как линейная функция

концентрации: $J = k_g(C - C_s)$, где k_g — коэффициент массообмена газ–поверхность, C_s — равновесная концентрация газа у поверхности. Задавая масштабы времени $1/\gamma$, масштаб концентрации C_0, масштаб площади поверхности S_0, уравнение (2) с учетом (1) запишем в безразмерном виде: $K\frac{dc}{d\tau} = \exp(-\tau)^{2/3}(c - c_s)$, где $c = C/C_0$, $s = S_p/S_p(0)$, $\tau = t\gamma$, безразмерный комплекс $K = V\gamma/(k_g S_p(0))$. Аналитическое решение

$$c = c_s - (c_s - 1)\exp\left[-\frac{3}{2K}\left(1 - e^{-2/3\tau}\right)\right]. \qquad (3)$$

При $\tau \to \infty$ $c_\infty = c_s - (c_s - 1)\exp\left(-\frac{3}{2K}\right)$.

Этот предел больше, чем c_s, из-за уменьшения площади поверхности частиц со временем. Более детально позволит рассмотреть физику процесса адсорбции учет динамики насыщения поверхности. Введем коэффициент насыщения поверхности $\theta(t)$, тогда для потока газа получим $J = \Gamma_{\max}(k_a C(1 - \theta) - k_d\theta)$, где $\Gamma_{\max}$ — максимальная поверхностная концентрация центров адсорбции, [g/m^2], k_a — константа адсорбции, [m^3/(g · s)], k_d — константа десорбции, [1/s]. Тогда концентрация газа определится системой уравнений [5], которую запишем в безразмерном виде

$$\begin{cases} K_1\frac{dc}{d\tau} = \exp(-\frac{2}{3}\tau)(K_{ad}c(1 - \theta) - \theta), \\ \frac{\gamma}{k_d}\frac{d\theta}{d\tau} = K_{ad}c(1 - \theta) - \theta, \end{cases} \qquad (4)$$

где безразмерный комплекс $K_1 = V\gamma C_0/(k_d\Gamma_{\max}S_p(0))$, безразмерная сила адсорбции $K_{ad} = k_a C_0/k_d$. Если поверхность далека от насыщения $-\theta \ll 1$, система (4) сводится к уравнению $K_2\frac{dc}{d\tau} = \exp(-\tau)^{2/3}c$, где $K_2 = K_1/K_{ad}$. Решение уравнения имеет вид

$$c = \exp\left[-\frac{3}{2K_2}\left(1 - e^{-2/3\tau}\right)\right]. \qquad (5)$$

Таким образом, мы имеем уравнения, определяющие динамику адсорбции газа на частицах аэрозоля, и безразмерные комплексы, от которых зависит этот процесс. В первую очередь, проверим адекватность модели (3) сравнением с экспериментом [6]. В этой работе в камере, заполненной газом (например, хлороформ, гексан) импульсным способом распылялся порошок оксида металла (например, оксид титана, железа, цинка). Измерялась дисперсность и концентрация частиц в воздухе, и концентрация паров газов в зависимости от времени. На рис. 1 показана динамика изменения относительной концентрации гексана при поглощении его частицами оксида титана. Расчетная кривая хорошо описывает набор экспериментальных точек при $K = 1.2$, $c_s = 0.5$ (достоверность аппроксимации 78 %). Значения параметров K и c_s определялись путем подбора по экспериментальным данным [6] из условия наилучшего согласия расчетной и экспериментальной зависимостей. Аналогичным образом в эксперименте ведут себя данные для других частиц оксидов металлов и других газов. Если не учитывать уменьшение площади поверхности частиц за

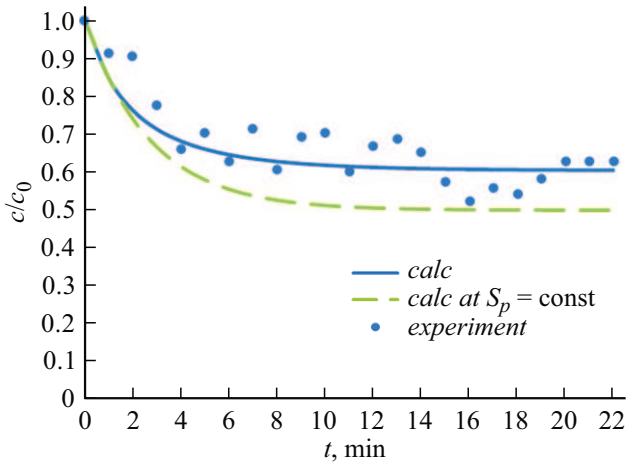


Рис. 1. Относительная концентрация гексана при адсорбции на частицах диоксида титана (диаметр Заутера 4.4 μm, $K = 1.2$, $c_s = 0.5$): точки — эксперимент, кривые — расчет.

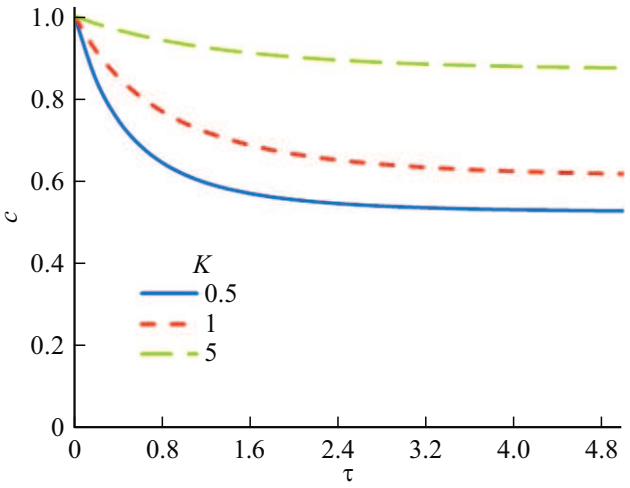


Рис. 2. Зависимость относительной концентрации газа от безразмерного времени при разных значениях параметра K, $c_s = 0.5$.

время эксперимента, то кривая динамики концентрации газа прошла бы ниже (пунктирная кривая на рис. 1), т. е. адсорбция прошла бы более полно. Поэтому учет изменения площади поверхности частиц в данной задаче важен.

Масштабировать полученные результаты позволит анализ выявленных безразмерных параметров и их влияние на динамику адсорбции. В модели (4) имеется два параметра: K и c_s. Чем больше K, тем быстрее уменьшается полезная площадь поверхности частиц, и адсорбция происходит медленнее (рис. 2). Относительная равновесная концентрация газа у поверхности частиц c_s показывает возможности адсорбции газа и определяет предельный уровень нейтрализации. Чем меньше c_s и чем меньше K, тем до более низких значений опустится концентрация газа в пределе при

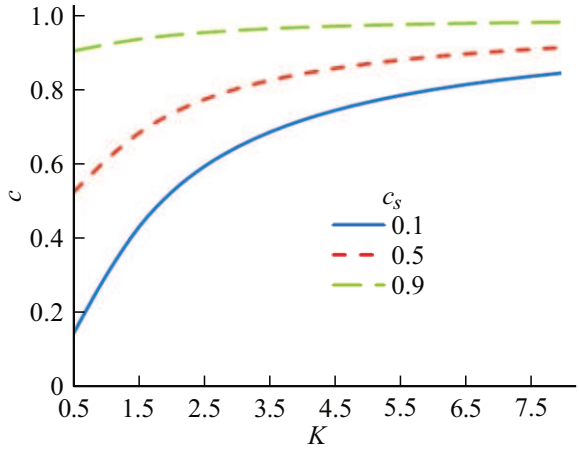


Рис. 3. Зависимость предельной относительной концентрации газа от параметра K при разых значениях c_s.

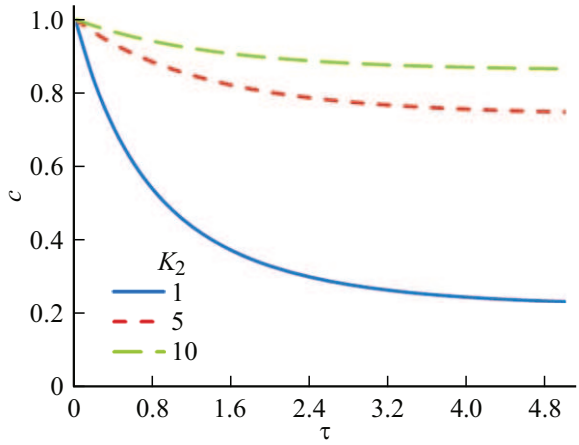


Рис. 4. Зависимость относительной концентрации газа от безразмерного времени для поверхности частиц, далекой от насыщения, при разных значениях параметра K_2.

$\tau \to \infty$ (рис. 3). В условиях, когда поверхность частиц далека от насыщения, динамика уменьшения концентрации газа определяется безразмерным комплексом K_2 (уравнение (5), рис. 4). Чем меньше этот параметр (выше сила адсорбции), тем быстрее и более полно адсорбируется газ на частицах аэрозоля.

Таким образом, разработана математическая модель адсорбции токсичных газов на частицах высокодисперсного аэрозоля, распыленного импульсным способом. Особенностью модели является учет изменения суммарной площади поверхности частиц во времени вследствие их коагуляции и осаждения, что позволяет описывать снижение адсорбционной способности аэрозоля в процессе его существования. Получены аналитические зависимости концентрации газа от времени, и выявлены определяющие безразмерные комплексы, характеризующие влияние массообмена, адсорбционных свойств системы и динамики изменения поверхности частиц на эффективность очистки воздуха. Показано удовлетворительное согласие модели с экспериментальными данными.

Финансирование работы

Исследование проводилось при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-607 от 01.07.2025).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] О.Б. Кудряшова, А.Б. Ворожцов. Письма в ЖТФ, **50** (24), 6 (2024). DOI: 10.61011/PJTF.2024.24.59427.6260k
[2] A. Talaie, M.A. Fulazzaky, S. Rezania, A. Tamadon. Environ. Sci.: Atmospheres, **6**, 27 (2026). DOI: 10.1039/d5ea00079c
[3] W.C. Hinds, Y. Zhu. *Aerosol technology: properties, behavior, and measurement of airborne particles* (John Wiley & Sons, 2022)
[4] R.B. Bird. Appl. Mech. Rev., **55** (1), R1 (2002). DOI: 10.1115/1.1424298
[5] J. Rouquerol, F. Rouquerol, P. Llewellyn, G. Maurin, K. Sing. *Adsorption by powders and porous solids: principles, methodology and applications* (Academic press, 2013)
[6] О.И. Гаенко, О.Б. Кудряшова, С.С. Титов, В.А. Клименко, Е.В. Муравлев, И.Б. Букреев, С.Д. Соколов. Изв. вузов. Физика, **68** (11), 109 (2025). DOI: 10.17223/00213411/68/11/13