

01;03

Термофорез и броуновская диффузия наночастиц в проточном реакторе

© С.П. Фисенко, Ю.А. Ходыко

Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Белоруссии,
220072 Минск, Белоруссия
e-mail: fsp@hmti.ac.by

(Поступило в Редакцию 12 апреля 2011 г.)

Теоретически исследовано влияние термофореза и броуновской диффузии на осаждение наночастиц из ламинарного газового потока на адсорбирующие стенки проточного реактора. Найдены два критерия подобия, характеризующие процесс осаждения наночастиц в неизотермических условиях. Показано, что влияние термофореза существенно лишь на входном участке реактора, в то время как броуновская диффузия действует на всей его длине. Для описания взаимодействия газового потока с наночастицами использовано свободномолекулярное приближение. Приведены результаты численных расчетов.

Введение

Процессы переноса наночастиц в газовых потоках в каналах (реакторах) рассматривались исследователями на протяжении последнего столетия, но особенно активно в последнее время. В частности, исследовалось влияние броуновской диффузии наночастиц на процессы осаждения наночастиц на стенки каналов [1–9 и ссылки в них]. В то же время публикаций о броуновском движении наночастиц в неизотермических газовых потоках в проточных реакторах существенно меньше, хотя интерес к этой задаче велик. Несомненно, это связано со сложностью теоретического исследования броуновского движения в температурно-неоднородной среде. Практический интерес связан с возможностью управления движением и осаждением наночастиц [3,6–9] за счет изменения температуры стенки реактора.

Цель настоящей работы — исследовать с помощью методов математического моделирования влияние термофореза и броуновской диффузии на осаждение наночастиц в проточном цилиндрическом реакторе. В первой части работы изложена математическая модель явления, а также используемые гидродинамические и теплофизические приближения. Во второй части по методу Галеркина проведен качественный анализ уравнений модели и получены два критерия подобия задачи. В третьей части приведены результаты численного решения уравнений модели. В заключение обсуждаются основные результаты работы.

1. Математическая модель

Система уравнений, описывающая броуновское движение и термофорез наночастиц в неизотермическом ламинарном газовом потоке в цилиндрическом реакторе, включает в себя уравнение для средней скорости $u(r, z)$,

которое будем определять из уравнения

$$u(z) = u_0 \frac{T(z)}{T_0}, \quad (1)$$

где $T(z)$ — средняя по сечению температура газа на расстоянии z от входа в реактор. Фактически уравнение (1) представляет собой уравнение неразрывности в интегральной форме. Профиль скорости в реакторе с достаточно высокой точностью описывается профилем Пуазейля с изменяющейся средней скоростью (1).

Уравнение для расчета поля температуры газового потока $T(r, z)$ в реакторе представляет собой уравнение конвективной теплопроводности

$$u(r, z) \frac{\partial T(r, z)}{\partial z} = \frac{1}{r\rho c} \frac{\partial}{\partial r} \left[\lambda(T(r, z)) r \frac{\partial T(r, z)}{\partial r} \right], \quad (2)$$

где λ — коэффициент теплопроводности газового потока, зависящий от локальной температуры газа, ρ и c — массовая плотность и удельная теплоемкость газа. Ось z направлена вдоль оси потока.

Уравнение для расчета числовой плотности наночастиц $n(r, z)$ с учетом броуновской диффузии и термофореза в неизотермической газовой среде до сих пор является предметом научной дискуссии. В частности, для точечной частицы в работах [7,8 и ссылки в них] с помощью методов неравновесной статистической механики выведено, что в диффузионный поток наночастиц дают вклад два члена: первый член описывает броуновскую диффузию, а второй член описывает термодиффузию, связанную с вкладом градиента температур. Кинетический анализ такого подхода дан в работе [9]. Заметим, что анализ неизотермического броуновского движения наночастиц, сделанный с помощью методов статистической физики, справедлив только для малых градиентов температуры.

В настоящей работе исследуется двумерное уравнение конвективной диффузии наночастиц, справедливое для их малых концентраций и в явном виде учитывающее

термофорез наночастиц для больших градиентов температуры:

$$\frac{\partial(u(r, z)n(r, z))}{\partial z} + v_{tr} \frac{\partial n(r, z)}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[D_b(T(r, z)) r \frac{\partial n(r, z)}{\partial r} \right], \quad (3)$$

где D_b — коэффициент броуновской диффузии, рассчитанный в свободномолекулярном приближении. В свободномолекулярном режиме скорость термофореза v_{tr} сферической наночастицы выражается формулой [10] и зависит от аксиальной и радиальной координат

$$v_{tr} = -\frac{3}{4} \frac{\eta \nabla T}{\rho T} = -K \nabla T,$$

где η — динамическая вязкость газа, зависящая от температуры.

Учитывая соотношение Эйнштейна, коэффициент броуновской диффузии D_b в свободномолекулярном режиме можно представить в виде [11]

$$D_b = kT(r, z)b,$$

при этом подвижность наночастицы b нелинейно зависит от локальной температуры и обратно пропорциональна квадрату радиуса наночастицы R_n :

$$b = \frac{3}{16\pi R_n^2 P} \left(\frac{2\pi kT}{m} \right)^{0.5},$$

где P — общее давление в системе, m — масса молекулы газа. Влияние массы молекул газа на изотермическую броуновскую диффузию наночастиц рассмотрено в работах [2,4,5]. Обратим внимание, что из приведенных выше формул следует, что свойства материала частицы не влияют ни на скорость термофореза, ни на коэффициент броуновской диффузии. Экспериментально эта закономерность была подтверждена в работах [5,6].

Предполагаем также, что при столкновении со стенкой реактора наночастица остается на ней и на стенке реактора температура газа совпадает с температурой стенки (режим сплошной среды для взаимодействия газового потока со стенками реактора). Тогда граничные условия к системе уравнений (1)–(3) формально выражаются соотношениями

$$n(R, z) = 0, \quad (4)$$

$$T(R, z) = T_w. \quad (5)$$

Результаты исследования более общих граничных условий будут представлены в отдельной работе.

Условия цилиндрической симметрии задачи выражаются двумя соотношениями

$$\frac{\partial T(0, z)}{\partial r} = \frac{\partial n(0, z)}{\partial r} = 0. \quad (6)$$

В работе рассматриваются простейшие, однако отражающие условия реальных экспериментов начальные условия: распределение наночастиц, входящих в реактор, по сечению равномерно

$$n(r, 0) = \text{const}, \quad (7)$$

температура потока одинакова по сечению и отличается от температуры стенок

$$T(r, 0) = T_0.$$

Отметим, что другие начальные условия, относящиеся к распределению наночастиц на входе в реактор, были рассмотрены в [2]. Прежде чем переходить к численным расчетам, сделаем качественные оценки броуновской диффузии и термофореза наночастиц [12,13].

2. Качественные оценки

Для определенности будем рассматривать случай, когда температура стенки реактора выше температуры входящего потока. На входе в реактор в газовом потоке возникает градиент температуры, который затем затухает по мере прогрева всего потока. Напомним, что скорость термофореза v_{tr} наночастиц прямо пропорциональна величине градиента температуры в газе. В нашем случае термофорез сдвигает наночастицы в центральную часть потока. Другими словами, термофорез деформирует начальное распределение наночастиц, которое броуновское движение стремится привести к равновесному термодинамическому распределению.

Рассмотрим вначале влияние броуновской диффузии наночастиц отдельно. Из анализа левой и правой частей уравнения (3) следует, что если выполняется неравенство для критерия A

$$A = \frac{D_b L}{R^2 u_0} \geq 1, \quad (8)$$

где L — длина, R — радиус реактора, то осаждение наночастиц на стенку из-за влияния броуновского движения является существенным фактором. Используя понятие характерной длины броуновского осаждения наночастиц в изотермическом потоке в цилиндрическом реакторе l_b [2,4]:

$$l_b \approx \frac{4R^2 u_0}{\pi^2 D_b}, \quad (9)$$

условие (8) можно записать в виде

$$\frac{L}{l_b} \geq 1.$$

Другими словами, реактор должен быть относительно длинным для проявления влияния броуновской диффузии на осаждение наночастиц.

Анализ уравнения конвективной теплопроводности (2) с помощью метода Галеркина показывает, что

характерная длина изменения поля температуры l_t в ламинарном течении в цилиндрическом реакторе задается выражением [14]

$$l_t = \frac{0.26u_0R^2\rho c}{\lambda(T_w)}, \quad (10)$$

где λ — теплопроводность газа. При этом разность температур между газовым потоком и стенкой убывает по экспоненциальному закону $\sim \exp[-z/l_t]$ вдоль оси реактора. На характерной длине l_t существует градиент температуры и, естественно, нужно учитывать влияние термофореза на движение наночастиц в направлении, поперечном к оси реактора. Как следует из анализа левой части уравнения (3), если выполняется неравенство для критерия B

$$B = \frac{v_{tr}l_t}{Ru_0} \sim 1, \quad (11)$$

то влияние термофореза на положение наночастиц в потоке существенно. Отметим также на основе выражения (10), что критерий B не зависит от скорости газового потока.

Следуя работам [2,4], в стационарном режиме доля наночастиц $\gamma(L)$, осевших на стенку реактора L , вычисляется с помощью выражения

$$\gamma(L) = \frac{\int_0^R [u(0, r)n(0, r) - u(L, r)n(L, r)] r dr}{\int_0^R u(0, r)[n(0, r)] r dr}. \quad (12)$$

Заметим, что выражение (12) учитывает как изменение скорости потока при изменении его температуры, так и изменение распределения наночастиц в силу термофореза и броуновской диффузии. В приближении изотермического течения этот параметр совпадает с коэффициентом, введенным в [5,6], и приближенно может быть представлен в виде отношения средних плотностей наночастиц в начале и в конце пути. При этом коэффициент пропускания реактором стационарного потока наночастиц определяется параметром $1-\gamma(L)$.

Для более детального анализа совместного влияния броуновского движения и термофореза на движение наночастиц в проточном цилиндрическом реакторе применим метод Галеркина [15]. Будем искать приближенное решение для поля температуры в реакторе в виде

$$T(r, z) = T_w + A_t(z)J_0(br/R), \quad (13)$$

где J_0 — функция Бесселя нулевого порядка, b — наименьший положительный корень уравнения $J_0(b) = 0$, как известно, $b \approx 2.48$. Выражение (13) точно удовлетворяет граничным условиям (6), что существенно повышает точность метода Галеркина. Можно показать, что решение обыкновенного дифференциального уравнения для функции A_t имеет вид

$$A_t(z) \sim \exp\left[-\frac{k_1}{k_0}z\right],$$

где коэффициенты k_1 и k_0 представлены ниже в виде интегралов. Приближенное численное вычисление этих интегралов дает

$$k_0 = u_0R^2 \int_0^1 t(1-t^2)J_0^2(bt)dt \approx 0.1u_0R^2,$$

$$k_1 = b^2 \int_0^1 \frac{\lambda(T(r))}{\rho(T(r)c)} tJ_1^2(bt)dt \approx 0.13 \frac{b^2\lambda(T_w)}{\rho(T_w)c},$$

где J_1 — функция Бесселя первого порядка. Отметим, что характерная длина теплообмена в реакторе l_t вычисляется как отношение этих интегралов $l_t = k_0/k_1$.

Итак, поле температуры в неизотермическом проточном реакторе приближенно описывается следующим выражением:

$$T(r, z) \approx T_w + (T_0 - T_w)J_0(br/R) \exp(-z/l_t). \quad (14)$$

Видно, что в реакторе температура потока экспоненциально стремится к температуре стенки, при этом темп нагрева существенно зависит от радиальной координаты. Для качественного анализа считаем дальше, что перепад температур достаточно небольшой, так что можно пренебречь изменением скорости газового потока.

С учетом выражения (14) скорость термофореза наночастицы в потоке приближенно представляется как

$$v_{tr} = -k\nabla T \approx K \exp(-z/l_t)(T_0 - T_w) \frac{b}{R} J_1(br/R). \quad (15)$$

Как следует из (15), на оси реактора скорость термофореза равна нулю и экспоненциально убывает по мере удаления от входа газового потока в реактор с характерным пространственным масштабом l_t .

Для анализа взаимовлияния броуновской диффузии и термофореза на осаждение наночастиц ищем приближенное решение уравнение конвективной диффузии наночастиц (3) в виде $n(r, z) \approx A_n(z)J_0(br/R)$.

Можно показать, что в рамках принятых приближений для функции $A_n(z)$ получается следующее обыкновенное дифференциальное уравнение:

$$k_0 \frac{dA_n}{dz} = -A_n[k_2 + k_3], \quad (16)$$

где коэффициенты k_i имеют вид интегралов по радиальной переменной. После их приближенного численного вычисления получаем

$$k_3 = D_b(T_w) \int_0^1 tJ_1^2(bt)dt \approx 0.13D_b(T_w), \quad (17)$$

$$k_2 = \frac{KR \exp(-z/l_t)(T_0 - T_w)}{b} \int_0^1 tJ_1^2(bt)J_0(br)dt \approx 0.046 \frac{KR \exp(-z/l_t)(T_0 - T_w)}{b}. \quad (18)$$

Интегрирование дифференциального уравнения (16) с учетом зависимости k_2 от z дает формулу с двойной экспонентой, которая учитывает влияние термофореза

$$A_n(t) = A_n(0) \exp\left[-\frac{k_3}{k_0} z\right] \times \exp\left[\frac{0.023KR \exp(-z/l_t)(T_0 - T_w)\rho(T_w)c}{\lambda(T_w)}\right].$$

После подстановки полученных выше формул искомого выражение для $n(r, z)$ имеет вид

$$n(r, z) = A_n(0)J_0(br/R) \exp\left[-\frac{z}{l_b}\right] \times \exp\left[\frac{0.023KR \exp(-z/l_t)(T_0 - T_w)\rho(T_w)c}{\lambda(T_w)}\right]. \quad (19)$$

Из выражения (19) следует, что характерная длина осаждения наночастиц l_b под действием броуновской диффузии может быть представлена как (см. также [2–4])

$$l_b = \frac{k_3}{k_2} = 0.23 \frac{u_0 R^2}{D_b(T_w)}. \quad (20)$$

В частности, при температуре стенки реактора $T_w = 583$ К, $R = 6.5$ мм и $u_0 = 0.5$ м/с, $l_b = 1.95$ м и $l_t = 0.008$ м. Как следует из (19), в зависимости от соотношения между температурами потока и стенки термофорез может усиливать или ослаблять осаждение наночастиц. Ослабление осаждения имеет место в том случае, когда температура стенки существенно выше температуры газового потока, входящего в достаточно короткий реактор. В рамках принятого приближения, когда проводится учет только одного члена при разложении по функциям Бесселя нулевого порядка, достаточно точно отразить изменение распределения наночастиц в радиальном сечении невозможно, и для полного учета влияния термофореза необходимо учитывать существенно больше членов разложения. Однако для более аккуратного анализа разумно использовать численные методы.

В изотермическом приближении интегральный параметр γ приближенно выражается как

$$\gamma(L) = 1 - \exp\left[-\frac{L}{l_b}\right]. \quad (21)$$

Для достаточно длинных реакторов, когда $L > l_b$, как показало сравнение с экспериментальными данными [4], выражение (21) обеспечивает достаточно высокую точность.

Как уже отмечалось, для проведения полного теоретического исследования взаимодействия броуновского движения и термофореза при неизотермическом течении в реакторе необходимо использовать методы численного моделирования. Отметим, что это взаимодействие было исследовано для плоского течения в работе [3], для цилиндрического реактора некоторые численные результаты представлены в следующем разделе.

3. Результаты расчетов

Система уравнений (1)–(3) с граничными условиями (4)–(6) и начальными условиями (7) решалась по методу прямых [16] в среде Mathcad. Метод прямых позволяет свести систему уравнений в частных производных к системе обыкновенных дифференциальных уравнений за счет конечно-разностного представления правых частей уравнений.

На рис. 1, а показаны результаты расчета броуновского осаждения наночастиц в зависимости от длины цилиндрического реактора. Начальная температура потока 283 К, температура стенки реактора 313 К, общее давление в реакторе $6 \cdot 10^3$ Па, начальная средняя скорость потока $u_0 = 0.5$ м/с, диаметр канала 13 мм, радиус наночастиц равен 5 нм. Как видно из графиков, наночастицы, вошедшие в реактор в непосредственной близости от стенки, под действием броуновской диффузии быстро оседают в ней. При этом экспоненциальная зависимость числовой плотности наночастиц от пройденного пути очевидна. Отметим, что длина реактора соответствует длине реактора в экспериментах, описанных в [6]. При

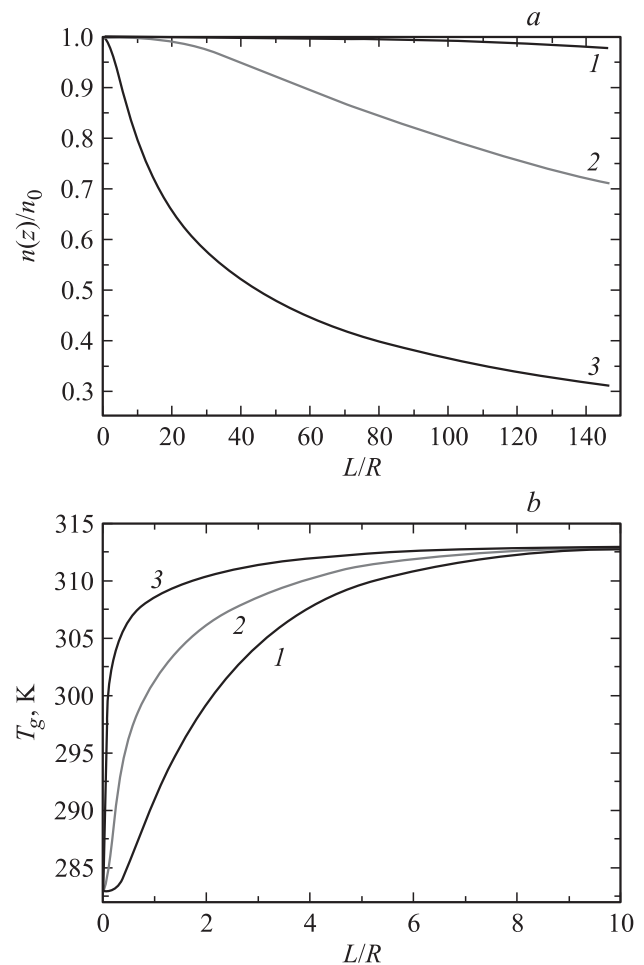


Рис. 1. Безразмерная числовая плотность наночастиц вдоль реактора (а): 1 — 0.4, 2 — 0.7, 3 — 0.9 R; изменение температуры газового потока (б): 1 — 0.4, 2 — 0.7, 3 — 0.9 R.

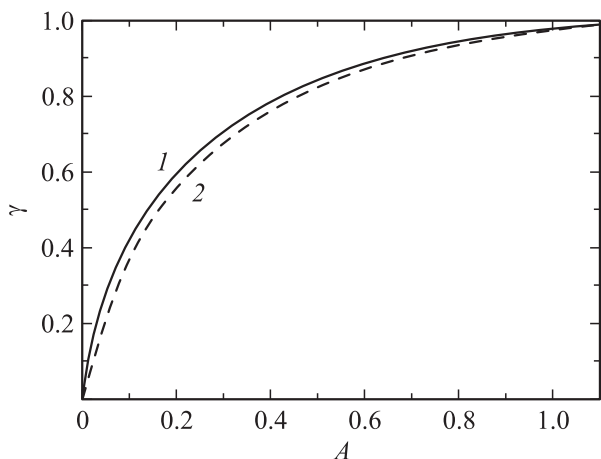


Рис. 2. Доля наночастиц, осевших на стенке реактора, от критерия A : 1 — изотермическая задача, 2 — стенка горячего входящего потока на 30 К.

этом значения безразмерных параметров подобия, введенных выше, соответственно равны $A \approx 0.05$, $B \approx 0.01$. Доля осевших наночастиц на пути $150 R$ составляет $\gamma(150 R) = 0.24$.

Для тех же условий на рис. 1, *b* показано изменение температуры газового потока на входном участке реактора. Видно, что скорость изменения температуры намного выше, чем скорость изменения числовой плотности наночастиц.

На рис. 2 показана доля наночастиц, осевших на стенку реактора длиной $150 R$. Кривая 1 описывает изотермический случай. Заметим, что кривая 1 с хорошей точностью описывается выражением $1 - \exp(-4A)$, полученным с помощью метода Галеркина. Кривая 2 описывает влияние на осаждение наночастиц как броуновской диффузии, так и термофореза. Причем во всех вариантах расчета температура стенки выше начальной температуры потока на 30 К. В начальный момент времени градиент температуры равен 4000 К/м. Видно, что термофорез с таким направлением градиента температуры уменьшает осаждение наночастиц, хотя эффект достаточно маленький, всего несколько процентов. Таким образом, можно утверждать, что критерий A с высокой точностью описывает изотермическое броуновское осаждение наночастиц. Напомним, что, согласно выражению (8), критерий A от параметров задачи зависит следующим образом:

$$A \sim \frac{T^{0.5}}{R^2 R_n^2 P u_0}$$

Для неизотермического осаждения, когда температура стенки выше температуры входящего потока на 30 К, термофорез уменьшает осаждение наночастиц (критерии подобия равны соответственно $B \sim 5 \cdot 10^{-3}$ и $A \sim 0.1$). Важно отметить, что отрицательное влияние термофореза на эффективность осаждения наночастиц идет также за счет сокращения резидентного времени,

так как при нагревании возрастают скорость потока, а также величина коэффициента броуновской диффузии наночастиц. Этот эффект частично компенсирует влияние термофореза на начальном участке реактора.

Так как поток наночастиц на стенку прямо пропорционален величине коэффициента броуновской диффузии при температуре стенки (см. выражения (8) и (17)), то интенсивность осаждения обратно пропорциональна общему давлению в системе. Видно, что этот качественный вывод подтверждается данными, показанными на рис. 3. Расчет проведен для изотермического случая (температура 700 К) для наночастиц с радиусом 5 нм.

На рис. 4 показаны результаты численного решения задачи о неизотермическом броуновском осаждении сферических наночастиц для различных температур стенки цилиндрического реактора. При этом во всех вариантах расчета температура входящего в реактор газового потока равна 500 К, общее давление $6 \cdot 10^3$ Па, длина реактора $L = 1.1$ м. В изотермическом приближении

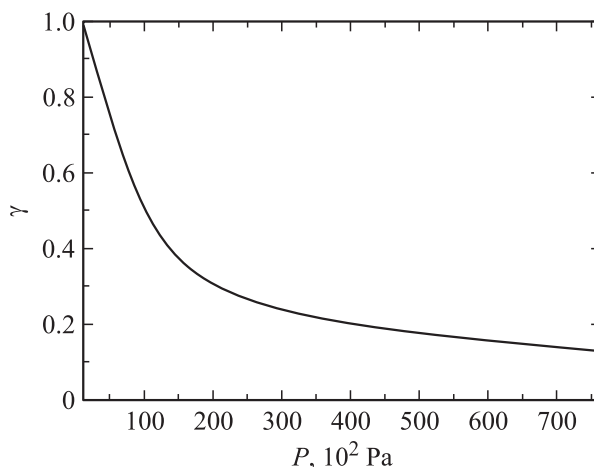


Рис. 3. Доля осевших частиц при различном давлении в реакторе.

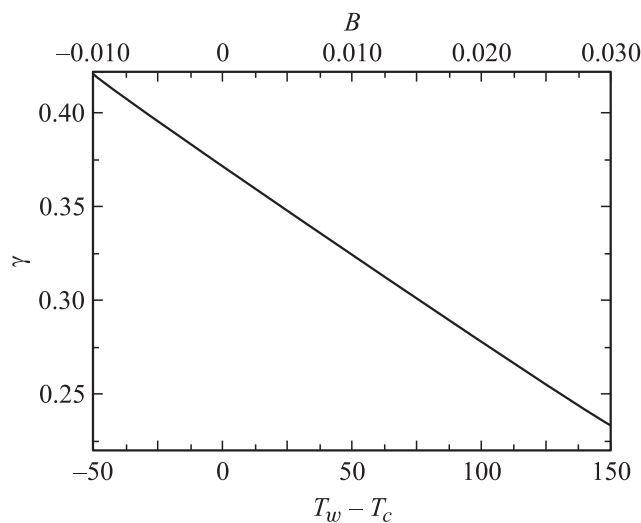


Рис. 4. Влияние разности температур на степень осаждения.

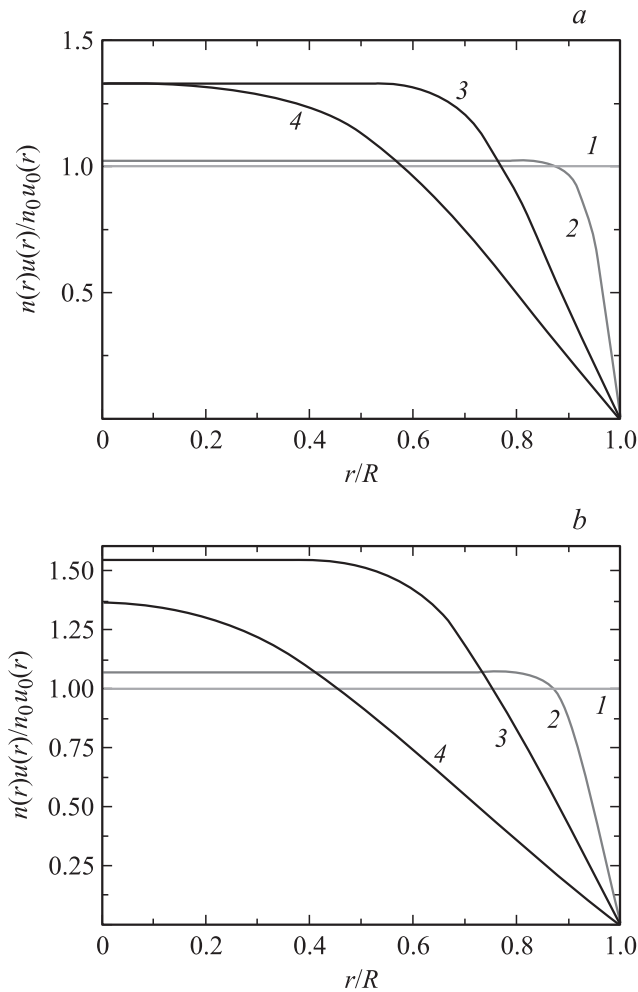


Рис. 5. *a* — относительная радиальная плотность наночастиц: 1 — на входе в реактор, 2 — на расстоянии $0.025 R$ от входа, 3 — на расстоянии $15 R$, 4 — на выходе из реактора длиной $146 R$. Критерии $A = 0.075$, $B = 0.033$. *b* — то же, что на (*a*). Критерий: $A = 0.17$, $B = 0.12$. Температура стенки $700 K$.

параметр $A = 0.1$ и параметр $\gamma = 0.37$. Как видно из результатов расчета, термофорез существенно изменяет степень осаждения наночастиц. Если стенка холоднее входящего потока, то термофорез усиливает броуновское осаждение наночастиц на стенки реактора (см. также выражение (21)). Если температура стенок реактора выше начальной температуры потока, то деформация начального распределения наночастиц достаточно велика. Отметим, что для этого случая на расстоянии примерно $16 R$ от входа в реактор газовый поток полностью прогревается. Влияние термофоретической силы исчезает, и на положение наночастиц влияет только броуновская диффузия.

На рис. 5, *a* показано распределение параметра $n(z, r)u(z, r)/n_0u_0(0, r)$, т.е. фактически радиальной плотности потока наночастиц, нормированное на входное значение. Расчеты сделаны для следующих условий: температура стенки реактора $400 K$, начальная

температура газового потока $300 K$, давление $6 \cdot 10^3 Pa$ (типичного давления в реакторах для получения наночастиц). Кривая 2 показывает начало деформации распределения наночастиц под действием термофореза и снос наночастиц в центральную зону, а также учитывает увеличение скорости потока при его нагреве. После выравнивания поля температуры изотермическая броуновская диффузия уменьшает число наночастиц в потоке за счет осаждения (кривые 3 и 4).

Как уже отмечалось, при более высоких значениях критерия A (например, при более высоких температурах) броуновская диффузия играет более важную роль. На рис. 5, *b* показана эволюция распределения параметра $n(z, r)u(z, r)/n_0u_0(0, r)$ при других значениях параметров подобия, для которых $\gamma(L) = 0.18$. Деформация потока наночастиц в начале реактора под действием термофореза очевидна. После выравнивания температуры в газовом потоке затем идет более интенсивное осаждение наночастиц под действием броуновской диффузии (кривая 3 и 4), что затрагивает даже осевую часть потока.

К сожалению, авторы не нашли результатов экспериментов, полностью отвечающих нашей постановке задачи о взаимодействии термофореза и броуновской диффузии наночастиц. Отметим, что в работе [5] использовался неоднородно нагретый реактор на длине $30 cm$, при этом общая длина реактора $1.1 m$, его внутренний диаметр $13 mm$, средняя скорость на входе в реактор изменялась в диапазоне $3.8 \cdot 10^{-2} - 2.5 \cdot 10^{-1} m/s$. Температура газа на входе в реактор комнатная. Число наночастиц в единице объема порядка $10^{11} - 10^{13} m^{-3}$. Измерения показали, что общая оценка прохождения наночастиц через реактор $(1-\gamma)$ лежит в интервале $0.7 - 0.9$, возрастая при увеличении диаметра наночастицы, что может быть объяснено уменьшением коэффициента броуновской диффузии. При увеличении температуры стенки реактора коэффициент пропускания уменьшался с 0.8 до 0.6 , другими словами, увеличивалось осаждение наночастиц. Как видно из анализа наших результатов (рис. 4) и данных [5], это связано в первую очередь с влиянием термофореза. В реакторе, использованном в экспериментах [5], на значительной части его длины термофорез способствовал осаждению наночастиц, в то время как броуновское движение мешало этому осаждению.

4. Обсуждение результатов

В работе исследовано взаимодействие броуновской диффузии и термофореза наночастиц в газовом потоке с переменным градиентом температуры. В качестве примера рассмотрены броуновская диффузия и термофорез сферических наночастиц в ламинарном потоке, входящем в проточный цилиндрический реактор. Если температура стенок реактора отличается от температуры газа, то возникает градиента температуры и, следовательно, термофорез наночастиц. Математическая модель этих

процессов включает двумерное уравнение конвективной теплопроводности и двумерное уравнение конвективной диффузии наночастиц, а также уравнение неразрывности для газового потока в интегральной форме. Для описания взаимовлияния процессов броуновской диффузии и термодиффузии в рамках этой модели показано, что существуют два независимых критерия подобия: A , B (выражения (8) и (11)). Заметим, что броуновская диффузия наночастиц и их термофорез рассматриваются только в свободномолекулярном приближении.

Показано, что в изотермическом режиме для описания эффективности осаждения наночастиц под действием броуновской диффузии достаточно одного критерия A . Этот вывод согласуется с нашими предыдущими результатами [2]. При увеличении параметра A увеличивается степень осаждения наночастиц γ (см. рис. 2). Численные расчеты и приближенные аналитические вычисления показали, что броуновское осаждение наночастиц действует эффективно, если длина канала L больше характерной длины броуновского осаждения l_b (см. выражение (20)). Так, при $L \gg l_b$ происходит полное осаждение частиц на стенках канала (см. выражение (21)).

В неизотермическом режиме, когда температура стенки отличается от начальной температуры потока, термофорез действует более эффективно на наночастицы, чем броуновская диффузия, и искажает функцию распределения наночастиц по радиальной координате. В ходе расчетов обнаружено, что если параметр $|B| < 2 \cdot 10^{-3}$, то вклад термофореза не превышает несколько процентов от величины γ . Результаты показывают, что действие термофореза существенно на начальном участке проточного реактора, где возникает градиент температуры и который затем экспоненциально затухает. Таким образом, с инженерной точки зрения для подавления осаждения на стенках реактора необходимо либо увеличивать скорость газового потока (критерий A), либо увеличить диаметр канала (см. критерии A и B и рис. 2 и 4).

Отметим, что существует качественная аналогия рассмотренной проблемы о неизотермической броуновской диффузии с задачей о броуновской диффузии и дрейфе заряженных наночастиц в проточном реакторе с приложенным внешним электрическим полем [17].

Несомненно, существуют качественные аналогии между броуновской диффузией наночастиц в газе и жидкости. Отметим, что в жидкости термофорез намного слабее и доминирует броуновская диффузия наночастиц. В частности, радиальные профили наночастиц в канале, полученные в [18], могут быть качественно объяснены с помощью броуновской диффузии наночастиц на стенку и осаждением на ней.

В газовом потоке при отклонении наночастиц от сферической формы возникают вращательное движение и вращательное броуновское движение наночастиц. Эти явления могут существенно изменить картину их осаждения. Теоретическое описание таких явлений требует изменений использованного математического аппарата.

Работа в этом направлении представляется важной и актуальной.

Работа частично финансировалась грантом Белорусского фонда фундаментальных исследований, грант Т10Р-028.

Список литературы

- [1] Madler L., Friedlander S.K. // Aerosol and Air Quality Research. 2007. Vol. 7. N 3. P. 304–342.
- [2] Бринь А.А., Фисенко С.П., Шнип А.И. // ЖТФ. 2008. Т. 78. Вып. 9. С. 41–45.
- [3] Fisenko S.P., Shnip A.I. Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures / Ed. by V.E. Gaponenko, V.S. Gurin Singapore: World Scientific, 2003. P. 291–293.
- [4] Фисенко С.П. // Инженерно-физический журн. 2010. Т. 83. № 1. С. 11–14.
- [5] Shimada M., Seto T., Okuyama K. // J. of American Ins. of Chem. Eng. 1993. Vol. 39. N 11. P. 1859–1869.
- [6] Shimada M., Seto T., Okuyama K. // Japanese J. of Appl. Physics. 1994. Vol. 33. Pt. 1. N 2. P. 1174–1181.
- [7] Zubarev D.N., Bashkurov A.G. // Physica A. 1968. Vol. 39. P. 334–340.
- [8] Башкуров А.Г. // Теор. и мат. физ. 1981. Т. 49. № 1. С. 149–144.
- [9] Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л. // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 8. С. 49–52.
- [10] Talbot L., Cheng R.K., Schaefer R.W., Willis D.R. // J. Fluid. Mech. 1980. Vol. 101. P. 737–758.
- [11] Kubo R. Statistical Mechanics. Amsterdam: North-Holland Publishing Co., 1965.
- [12] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: Наука, 1980.
- [13] Krainov V.P. Qualitative Methods in Physical Kinetics and Hydrodynamics, NY: American Institute of Physics, 1992.
- [14] Fisenko S.P., Brin A.A. // Intern. J. Heat & Mass Transfer. 2006. Vol. 49. Issue 5/6. P. 1004–1014.
- [15] Fletcher C.A. J. Computational Galerkin Method. NY: Springer, 1984.
- [16] Вержебицкий В.М. Основы численных методов. М.: Высшая школа, 2002.
- [17] Fisenko S.P. // J. Eng. Phys. and Thermophys. 2009. Vol. 82. P. 209–214.
- [18] Wen D., Zhang L., He Y. // Heat Mass Transfer. 2009. Vol. 45. P. 1061–1067.