

Исследование траекторий движения заряженных микрокапель в электрических и газодинамических полях

© Д.О. Кулешов,¹ И.А. Громов,² А.А. Дьяченко,¹ А.А. Васильев,³ С.В. Булович³

¹ Институт аналитического приборостроения РАН,
198095 Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

³ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
195251 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: hellchemist@yandex.ru

Поступило в Редакцию 12 мая 2023 г.

В окончательной редакции 4 сентября 2023 г.

Принято к публикации 30 октября 2023 г.

Проведено математическое моделирование движения заряженных микрокапель с диаметрами 30 и 100 μm при совместном воздействии на них электрического и газодинамического полей. Структура электрического поля определялась системой соосно расположенных жидкостного и газового распылительных капилляров и кольцевого транспортного противозэлектрода. Диаметр отверстия в нем составлял от 15 до 21 mm; электрический потенциал на капиллярах — от 2.4 до 5 kV. Превышение давления газа на входе в капиллярную систему над атмосферой составляло от 1 до 6 atm. Численное интегрирование системы уравнений Навье-Стокса проводилось при помощи пакета ANSYS Fluent в осесимметричной постановке без учета объемного заряда капель.

Ключевые слова: электрораспыление, транспортный противозэлектрод, заряженные микрокапли, численное моделирование, ANSYS Fluent.

DOI: 10.61011/JTF.2023.12.56804.f239-23

Введение

Электрораспыление жидкостей является основой метода ионизации, применяемого в масс-спектрометрии нелетучих молекул. В ходе масс-спектрометрических экспериментов было установлено, что в заряженных микро- и нанокляпях, образующих факел электроспрея, могут проходить как простые, так и сложные многостадийные химические реакции, порой со значительным ускорением по сравнению с их протеканием в „объеме“ [1,2]. Наличие заряда у капли является значительным преимуществом электрораспыления перед другими методами генерации микрокапель, так как оно открывает широкие возможности для управления параметрами микрокапли, такими, как время жизни, размер, траектория движения. Проведение химических реакций в заряженных микро- и нанокляпях имеет большой потенциал в качестве основы нового метода химического синтеза — микрокапельного химического синтеза. Для задач микрокапельного синтеза нами предложена [3] система, состоящая из соосно расположенных жидкостного и газового распылительных капилляров и кольцевого транспортного противозэлектрода (ТП), между которыми создается распыляющая разность потенциалов. Образующиеся заряженные микро- и нанокляпли уносятся потоком спутного газа и проходят сквозь ТП, и далее направляются на подходящий пробосборник. Такая система является перспективной для масштабирования микрокапельного химического синтеза за счет использо-

вания мультикапиллярной системы электрораспыления. Целью настоящей работы является численное моделирование движения заряженных микрокапель в скрещенных электрическом и газодинамическом полях без объемного заряда в предложенной распылительной системе для определения ее параметров, при которых наибольшее количество заряженных капель проходит через ТП без осаждения на нем. К ним относятся: диаметр отверстия в ТП, напряжения распыления и разности давлений между давлением на входе в распылительный капилляр и атмосферой.

1. Параметры моделирования

Геометрия, используемая для моделирования, представлена на рис. 1. Размеры указаны в миллиметрах. Спутный газ подается соосно с распылительным капилляром из резервуара за границей 1. Капиллярная сборка состоит из двух капилляров: круглый капилляр для подачи жидкой фракции 3 и кольцевой капилляр для подачи газа 2. Конец капиллярной системы находится в плоскости ТП 4. Диаметр отверстия в нем выбирается в диапазоне от 15 до 21 mm с шагом 3 mm. Электрический потенциал на капиллярной сборке имел значения 5 и 2.4 kV, а на ТП — 0.

Температура газа и распыляемого раствора на входе в капилляр составляла 300 К. В качестве модельной распыляемой жидкости был взят метанол с массовым расходом $2 \cdot 10^{-9}$ kg/s. При этом количество образуемых

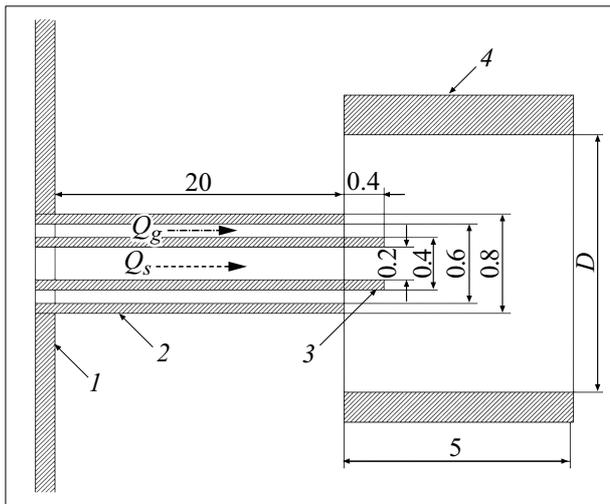


Рис. 1. Геометрия моделируемой электрораспылительной системы: 1 — граница воздушного резервуара, 2 — капилляр подачи газа, 3 — капилляр подачи раствора, 4 — ТП, D — диаметр отверстия в ТП. Стрелками указано направление распыляемого раствора с массовым расходом раствора Q_s и газа Q_g .

капель напрямую не контролируется и передается в виде значения расхода жидкости. Принято, что за конусом Тейлора разлет капель происходит в телесном угле 90° , который задается стартовыми позициями частиц и проекциями их скоростей.

На сегодняшний день изучение электрораспыления сосредоточено в основном вокруг масс-спектрометрии. Поэтому теоретические расчеты и моделирования прово-

дятся преимущественно для заряженных капель малого размера (до $10 \mu\text{m}$) или их движения вблизи интерфейса масс-спектрометра [4]. Заряженные капли при электрораспылении представляют собой полидисперсную смесь по их диаметрам. В работе П. Кебарле и У.Х. Веркерка [5] было показано, что диапазон диаметров капель, образующихся при электрораспылении, составляет от 10 до $100 \mu\text{m}$. В исследованиях [6,7] было показано, что средний диаметр капель равен $30 \mu\text{m}$. Таким образом, начальное значение размера заряженных капель имело две величины: 30 и $100 \mu\text{m}$ со значениями заряда, равными по порядку величины 10^{-13} и 10^{-12} С соответственно. Заряд определяется как 80% от величины, получаемой из уравнения рэлеевского распада [7].

2. Проведение моделирования

Численное моделирование проводится в три этапа: газодинамический расчет течения газа в капилляре и кольцевой струе, моделирование движение и испарения незаряженных капель и затем — заряженных капель. Исследование асимптотического поведения функции на последовательности сеток с уменьшением размера расчетной ячейки показало, что достаточно использовать порядка 140 тысяч ячеек.

Для нахождения характеристик течения газа в капилляре и кольцевой струе используется система уравнений Навье-Стокса в осесимметричной постановке. Численное интегрирование выполнялось по методу контрольного объема. Для решения задачи используется модуль ANSYS Fluent версии 2021R1. Моделирование турбулентности осуществляется с помощью $k-\omega$

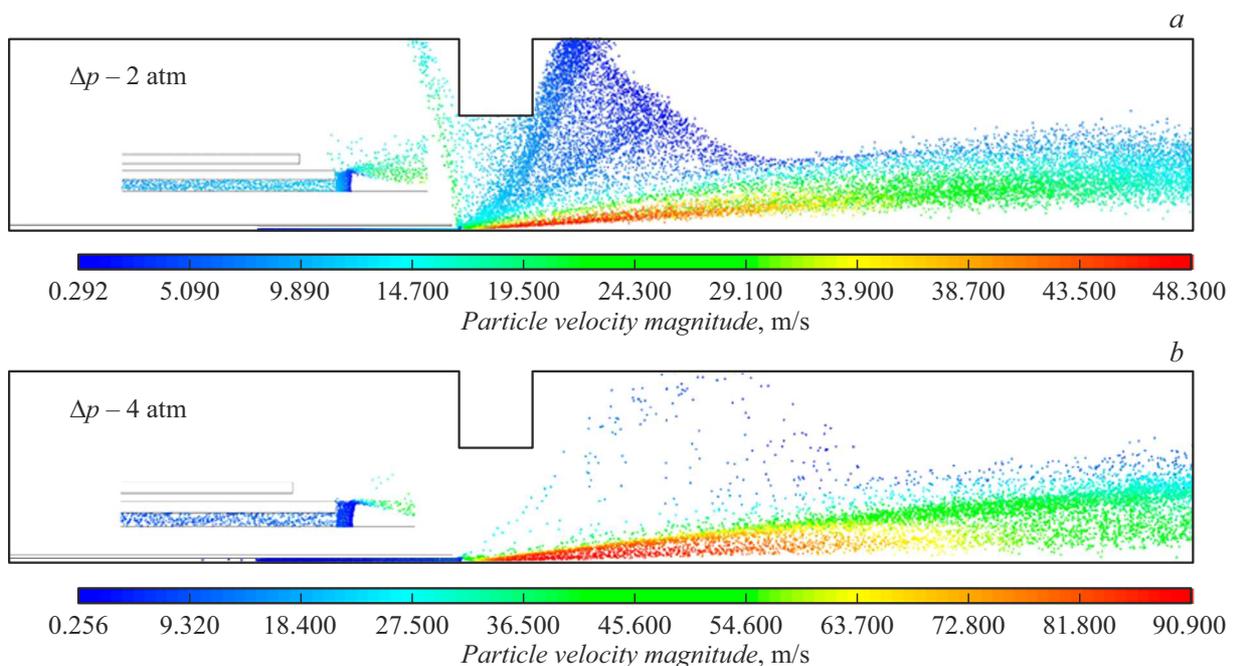


Рис. 2. Распределение заряженных капель при различном начальном Δp . Диаметр отверстия в ТП равен 15 mm, диаметр капель — $30 \mu\text{m}$, электрический потенциал капиллярной сборки — 5 kV.

SST-модели турбулентности. Формирование кольцевой струи производится за счет разницы давлений на входе в капилляр, равной $\Delta p = 6, 4, 2, 1 \text{ atm}$ и атмосферой. Для моделирования движения и испарения незаряженных капель решается траекторная задача, т.е. описание двухфазной среды выполнено в лагранжевой постановке. Для определения напряженности электрического поля в конфигурации капилляр-кольцо решается задача Лапласа для потенциала. Компоненты вектора напряженности электрического поля получены с помощью UDF для программного пакета ANSYS Fluent. Суммарное количество моделируемых капель в квазистационарном состоянии — когда количество поступающих капель от источника находится в равновесии с количеством капель, покидающих расчетную область или осаждающихся на поверхности кольцевого противоэлектрода, — находится в диапазоне от $8 \cdot 10^3$ до $4 \cdot 10^4$.

3. Результаты расчетов

Для заряженных микрокапель диаметром $30 \mu\text{m}$ в случае $\Delta p = 1-2 \text{ atm}$ воздействие сил Кулона оказывается преобладающим и приводит как к значительному изменению траекторий движения, так и к осаждению доли частиц на ТП. Для остальных значений разности давлений и капель диаметром $100 \mu\text{m}$ влияния сил Стокса оказывается достаточным, чтобы поток газа увлекал за собой большинство капель. Полученные результаты характерны для всех рассмотренных значений разности потенциалов, при его уменьшении доля частиц, движущихся к ТП, также уменьшается. В качестве примера на рис. 2 приведены два полученных распределения заряженных капель в области ТП и в пространстве за ним: $\Delta p = 2$ (рис. 2, *a*) и 4 atm (рис. 2, *b*).

Помимо этого, расчеты показывают, что капли с диаметром $100 \mu\text{m}$ обладают достаточным начальным импульсом, чтобы остаться недостижимыми со стороны электрического поля и быть лишь в разной степени, в зависимости от разности давлений, подверженными воздействию сил Стокса, разлетаясь с тем меньшим углом, чем больше было значение Δp .

Заключение

Таким образом, при численном моделировании движения заряженных микрокапель в газодинамическом и электрическом полях без учета объемного заряда получены параметры электрораспылительной системы, при которых они проходят через область ТП. Достигается это для микрокапель диаметром от 30 до $100 \mu\text{m}$, напряжений до 5 kV и $\Delta p = 4$ и 6 atm . Дальнейшие исследования предполагают экспериментальную проверку представленных результатов, что позволит расширить модель и учесть объемный заряд.

Финансирование работы

Постановка задачи исследования и подготовка технического задания на проведение моделирования были выполнены в рамках государственного задания Кулешовым Д.О. (шифр научной темы FFZM2022-0009), Громовым И.А. (шифр научной темы FFUG-2019-0021) и Дьяченко А.А. (шифр научной темы FFZM2022-0009); численное моделирование было проведено Буловичем С.В. и Васильевым А.А. при поддержке Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере (Старт-22-1 (Архипелаг), договор 4732ГС1/79601 от 27.09.2022).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] X. Yan. Intern. J. Mass Spectr., **468**, 116639 (2021). DOI: 10.1016/j.ijms.2021.116639
- [2] Z. Wei, Ya. Li, R.G. Cooks, X. Yan. Annual Rev. Phys. Chem., **71**, (2020). DOI: 10.1146/annurev-physchem-121319-110654
- [3] D.O. Kuleshov, D.M. Mazur, I.A. Gromov, E.N. Alekseyuk, N.R. Gall, O.V. Polyakova, A.T. Lebedev, L.N. Gall. J. Analyt. Chem., **75**, 1647 (2020). DOI: 10.1134/S1061934820130067
- [4] J.Y. Lee, P.A. Kottke, A.G. Fedorov. J. American Society for Mass Spectrometry, **31** (10), 2073 (2020). DOI: 10.1021/jasms.0c00197
- [5] P. Kebarle, U.H. Verkerk. Mass Spectr. Rev., **28** (6), 898 (2009). DOI: 10.1002/mas.20247
- [6] J.N. Smith, R.C. Flagan, J.L. Beauchamp. J. Phys. Chem. A, **106**, 9957 (2002). DOI: 10.1021/jp025723e
- [7] Yu. Gan, N. Chen, X. Zheng, D. Shi, Zh. Jiang, Sh. Song, Ya. Shi. J. Electrostat., **115**, 103662 (2022). DOI: 10.1016/j.elstat.2021.103662