

Динамика осаждения ультрадисперсного аэрозоля, созданного импульсным способом

© О.Б. Кудряшова, А.Б. Ворожцов

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

E-mail: olgakudr@inbox.ru

Поступило в Редакцию 12 апреля 2024 г.

В окончательной редакции 30 августа 2024 г.

Принято к публикации 30 октября 2024 г.

В связи с опасностью аварийных выбросов токсичных газов возникает проблема их быстрой нейтрализации. Предложена математическая модель осаждения ультрадисперсного аэрозоля, созданного импульсным способом, учитывающая процессы распространения частиц, осаждения, коагуляции. В модели оценивается суммарная поверхность частиц.

Ключевые слова: ультрадисперсный аэрозоль, импульсное распыление, осаждение, коагуляция, поверхность частиц.

DOI: 10.61011/PJTF.2024.24.59427.6260k

Существуют ситуации, требующие быстрой очистки воздуха помещений от опасных субстанций: последствия пожаров, утечки химических веществ на промышленных предприятиях, бактериальные и вирусные загрязнения [1]. В таких ситуациях скорость очистки воздуха имеет решающее значение. Таким образом, проблемы очистки воздуха от аварийных выбросов делают актуальной задачу разработки новых способов удаления опасных субстанций. В частности, предложен способ нейтрализации газовых выбросов с помощью мгновенной импульсной генерации ультрадисперсного аэрозоля на основе наноструктурированных частиц порошка [2]. Такие частицы, обладающие большой удельной поверхностью, способны адсорбировать токсичные газы. Помимо адсорбции применяют фотокаталитическое окисление, инициируемое ультрафиолетом. При этом на поверхности наноразмерного твердого полупроводникового материала газы адсорбируются, а затем разлагаются под действием ультрафиолета [3–5].

Важнейшей характеристикой, влияющей на эффективность адсорбции газов частицами порошка, является площадь поверхности частиц. Именно на поверхности частиц, включая систему нанопор, происходит адсорбция. Частицы аэрозоля распространяются по пространству и осаждаются на стенах и полу помещения. Поэтому постепенно снижаются концентрация частиц и их суммарная поверхность, необходимая для адсорбции газов.

Цель настоящей работы — исследовать динамику изменения суммарной поверхности частиц ультрадисперсного адсорбирующего аэрозоля, созданного импульсным методом, с учетом полидисперсности аэрозоля, одновременно протекающих процессов диффузии, осаждения, коагуляции частиц.

Рассмотрим аэрозольное облако частиц диаметром D менее $10\ \mu\text{m}$, полидисперсную систему с заданной начальной функцией распределения частиц по размерам $f_0(D)$. Размер облака частиц в начальный момент

времени много меньше характерного размера помещения H (приближение точечного источника), источник расположен в центре кубической камеры с ребром H . Такая постановка задачи соответствует случаю импульсного распыления: первичное аэрозольное облако создается практически мгновенно; размер частиц мал благодаря дроблению в условиях взрывного распыления; малые частицы за доли секунды тормозятся в воздухе, проходя расстояние менее $5\ \text{cm}$ [2]. Распространение частиц в пространстве происходит благодаря конвективной/турбулентной диффузии, сопровождается гравитационным осаждением и осаждением на стенах (потолке). Частицы будем считать сферическими. При столкновении между собой частицы коагулируют, при столкновении с поверхностями они остаются на них.

Известно, что коэффициент диффузии k_D пропорционален абсолютной температуре T , обратно пропорционален вязкости воздуха μ и характерному диаметру частиц D : $k_D = k_{D0} \frac{T}{\mu D}$, где коэффициент k_{D0} — свободный параметр модели.

В работе [2] получены аналитические выражения для осаждения частиц монодисперсного аэрозоля на стенках и гравитационного осаждения. В общем случае для массы осевших частиц m_p на момент времени t получим

$$\frac{m_p(t)}{m_p(0)} = 1 - \exp(-\gamma t). \quad (1)$$

Коэффициент скорости осаждения зависит от диаметра частиц нелинейно:

$$\gamma(D) = \frac{u_s}{H} + \beta = \frac{\rho_p D^2}{18\mu H} g + \frac{\beta_0 k_{D0}}{H} \frac{T}{\mu D}, \quad (2)$$

где γ — коэффициент скорости осаждения, u_s — скорость стоксового осаждения, $u_s = \rho_p D^2 g / 18\mu$, ρ_p — плотность частицы, g — ускорение свободного падения, коэффициент осаждения на стенках β пропорционален коэффициенту диффузии, обратно пропорционален

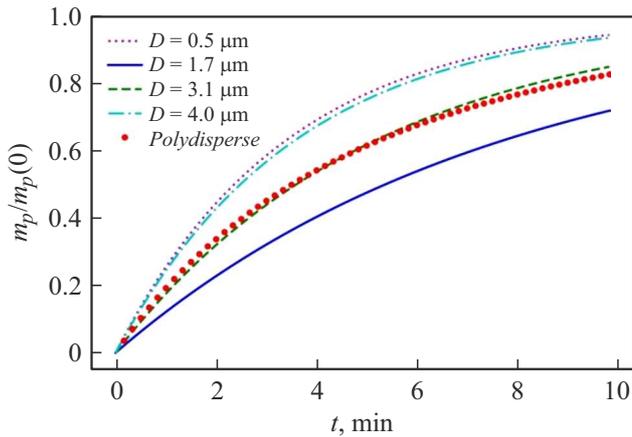


Рис. 1. Относительная масса осевших частиц в зависимости от времени.

расстоянию до стенок: $\beta = \beta_0 k_D / H$, β_0 — свободный параметр модели.

Существует диаметр, соответствующий минимуму функции $\gamma(D)$:

$$D_{\min} = \sqrt[3]{\frac{9\mu\beta_0 k_{D0}}{(\rho_p - \rho)g}}. \quad (3)$$

Аэрозоль с частицами такого диаметра будет дольше всего оставаться в воздухе.

Для полидисперсного аэрозоля уравнение (1) запишется в виде

$$\frac{m_p(t)}{m_p(0)} = \int_0^\infty f_0(D) [1 - \exp(-\gamma(D)t)] dD. \quad (4)$$

Размеры частиц подчиняются заданному начальному распределению (гамма-распределение с параметрами α и b): $f_0(D) = aD^\alpha \exp(-bD)$, $a = \beta_1 b^{\alpha+1} / \Gamma(\alpha + 1)$, где $\Gamma(x)$ — гамма-функция, $\alpha = 1.4$, $b = 1 \mu\text{m}^{-1}$, характерный размер (диаметр Заутера) $D_{32} = 4.4 \mu\text{m}$.

Для учета коагуляции и описания изменения функции распределения частиц по размерам $f(D, t)$ применим подход Смолуховского

$$\frac{\partial f(D, t)}{\partial t} = I_1 + I_2. \quad (5)$$

Член I_1 в (5) отвечает за уменьшение числа частиц диаметра D за единицу времени в результате столкновения с частицами диаметра D_1 :

$$I_1 = -f(D, t) \int_0^\infty K(D, D_1) f(D_1, t) dD_1, \text{ где } K(D, D_1) —$$

вероятность столкновения частиц с диаметрами D и D_1 в единицу времени. Вероятность столкновения частиц пропорциональна их сечениям: $K(D, D_1) = k_p(D^2 + D_1^2)$. Чем больше величина коэффициента пропорциональности k_p , тем выше интенсивность коагуляции. Член I_2 описывает увеличение числа частиц диаметра D за счет столкновения частиц

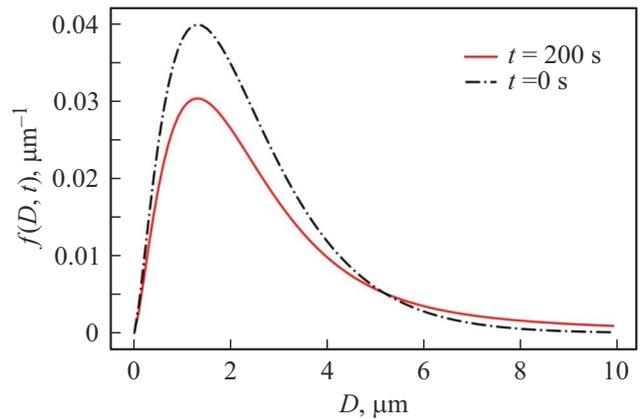


Рис. 2. Изменение функции распределения частиц по размерам за счет коагуляции.

с меньшими диаметрами $D_2 = \sqrt[3]{D^3 - D_1^3}$ и D_1 :

$$I_2 = \frac{1}{2} \int_0^D K(D_2, D_1) f(D_1, t) f(D_2, t) dD_1.$$

Начальные условия для уравнения (5): при $t = 0$ $f(D, 0) = f_0(D)$.

Изменение размеров частиц за счет коагуляции приводит к изменению их свободной поверхности. Размерные эффекты приводят к существенному изменению скорости физико-химических процессов в аэрозолях [6].

Масса оставшихся в воздухе частиц пропорциональна кубу их диаметра, а поверхность — квадрату. Значит, относительная суммарная поверхность частиц, находящихся в воздухе, с учетом (4) будет определяться как

$$\begin{aligned} \frac{S_p(t)}{S_p(0)} &= \left(1 - \frac{m_p(t)}{m_p(0)}\right)^{2/3} \\ &= \left(\int_0^\infty f(D_p) \exp(-\gamma(D_p)t) dD_p\right)^{2/3}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $S_p(t)$ — поверхность частиц в момент времени t ; $S_p(0)$ — начальная поверхность частиц.

В эксперименте по импульсному распылению порошка диоксида титана [1] определены параметры функции распределения частиц по размерам: $\alpha = 1.4$, $b = 1 \mu\text{m}^{-1}$. Исходя из экспериментальных данных мы определили свободные параметры модели. Они составили $\beta_0 = 0.025 \text{m}^{-1}$, $k_{D0} = 3 \cdot 10^{-15} \text{H} \cdot \text{m/K}$.

На рис. 1 показана динамика изменения относительной массы осевших частиц, рассчитанная для полидисперсной модели (4), а также для частиц разного диаметра, рассчитанная в соответствии с монодисперсной моделью. Частицы с диаметром 0.5 и 4 μm осаждаются примерно с одинаковой скоростью, но частицы с диаметром 0.5 μm — на стенках, а частицы с диаметром 4 μm — на дне. Медленнее всего оседают частицы с диаметром 1.7 μm (соответствует минимальному диаметру D_{\min} (3)). Результаты расчета осаждения по

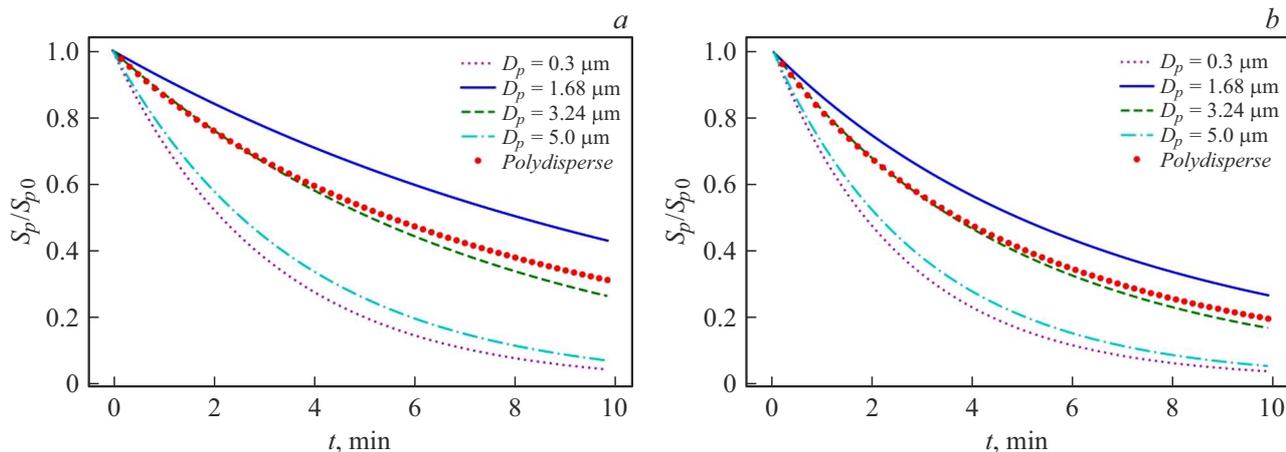


Рис. 3. Относительная суммарная поверхность частиц в зависимости от времени. *a* — с учетом осаждения; *b* — с учетом осаждения и коагуляции.

полидисперсной модели и по монодисперсной модели с диаметром частиц, соответствующим среднеобъемному диаметру полидисперсного распределения ($3.1 \mu\text{m}$), практически совпадают. Таким образом, при расчете осаждения частиц можно использовать монодисперсную модель с размером частиц, соответствующим среднеобъемному диаметру, что упрощает проводимые оценки.

Рис. 2 иллюстрирует изменение функции распределения частиц по размерам вследствие коагуляции ($k_p = 0.004 \mu\text{m}^{-2}$). На рис. 3 приведены зависимости относительной поверхности частиц от времени с учетом осаждения и коагуляции.

Расчеты показывают, что уменьшение поверхности частиц, доступной для адсорбции и химических превращений, за 10 мин значительно, особенно в условиях интенсивной коагуляции. Для модельного полидисперсного распределения, рассмотренного в настоящей работе, уменьшение поверхности к девятой минуте только за счет осаждения составит 60%, с учетом коагуляции — 80%.

Таким образом, предложена математическая модель динамики осаждения ультрадисперсного аэрозоля, распыленного импульсным способом. Получены зависимости относительной массы осевшего аэрозоля, концентрации частиц, их дисперсности, площади поверхности от времени. В модельных расчетах для полидисперсного порошка диоксида титана с характерным размером $4.4 \mu\text{m}$ показано, что площадь поверхности частиц, доступная для адсорбции, падает на 60–80% в течение нескольких минут.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-69-00108 (<https://rscf.ru/project/22-69-00108/>).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] T.Z. Maung, J.E. Bishop, E. Holt, A.M. Turner, C. Pfrang, *Int. J. Environ. Res. Public Health*, **19** (14), 8752 (2022). DOI: 10.3390/ijerph19148752
- [2] O. Kudryashova, S. Sokolov, A. Vorozhtsov, *Materials*, **16** (16), 5701 (2023). DOI: 10.3390/ma16165701
- [3] I.N. Martyanov, K.J. Klabunde, *Environ. Sci. Technol.*, **37** (15), 3448 (2003). DOI: 10.1021/es0209767
- [4] H. Ren, P. Koshy, W.-F. Chen, S. Qi, C.C. Sorrell, *J. Hazard. Mater.*, **325**, 340 (2017). DOI: 10.1016/j.jhazmat.2016.08.072
- [5] Н.В. Чиркунова, М.В. Дорогов, А.Е. Романов, *Письма в ЖТФ*, **49** (11), 7 (2023). DOI: 10.21883/PJTF.2023.11.55530.19522 [N.V. Chirkunova, M.V. Dorogov, A.E. Romanov, *Tech. Phys. Lett.*, **49** (6), 5 (2023). DOI: 10.61011/TPL.2023.06.56368.19522].
- [6] В.Б. Федосеев, *Письма в ЖТФ*, **49** (8), 32 (2023). DOI: 10.21883/PJTF.2023.08.55135.19469 [V.B. Fedoseev, *Tech. Phys. Lett.*, **49** (4), 71 (2023). DOI: 10.21883/TPL.2023.04.55884.19469].