

бодной молекулярной орбитали (энергии сродства к электрону) привлечен полуэмпирический метод квантовой химии Extended Hückel MO, что обеспечивает довольно точное воспроизведение относительного порядка и строения MO молекул.

Сочетание компьютерных методов и методов структурной химии позволяет выявить все больше взаимоотношений структуры и свойства. Однородная база данных, полученная на группе родственных соединений, позволила получить уравнение с высокими предсказательными возможностями и с ограниченным числом дескрипторов, описывающих главные свойства химических соединений, с которыми связано наличие биологической активности. Указанные виды активности обусловлены явлениями переноса заряда и проникновения через биологические мембраны с дальнейшим взаимодействием с биологическими центрами и рецепторами.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Морозов И.С., Петров В.И., Сергеева С.А. Фармакология адамантанов. – Волгоград: Волгоград. мед. Академия, 2001. – 320 с.
2. Зефирова Н.С. О тенденциях развития современной органической химии // Соросовский образовательный журнал. – 1996. – № 7. – С. 33-38.
3. Зефирова Н.С., Зефирова О.Н. Рациональный дизайн лекарств // Химия и жизнь. – 2004. № 11. – С. 6-9.
4. Hansch C., Leo A. Exploring QSAR: fundamentals and applications in chemistry and biology. – Washington DC: Am. Chem. Soc. 1995. – P. 557.
5. Пивоваров Д.В., Исаев П.П. Количественные соотношения «структура – свойство» замещенных адамантанов // Вестник Таганрогского государственного педагогического института. Физико-математические и естественные науки. – Таганрог: Изд-во Таганрог. гос. пед. ин-та. – 2009. – № 1. – С. 72-79.

Пивоваров Дмитрий Владимирович

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Таганрогский государственный педагогический институт».

E-mail: dim_piv@mail.ru.

347936, г. Таганрог, ул. Инициативная, 54 «А», к. 606.

Тел.: +79045065368.

Pivovarov Dmitriy Vladimirovich

State-Owned Educational Establishment of Higher Vocational Education «Taganrog State Pedagogical Institute».

E-mail: dim_piv@mail.ru.

54 «A»/606, Initiativnaya street, Taganrog, 347936, Russia.

Phone: +79045065368.

УДК 534.29:551.594.25

М.А. Тимошенко

ДИФфуЗИЯ СУБМИКРОННЫХ ЧАСТИЦ В ПОТОКЕ ЧЕРЕЗ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЙ И АКУСТИЧЕСКИЙ ПОГРАНИЧНЫЕ СЛОИ

Рассматривается диффузия аэрозолей с целью их осаждения. Получено аналитическое выражение для потока субмикронных аэрозольных частиц через гидродинамический и акустический пограничные слои.

Диффузия; пограничный слой; аэрозольные частицы; табачный дым.

M.A. Timoshenko

THE DIFFUSION OF SUBMICRONIC PARTICLES AT BLAST THROUGH HYDRODYNAMIC AND ACOUSTIC BOUNDARY LAYERS

The aerosol diffusion with the purpose of precipitation is considered in the article. The formula of submicron aerosol particles stream through hydrodynamic and acoustic boundary layers was found.

Diffusion; boundary layer; aerosol particles; tobacco smoke.

При активном и пассивном курении нано- и субмикронные частицы табачного дыма осаждаются на стенках дыхательного тракта. При этом диффузия и осаждение происходят в гидродинамическом потоке с преодолением пограничного слоя. Подобная ситуация наблюдается и в ряде промышленных технологических процессах, связанных с осаждением аэрозолей (все виды осадительных аппаратов, многочисленные типы защитных покрытий и т.д.) [1].

В предыдущих наших работах [2,3] с использованием операционного метода производилась оценка диффузионного потока от источника без учета пограничного слоя. Целью настоящей работы является получение аналитического выражения для потока субмикронных аэрозольных частиц через гидродинамический и акустический пограничные слои.

Задача формулируется следующим образом: в канале, шириной h вдоль оси x движется аэрозольный поток Π_x . От него, в силу диффузии, ответвляется поток частиц по оси y в направлении, перпендикулярном оси x . Для интенсификации осаждения субмикронных частиц на гидродинамический поток может дополнительно накладываться акустическое поле от стороннего источника, вызывая появление в зоне осаждения аэрозоля у стенки более тонкого акустического пограничного слоя δ_a . Требуется найти диффузионный поток Π_y . Считая, что уменьшения потока Π во времени нет ($\frac{\partial \Pi}{\partial t} = 0$), уравнение непрерывности можно записать в виде

$$\frac{\partial \Pi_x}{\partial x} + \frac{\partial \Pi_y}{\partial y} = 0, \quad (1)$$

где Π – число частиц через единицу площади за единицу времени, $1/\text{м}^2\text{с}$.

Поток $\Pi_y(x)$ частично ответвляется от оси x в перпендикулярном направлении и проходит через пограничный слой δ (соответственно гидродинамический

$\delta_s = \sqrt{\frac{l^2}{\text{Re}}} = \sqrt{\frac{\nu l}{v_n}}$ или акустический $\delta_a = \sqrt{\frac{2\nu}{\omega}}$, где $\nu = \frac{\eta}{\rho}$ – кинематическая вяз-

кость среды, ρ – ее плотность, η – сдвиговая вязкость среды, v_n – скорость потока вне пограничного слоя, Re – гидродинамическое число Рейнольдса, равное отношению инерциального и вязкого членов в гидродинамическом уравнении Навье-Стокса [4], $\omega = 2\pi f$ – круговая частота, f – частота звука).

Диффузионный поток $\Pi_y(x)$ через соответствующий пограничный слой на стенку равен

$$\Pi_y(x) = -D \frac{\partial N(x, y)}{\partial y}, \quad (2)$$

где D – коэффициент диффузии субмикронных аэрозольных частиц,

N – счетная концентрация, $1/\text{м}^3$ [2].

Коэффициент диффузии аэрозольных частиц D меняется от температуры среды T вследствие изменения средней скорости движения молекул газа, соударяющихся с аэрозольной частицей и обеспечивающих их подвижность [5]. Активные курильщики иногда «согреваются» в морозы от высокой температуры табачного дыма. В промышленных аэрозолях (сажевого производства, оксидов железа в сталеплавильном производстве при кислородном дутье, например, в конверторах, в теплоэлектроцентралях при сжигании топлива и др.) температура аэрозольных потоков также повышенная по сравнению с температурой осадительных поверхностей.

Учтем изменение коэффициента диффузии D от температуры среды T в виде

$$D = D_0 \frac{T^2}{T_0^2}, \quad (3)$$

где D_0 – коэффициент диффузии при нормальной температуре T_0 .

При пассивном курении температура вдыхаемого табачного дыма близка к нормальной, поэтому изменение коэффициента диффузии от температуры можно не учитывать. Такая же ситуация наблюдается и в многочисленных осадительных устройствах в промышленности. Для общности оценки диффузионного потока частиц $\Pi_y(x)$ будем учитывать указанное изменение температуры. При необходимости, в конечных выражениях этим изменением T можно будет пренебречь.

Для получения диффузионного потока $\Pi_y(x)$ по выражению (2) найдем число частиц в единице объема N из кинетической теории газов, воспользовавшись известным уравнением Клапейрона–Менделеева:

$$\begin{aligned} pV &= nkT, \\ p &= \frac{n}{V} kT = NkT, \end{aligned} \quad (4)$$

где p – давление газа, Па;

V – объем, м³;

n – число частиц в системе;

k – постоянная Больцмана;

T – температура, К;

N – счетная концентрация частиц, 1/м³.

Распределение температуры в потоке аэрозоля в канале, шириной h и толщиной пограничного слоя δ можно аппроксимировать функцией

$$T = T_c - (T - T_n) \frac{(h-y)}{\delta}, \quad (5)$$

где T_c – температура стенки, T_n – температура в потоке.

Из (2), с учетом (4), получаем

$$\Pi_y(x) = -D \frac{d}{dy} \left(\frac{p}{kT} \right).$$

Или с добавлением (3):

$$\Pi_y(x) = -D_0 \frac{T^2}{T_0^2} \frac{d}{dy} \left(\frac{p}{kT} \right) \frac{dT}{dT} = -D_0 \frac{T^2}{T_0^2} \frac{1}{k} \frac{d}{dT} \left(\frac{p}{T} \right) \frac{dT}{dy}. \quad (6)$$

В (6) величину $\frac{dT}{dy}$ находим из аппроксимации (5).

$$\frac{dT}{dy} = -\frac{d}{dy} \left(T_c - \frac{\Delta T_n}{\delta} b + \frac{\Delta T_n}{\delta} y \right) = \frac{\Delta T_n}{\delta}, \quad (7)$$

где $\Delta T_n = T_c - T_n$,

Тогда выражение (6) с учетом (7) запишем в виде

$$\Pi_y(x) \cdot \frac{\delta k T_0^2}{D_0 \Delta T_n} = -T^2 \frac{d(p/T)}{dT}. \quad (8)$$

Найдем правую часть $y = -T^2 \frac{d(p/T)}{dT}$ выражения (8) с учетом граничных условий:

$P = p(x)$ при $y = h - \delta$;

$p = 0$ при $y = h$;

$T = T_n$ при $y = h - \delta$;

$T = T_c$ при $y = h$.

Тогда при интегрировании получаем

$$Y = -\frac{\int_{T_n}^{T_c} d\left(\frac{p}{T}\right)}{\int_{T_n}^{T_c} \frac{dT}{T^2}} = \frac{\left. \frac{p}{T} \right|_{p(x)}}{\left. \frac{1}{T} \right|_{T_n}} = -\frac{\frac{p(x)}{T_n}}{\frac{1}{T_c} - \frac{1}{T_n}} = \frac{p(x)/T_n}{(T_n - T_c)/T_n T_c} = \frac{p(x)T_c}{(T_c - T_n)}. \quad (9)$$

Подстановка (9) в (8) дает

$$\Pi_y(x) \cdot \frac{\delta k T_0^2}{D_0 (T_c - T_n)} = \frac{p(x)T_c}{(T_c - T_n)},$$

отсюда получаем

$$p(x) = \Pi_y(x) \frac{\delta k T_0^2}{D_0 T_c}. \quad (10)$$

Выражение (10) показывает как меняется с расстоянием x давление $p(x)$ в аэрозольной системе в связи с наличием диффузионного потока Π_y частиц к стенке канала. Эта же величина появляется в потоке к стенке $\Pi_y(x)$ из выражений (1) и (4):

$$\begin{aligned} \Pi_y(x) &= -\frac{\partial}{\partial x} \Pi_x(x) \int_0^{h-\delta} dy = -\frac{\partial}{\partial x} \Pi_x(x) (h - \delta) = \\ &= -(h - \delta) v \frac{\partial N(x, y)}{\partial x} = -\frac{(h - \delta)}{k T_n} v \frac{\partial p(x)}{\partial x}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $v = v_0 \frac{h}{(h - \delta)} \frac{T_n}{T_0}$ (*) – скорость потока в канале.

После подстановки (*) в (11) получаем

$$\Pi_y(x) = -\frac{(h-\delta)v_0hT_n}{(h-\delta)T_0kT_n} \frac{\partial p(x)}{\partial x} = -v_0 \frac{h}{kT_0} \frac{\partial p(x)}{\partial x}. \quad (12)$$

Из выражения (10) получаем

$$\frac{dp(x)}{dx} = \frac{d\Pi_y(x)}{dx} \frac{k\delta T_0^2}{D_0T_0}. \quad (13)$$

Из (12) та же величина равна

$$\frac{dp(x)}{dx} = -\Pi_y(x) \frac{kT_0}{v_0h}. \quad (14)$$

Приравнявая (13) и (14), получаем обыкновенное дифференциальное уравнение для диффузионного потока субмикронных частиц через пограничный слой:

$$\frac{d\Pi_y(x)}{dx} + \Pi_y(x) \frac{D_0T_c}{\delta v_0hT_0} = 0. \quad (15)$$

Разделяем переменные:

$$\frac{d\Pi_y(x)}{dx} = -\frac{D_0T_c}{\delta v_0hT_0} dx.$$

Затем интегрируем

$$\ln \Pi_y(x) \Big|_{\Pi_y(0)}^{\Pi_y(x)} = -\frac{D_0T_c x}{\delta v_0hT_0} \Big|_0^x.$$

После потенцирования получаем

$$\Pi_y(x) = \Pi_y(0) \exp\left(-\frac{D_0T_c}{\delta v_0hT_0} x\right). \quad (16)$$

Величину $\Pi_y(0)$ находим из граничного условия при $x = 0$ из выражения (10).

В итоге получаем конечное выражение для диффузионного потока субмикронных аэрозольных частиц через гидродинамический или акустический пограничные слои:

$$\Pi_y(x) = \frac{p_0 D_0 T_c}{k T_0^2 \delta} \exp\left(-\frac{D_0 T_c}{\delta v_0 h T_0} x\right). \quad (17)$$

Для «холодных» аэрозольных потоков $T_c = T_0$ и из (4) $p_0 = N_0 k T_0$ формула (17) упрощается:

$$\Pi_y(x) = \frac{N_0 D_0}{\delta} \exp\left(-\frac{D_0}{\delta v_0 h} x\right). \quad (18)$$

Как видно из выражения (18), для пассивных курильщиков (а также для ряда технологических промышленных процессов) диффузионный поток субмикронных аэрозолей на стенку канала прямо зависит от начальной счетной концентрации частиц N_0 и коэффициента диффузии D_0 (т.е. от подвижности частиц).

Обратно пропорциональная зависимость потока $P_y(x)$ от толщины δ пограничного слоя вполне физически закономерна и подтверждается примерами акустических технологий осаждения.

Экспоненциальный член в (17) и (18) показывает убыль с расстоянием x диффузионного потока через пограничный слой за счет ресурса основного потока $P_x(x)$ аэрозоля. В экспоненциально затухающем с расстоянием члене в качестве коэффициента затухания присутствует совокупность параметров $(\frac{D_0}{\delta v_0 h})$, позволяющая чис-

ленно оценить их влияние. Например, осаждение диффузионного потока никотина у ребенка, как пассивного курильщика, пропорционально выше, чем у взрослого человека, так как ширина канала h находится в знаменателе формулы (18).

Формулы (17) и (18) позволяют рассчитать диффузионный поток субмикронных частиц при варьировании параметров аэрозоля (концентрации, коэффициента диффузии, скорости потока), среды (вязкости, плотности, температуры), акустического поля (частоты, амплитуды колебательной скорости) и размеров канала.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Тимошенко В.И., Чернов Н.Н. Осаждение и осадконакопление промышленных дымов. – Ростов-на-Дону: «Ростиздат», 2004. – 224 с.
2. Тимошенко М. А. Решение задачи о диффузионном изменении счетной концентрации наночастиц методом операционного исчисления // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2009. – № 6 (95). – С. 186-193.
3. Тимошенко М.А., Чернов Н.Н. Модель осаждения частиц сигаретного дыма на поверхность в звуковом поле с учетом квазистационарности среды // Нелинейные акустические системы. Сборник статей, май, 2008. – Ростов-на-Дону: ЗАО «Ростиздат». – 2008. – С. 206-213.
4. Тимошенко В.И., Чернов Н.Н. Взаимодействие и диффузия частиц в звуковом поле. – Ростов-на-Дону: «Ростиздат», 2003. – 304 с.
5. Фукс Н. А. Механика аэрозолей. – М.: Изд-во Академии Наук, 1955. – 351 с.

Тимошенко Мария Алексеевна

Технологический институт федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге.

E-mail: timoshenkomaria@mail.ru.

347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44.

Тел.: 88634371795.

Timoshenko Maria Alexeevna

Taganrog Institute of Technology – Federal State-Owned Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”.

E-mail: timoshenkomaria@mail.ru.

44, Nekrasovsky, Taganrog, 347928, Russia.

Phone: +78634371795.