

УДК 539.612

Андрей Скапцов

Могилевский государственный университет продовольствия, Республика Беларусь

МОДЕЛЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦ С ПОВЕРХНОСТЬЮ ПРИ ИХ КОНТАКТЕ

Andrey Skaptsov

INTERACTION MODEL OF NANOPARTICLES WITH SURFACE AT THEIR CONTACT

В промышленных помещениях предприятий пищевой отрасли большое внимание уделяется чистоте воздуха. В отдельных случаях санитарные и гигиенические требования являются настолько жесткими, что производители вынуждены приобретать и размещать на производстве дорогостоящие системы очистки и изоляции помещений от внешней среды. Для тонкой очистки воздуха часто применяют системы, основными элементами которых являются волокнистые или мембранные фильтры различных конфигураций. И те и другие фильтры обеспечивают высокую эффективность улавливания аэрозольных частиц, размер которых более 0,03 мкм. Для частиц меньших размеров, так называемых наноразмерных частиц, как показывают результаты экспериментальных исследований, вероятность осаждения частиц на поверхности волокон или мембран падает, что приводит к снижению эффективности очистки газа. Возможной причиной такого поведения частиц является эффект теплового отскока, характерный для наночастиц и наблюдающийся в случае, когда скорость теплового движения частиц превышает некоторую критическую скорость. Для количественной оценки эффективности фильтра важно понять, какие параметры и каким образом влияют на результат взаимодействия наночастицы с поверхностью и, в частности, на критическую скорость. Для расчета последней предлагается модель адгезионного взаимодействия частица-поверхность, которая и представлена в настоящей работе.

Подобно газовым молекулам наноразмерные частицы участвуют в тепловом хаотическом движении и, сталкиваясь с волокнами фильтра, могут либо отскочить от поверхности, либо остаться на ней. Силы адгезии являются единственными, которые определяют прилипание частицы к поверхности волокон.

При столкновении частицы с поверхностью эффективность адгезии ε зависит от двух величин – скорости столкновения частицы с волокном и критической скорости. Критической скоростью будем называть такую минимальную скорость, при которой начинается отскок частиц. Все частицы, скорость которых выше критической, будут отскакивать от поверхности волокон.

Предположим, что скорость соударения частицы с волокном V_i совпадает со скоростью ее теплового движения, которую легко получить, если задать вид функции распределения частиц по скоростям. Допустим, что эта функция соответствует распределению Максвелла:

$$f(V_i) = 4\pi \left(\frac{m_p}{2\pi kT} \right)^{3/2} V_i^2 \exp \left(-\frac{mV_i^2}{2kT} \right). \quad (1)$$

Здесь m_p – масса частицы; k – постоянная Больцмана; T – термодинамическая температура.

Используя теорему о среднем, из формулы (1) находим тепловую скорость движения частиц:

$$\langle V_i \rangle = \left(\frac{48kT}{\pi^2 \rho_p D_p^3} \right)^{1/2}, \quad (2)$$

где ρ_p – плотность материала частиц; D_p – диаметр частицы.

Выражение для критической скорости можно получить на основе закона сохранения энергии и применяя известные модели адгезии, например модель Бредли-Гамакера или модель Джонсона-Кендалла-Робертса.

Очевидно, что при взаимодействии частиц с поверхностью выполняется закон сохранения энергии, который можно представить в виде:

$$E_k + E = E'_k + E' + \Delta E. \quad (3)$$

Здесь E_k и E'_k – кинетические энергии частицы до и после столкновения, соответственно; E и E' – энергии взаимодействия между частицей и поверхностью до и после соударения; ΔE – потери энергии при ударе.

Предположим, что энергия адгезии представляет собой разность значений E' и E :

$$E_{ад} = E' - E. \quad (4)$$

Строго говоря, величины E' и E не должны совпадать, так как на разных стадиях удара (начальная и конечная) площадь контакта между частицей и поверхностью может отличаться.

Введем коэффициент восстановления частицы:

$$\delta = 1 - \frac{\Delta E}{E_k}. \quad (5)$$

Преобразуя выражение (5) получаем

$$\Delta E = E_k (1 - \delta). \quad (6)$$

Подставляя (4) и (6) в (3), находим критическую скорость частицы при условии, что кинетическая энергия после соударения принимается равной нулю:

$$V_{кр} = \left(\frac{2E_{ад}}{\delta m} \right)^{1/2}. \quad (7)$$

Для случая идеально упругого столкновения коэффициент восстановления принимается равным 1. Такое допущение часто используется для газовых молекул. Для наноразмерных частиц это предположение также может быть использовано по двум причинам. Во-первых, продолжительность контакта частица-поверхность почти линейно уменьшается с размером частиц. Поэтому за короткий промежуток времени наночастицы не успевают деформироваться и потери энергии должны быть несущественны. Во-вторых, принимая $\delta=1$, исчезает необходимость находить точные значения коэффициента восстановления, что само по себе представляет достаточно сложную задачу, требующую дополнительной информации об особенностях контакт частица-поверхность. Эта задача, в принципе, может быть решена для различных макроскопических веществ. Вместе с тем, ее экстраполяция в область наноразмерных частиц может внести существенную неопределенность. Таким образом, чтобы исключить дополнительные неточности будем считать, что коэффициент восстановления для наночастиц равен 1. В представленной формуле (7) остается открытым вопрос об энергии адгезии, точное выражение для которой можно получить, применяя упомянутые выше модели адгезии для системы частица-поверхность.