

УДК 519.6

*Розглянуто питання чисельного моделювання руху дрібних заряджених частинок у в'язкому нестисливному середовищі під дією гравітаційного та електростатичного полів*

*Ключові слова: дрібнодисперсний порошок, електричний заряд, в'язке середовище, моделювання, чисельні методи*

*Рассмотрены вопросы численного моделирования движения мелких заряженных частиц в вязкой несжимаемой среде под действием гравитационного и электростатического полей*

*Ключевые слова: мелкодисперсный порошок, электрический заряд, моделирование*

*The problems of numerical simulation of the motion of small charged particles in an incompressible viscous medium under the influence of gravitational and electrostatic fields*

*Keywords: fine powder, electric charge, a viscous medium, modeling, numerical methods*

# ДВИЖЕНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МЕЛКОДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ В АППАРАТАХ ЭЛЕКТРОННО-ИОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ

**В.Н. Фенченко**

Кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник  
Физико-технический институт низких температур им. Б.И.Веркина  
НАН Украины

пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103

Контактный тел.: (0572) 63-14-41

E-mail: fenchenko@ukr.net

**О.В. Кравченко**

Кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник\*

Контактный тел.: (057) 349-47-74

E-mail: admi@ipmach.kharkov.ua

**В.И. Момот**

Ведущий инженер\*

\*Институт проблем машиностроения им. А.Н.Подгорного  
НАН Украины

ул. Дм. Пожарского, 2/10, г. Харьков, 61046

## 1. Введение

В современных промышленных технологиях все большее применение находят различные мелкодисперсные порошковые материалы. В процессе их производства при измельчении исходного сырья получаемые частицы приобретают тот или иной электрический заряд, в основном за счет электрокинетических явлений и имеют, как правило, весьма значительный разброс по размерам. Моделирование движения таких частиц в аппаратах электронно-ионной технологии, необходимое для разработки новых и совершенствования имеющихся технологий, сопряжено со значительными трудностями, а имеющиеся методики носят, в основном, приближенный характер и не позволяют проводить необходимые расчеты с учетом всех значимых факторов влияния. В данной статье рассмотрены некоторые вопросы моделирования движения мелких заряженных частиц в вязкой несжимаемой среде под действием гравитационного и электростатического полей с учетом влияния движения этих частиц на движение среды и при наличии броуновской диффузии.

## 2. Описание движения заряженных частиц в вязкой среде

Пространственные масштабы изменения поля скорости несущей вязкой фазы значительно превышают

размеры твердых микрочастиц, поэтому суммарная, действующая на них со стороны несущей фазы сила, представима в виде суммы сил Стокса, Архимеда, присоединенных масс и силы Бассе-Бусинеска [1]. Так как для микрочастиц характерная длина скоростной релаксации мала, то силы присоединенных масс и Бассе-Бусинеска, возникающие только при ускоренном движении частиц, могут не учитываться. Сила Архимеда пропорциональна объему частицы

$$\vec{f}_p^a = -m_f \vec{g},$$

где  $v_p$  - объем частицы,  $m_f = v_p \rho_f$  - масса вытесненной несущей фазы,  $\rho_f$  - ее плотность,  $\vec{g}$  - ускорение свободного падения.

Сила вязкого сопротивления Стокса пропорциональна характерному радиусу частицы и является основной силой, действующей на частицу со стороны несущей фазы

$$\vec{f}_p^s = 6\pi r_p \mu [\vec{u} - \vec{w}_p],$$

где  $\vec{u}$  - поле скоростей несущей фазы,  $\mu$  - ее динамическая вязкость,  $r_p$  - характерный радиус частицы,  $\vec{x}_p$  - ее координата,  $\vec{w}_p$  - скорость.

Пространственные масштабы изменения электрического поля также значительно превышают размеры

микрочастиц, поэтому суммарная, действующая на частицы со стороны электромагнитного поля сила, представима в виде суммы сил Кулона и диэлектростатической (пондеромоторной) силы.

Диэлектростатическая сила пропорциональна объему частицы и зависит от неравномерности электрического поля. Эта сила обычно невелика, а время поляризации частиц при их низкой проводимости определяется Максвелловским временем релаксации  $\tau \approx \frac{\epsilon \epsilon_0}{\sigma}$ , где  $\sigma$  - проводимость материала и, как правило, значительно превосходит время пребывания частиц в аппаратах электронно-ионной технологии.

Сила Кулона пропорциональна заряду частицы и является главной силой, действующей на частицу со стороны электрического поля

$$\vec{f}_p^a = -q_p \nabla \phi,$$

где  $\phi$  - потенциал поля,  $q_p$  - заряд частицы.

Заряд микрочастицы приобретают в процессе дробления сырья в основном за счет электрокинетических явлений, а их дальнейшая зарядка осуществляется за счет того, что движущиеся ионы сталкиваются с частицей и осаждаются на ее поверхности. Для крупных частиц при выполнении условия  $D \nabla n \ll n |\nabla \phi|$ , где  $D$  - коэффициент диффузии,  $n, \eta$  - концентрация и подвижность ионов, зарядка осуществляется в основном за счет оседания на поверхности частицы ионов, движущихся под действием электрического поля. Поле у поверхности такой частицы определяется внешним полем, полем ее поляризации и полем осевших зарядов. Неравномерное распределение заряда на поверхности приводит к беспорядочному вращению частицы из-за опрокидывающего действия электростатических сил и, благодаря этому, избыточный заряд распределяется по поверхности частицы равномерно. Зарядка продолжается пока электрическое поле у поверхности частицы не станет близким к нулю. Частица при этом получит заряд пропорциональный ее поверхности [2]

$$q_p \approx 4\pi\epsilon_0 \left(1 + 2 \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2}\right) \bar{E}_0 r_p^2,$$

где  $\epsilon$  - диэлектрическая проницаемость частиц,  $\bar{E}_0$  - внешнее поле.

Для мелких частиц при выполнении условия  $D \nabla n \gg nk |\nabla \phi|$  полученный таким образом заряд оказывается слишком малым, и накопление заряда будет продолжаться до тех пор, пока у основной массы ионов кинетическая энергия будет достаточной для преодоления потенциальной энергии их взаимодействия с частицей [3]

$$q_p \approx 4\pi\epsilon_0 \frac{W}{e} r_p,$$

где  $W$  - кинетическая энергия иона,  $e$  - его заряд.

Для условий, наблюдаемых в аппаратах электронно-ионной технологии при размерах частиц менее 0.1 мкм основным является адсорбционно-диффузный механизм зарядки, а так называемая "ударная" заряд-

ка преобладает в этих условиях для частиц размером более 1 мкм. В промежуточном диапазоне обычно величину заряда можно вычислять как сумму зарядов, рассчитанных по формулам "ударной" и "диффузионной" зарядки [2-4]

$$q_p \approx 4\pi\epsilon_0 r_p \left[ \frac{W}{e} + \left(1 + 2 \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2}\right) |\nabla \phi| r_p \right]$$

Заметим, что время зарядки частиц не превышает долей секунды, а время разрядки частиц значительно превышает время нахождения частиц в аппаратах электронно-ионной технологии, так что заряд частицы во время ее движения практически не меняется.

На движущиеся заряженные частицы действуют также силы Лоренца, которые пренебрежимо малы, так как объемная плотность частиц в несущей фазе и скорости их движения невелики.

Кроме сил Стокса и Кулона на микрочастицы действует также гравитационная сила, которая, как и сила Архимеда, пропорциональна объему частицы

$$\vec{f}_p^g = m_p \vec{g}$$

где  $m_p = v_p \rho_p$  - масса частицы,  $\rho_p$  - ее плотность.

Запишем уравнение Ланжевена движения микрочастицы под действием сил Стокса, Кулона и гравитационной силы

$$m_p \frac{d^2 \bar{x}_p}{dt^2} = 6\pi\mu r_p \left[ \bar{u} - \frac{d\bar{x}_p}{dt} \right] - q(r_p) \nabla \phi + (m_p - m_f) \vec{g} + \bar{\xi}$$

где  $\bar{\xi} = \bar{\xi}(t)$  - случайная функция от времени,

$$\langle \bar{\xi}_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \bar{\xi}_i(t), \bar{\xi}_i(t + \tau) \rangle = 2D\delta(\tau),$$

$D$  - коэффициент диффузии (угловыми скобками обозначено усреднение по времени).

Для микрочастиц характерная длина скоростной релаксации фаз мала по сравнению с пространственными масштабами изменения поля скорости несущей фазы и электромагнитного поля, поэтому уравнение Ланжевена можно записать в виде

$$\frac{d\bar{x}_p}{dt} = \bar{u} - \frac{q(r_p)}{6\mu r_p} \nabla \phi + \frac{2r_p^2(\rho_p - \rho_f)}{9\mu} \vec{g} + \frac{\bar{\xi}}{6\pi\mu r_p},$$

а соответствующее уравнение Фоккера-Планка относительно функции распределения частиц дисперсной фазы в пространстве по радиусам - в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \left( \nabla_x \cdot \left[ \bar{u} - \frac{q(r)}{6\mu r} \nabla \phi + \frac{2(\rho_p - \rho_f)r^2}{9\mu} \vec{g} \right] f \right) = \frac{D}{6\pi\mu} \Delta_x f$$

Потенциал электрического поля с учетом влияния частиц определяется уравнением электростатики Максвелла

$$\Delta \phi = - \frac{1}{\epsilon_0} \int q(r) f dr,$$

а система уравнений Навье-Стокса, описывающих движение несущей вязкой несжимаемой фазы с учетом влияния частиц имеет вид [5]

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u}, \nabla) \bar{u} - \frac{\mu}{\rho_f} \Delta \bar{u} + \frac{\nabla \varphi}{\rho_f} \int q(r) f dr - \frac{4(\rho_p - \rho_f)}{3\rho_f} g \int r^3 f dr + \frac{1}{\rho_f} \nabla p = 0 \\ (\nabla, \bar{u}) = 0 \end{aligned} \right.$$

где p - поле давления.

### 3. Моделирование процесса сепарации частиц измельченного нитрида бора

При измельчении исходного сырья невозможно получить достаточно однородный мелкодисперсный порошок и одной из важных технологических задач является задача выделения нужной фракции. Однако, имеющиеся на сегодняшний день методики не позволяют провести достаточно точные расчеты и учесть в комплексе все важные факторы, влияющие на движение частиц, в частности, наличие броуновского движения.

Сравним силы, действующие на микрочастицы нитрида бора, движущиеся в воздушной среде под действием электростатического и гравитационного полей.

На движение наиболее крупных частиц (радиусом более 100 мкм) основное влияние оказывает гравитационная сила, влияние Кулоновской силы незначительно. Для более мелких частиц (радиусом около 10 мкм) гравитационная сила и Кулоновская сила близки, а при дальнейшем уменьшении размеров частиц (до радиуса 1 мкм) влияние на их движение Кулоновской силы возрастает. На движение наиболее мелких частиц (радиусом менее 0.1 мкм) гравитационная сила практически не оказывает влияния и основной силой является Кулоновская сила (табл. 1).

Таблица 1

Свойства несущей фазы и дисперсного порошкового материала, а также характеристики процесса движения микрочастицы нитрида бора в воздушной среде под действием электростатического и гравитационного полей

Несущая газовая фаза – воздух в диапазоне температур 10 ÷ 30 °С	
1	2
Плотность	$\rho_f = 1.165 \div 1.247 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$
Динамическая вязкость	$\mu_f = (1.76 \div 1.86) \cdot 10^{-5} \frac{\text{Н} \cdot \text{с}}{\text{м}^2}$
Твердая дисперсная фаза - микрочастицы кубического нитрида бора	
Плотность	$\rho_p = 2180 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$
Проводимость	$\sigma_p > 10^{-12} \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{м}}$
Диэлектрическая проницаемость	$\epsilon = (5 \div 6) \text{ о.е.}$
Максвелловское время релаксации	$\tau \geq 40 \text{ с}$

Продолжение таблицы 1

1	2
Параметры электрического поля	
Напряженность электрического поля	$E = 10^5 \frac{\text{В}}{\text{м}}$
Характерные значений сил, действующих на микрочастицы с радиусами ~ 100 мкм	
Заряд частицы (в элементарных зарядах)	$q \approx 8 \cdot 10^5$
Отношение Кулоновской силы к силе тяжести	$\frac{f^q}{f^g} \approx 0.14$
Скорость движения частиц под действием силы тяжести	$w_g \approx 270 \frac{\text{см}}{\text{с}}$
Скорость движения частиц под действием Кулоновской силы	$w_q \approx 38 \frac{\text{см}}{\text{с}}$
Характерные значений сил, действующих на микрочастицы с радиусами ~ 10 мкм	
Заряд частицы (в элементарных зарядах)	$q \approx 9000$
Отношение Кулоновской силы к силе тяжести	$\frac{f^q}{f^g} \approx 1.6$
Скорость движения частиц под действием силы тяжести	$w_g \approx 27 \frac{\text{мм}}{\text{с}}$
Скорость движения частиц под действием Кулоновской силы	$w_q \approx 44 \frac{\text{мм}}{\text{с}}$
Характерные значений сил, действующих на микрочастицы с радиусами ~ 1 мкм	
Заряд частицы (в элементарных зарядах)	$q \approx 200$
Кулоновская сила /сила тяжести	$\frac{f^q}{f^g} \approx 40$
Скорость движения частиц под действием силы тяжести	$w_g \approx 0.2 \frac{\text{мм}}{\text{с}}$
Скорость движения частиц под действием Кулоновской силы	$w_q \approx 10 \frac{\text{мм}}{\text{с}}$
Характерные значений сил, действующих на микрочастицы с радиусами ~ 0.1 мкм	
Заряд частицы (в элементарных зарядах)	$q \approx 20$
Кулоновская сила /сила тяжести	$\frac{f^q}{f^g} \approx 2500$
Скорость движения частиц под действием силы тяжести	$w_g \approx 0.003 \frac{\text{мм}}{\text{с}}$
Скорость движения частиц под действием Кулоновской силы	$w_q \approx 7 \frac{\text{мм}}{\text{с}}$

Таким образом, применение электросепарации позволяет достаточно эффективно выделять фракции микрочастиц нитрида бора в диапазоне характерных радиусов 1÷10 мкм. Запишем соответствующую систему уравнений, пренебрегая силой Архимеда и учитывая тот факт, что в таком диапазоне реализуется “ударная” зарядка частиц, при которой суммарный заряд частицы пропорционален ее поверхности

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u}, \nabla) \bar{u} - \frac{\mu}{\rho_f} \Delta \bar{u} + \frac{\nabla_x \varphi}{\rho_f} \int_r q(r) f dr - \frac{4\rho_p}{3\rho_f} \bar{g} \int_r r^3 f dr + \frac{1}{\rho_f} \nabla_x p = 0 \\ (\nabla_x, \bar{u}) = 0 \\ \Delta_x \varphi = -\frac{q}{\epsilon_0} \int_r r^2 f dr \\ \frac{\partial f}{\partial t} + \left( \nabla_x, \left[ \bar{u} - \frac{q r}{6\mu} \nabla_x \varphi + \frac{2\rho_p r^2}{9\mu} \bar{g} \right] f \right) = \frac{D}{6\pi\mu} \Delta_x f \end{cases}$$

где  $q$  – поверхностная плотность заряда.

На входе задаем объемную плотность частиц в потоке, плотность заряда и функцию распределения частиц по радиусам. На стенках задаем условия не протекания и прилипания, для функции распределения ставим условия поглощения частиц стенкой, а для потенциала электрического поля задаем условия Дирихле.

Если не учитывать взаимодействие частиц между собой, увлечение воздуха движущимися частицами, а также влияние броуновской диффузии, то, очевидно, траектории движения частиц будут близки к прямолинейным. Однако решение задачи в полной постановке показывает, что указанные факторы, обычно не принимаемые во внимание, могут существенно повлиять на движение частиц. Так броуновская диффузия приводит к существенному “размыванию” зоны осаждения микрочастиц того или иного диаметра (рис. 1). Игнорирование этого ведет к тому, что выделенная фракция будет загрязнена частицами других размеров.

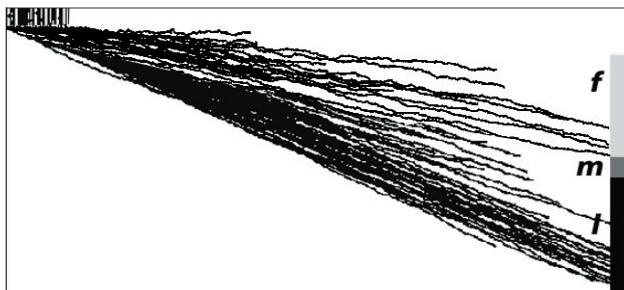


Рис. 1. Траектории частиц (малая объемная плотность частиц в потоке при наличии броуновской диффузии):  $f$  – область осаждения только мелких частиц,  $m$  – область осаждения как мелких, так и крупных частиц,  $l$  – область осаждения только крупных частиц

В аппаратах электронно-ионной технологии, очевидно, желательно проводить обработку при увели-

ченной объемной плотности частиц в потоке. Однако при этом движущиеся крупные частицы увлекают воздух, который “затягивает” мелкие частицы. Это меняет как положение, так и размеры зоны осаждения микрочастиц того или иного диаметра. Кроме того увлекаемый воздух сталкиваясь со стенками аппарата отклоняется, образуя вихревые течения, что дополнительно влияет в основном на движение наиболее мелких микрочастиц, которые легко “затягиваются” потоком из-за чего зона осаждения мелких частиц смещается вниз и уменьшается (рис. 2).

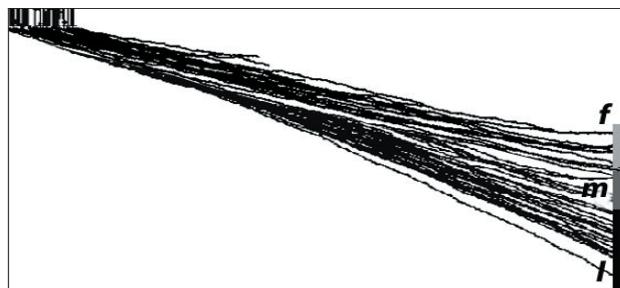


Рис. 2. Траектории частиц (большая объемная плотность частиц в потоке при наличии также и броуновской диффузии):  $f$  – область осаждения только мелких частиц,  $m$  – область осаждения как мелких, так и крупных частиц,  $l$  – область осаждения только крупных частиц

Следовательно, эти факторы должны обязательно учитываться при моделировании движения мелко-дисперсных частиц в аппаратах электронно-ионной технологии. Предложенный алгоритм, как показывают вычислительные эксперименты, позволяет такое моделирование реализовать.

### Заключение

Рассмотрены вопросы численного моделирования движения мелких заряженных частиц в вязкой несжимаемой среде под действием гравитационного и электростатического полей. Проведено моделирование процесса электросепарации микрочастиц кубического нитрида бора путем численного решения системы уравнений Навье-Стокса-Пуассона-Фоккера-Планка. Полученные результаты подтверждают работоспособность модели и алгоритма, а данный подход в целом позволяет проводить моделирование сложных технологических процессов, протекающих в аппаратах электронно-ионной технологии с учетом основных значимых факторов.

### Литература

1. Maxey M.R., Riley J.J. // Phys. Fluids. 1983. V. 26. P. 883-896.
2. Под ред. И.П. Верещагина. Высоковольтные электротехнологии. – М.: из-во МЭИ, 1999. – 204 с.
3. А.С. Дикалюк, С.Т. Суржиков. Учет процесса зарядки твердых частиц при моделировании эволюции пылевой компоненты плазмы в нормальном тлеющем разряде // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2, 2011, с.1-9.
4. В.Б. Опарин, М.В. Петровская, К.Н. Виноградов. Зарядка и подвижность субмикронных и наночастиц в катодной области тлеющего разряда // Известия Самарского научного центра Российской академии наук, т. 11, №5(2), 2009, с.408-410.
5. О. Анощенко, Е. Хруслов, Х. Стефан, “Глобальные слабые решения системы Навье-Стокса-Власова-Пуассона” // Журн. матем. физ., анализ, геом., 6:2 (2010), 143–182.