

Введение В сверхкритических флюидных технологиях (СКФ) технологиях, протекающих с быстрым расширением сверхкритического раствора образование субмикронных и наночастиц с узким распределением по размерам, достигается за счет больших перенасыщений растворенного вещества [1]. В настоящей работе предложено математическое описание процессов зародышеобразования и роста частиц из перенасыщенного и переохлажденного флюидного раствора на основе капельной теории вблизи критической точки расширяющегося в канале и в свободной струе флюида включая окрестность диска Маха. Для учета влияния флуктуаций на процессы гидродинамики, массообмена, фазового равновесия и зародышеобразования предлагается использовать кроссоверное уравнение состояния Киселева [2]. Для нахождения полей температуры, давления, плотности и скорости потока используется система уравнений Навье-Стокса, которая решается при помощи пакета программ Ansys Fluent.

Гидродинамика процесса Для моделирования зародышеобразования и роста частиц во всем интервале расширяющегося потока необходимо знать поля температуры, давления, плотности и скорости. Для этого в данной работе поток сверхкритического раствора в расширительном устройстве постоянного сечения (рис. 1) рассматривается в двухмерным, осесимметричным, стационарным, вязким и сжимаемым [3]. Расчёты ведутся в областях а) канала расширения (1-2) и б) свободной струи (2-3). Рис. 1 - Упрощенная схема расширительного устройства: 1-2 канал расширения, 2-3 свободная струя

Для описания гидродинамики процесса расширения из резервуара бесконечного объёма через микронный канал с постоянным сечением при учете трения можно применить систему дифференциальных уравнений сохранения массы, сохранения импульса, сохранения энергии и уравнения состояния. Для случая двухмерного (2D) осесимметричного потока уравнение сохранения массы цилиндрических системах координат запишется в виде: (1) где x - осевая координата, ρ - плотность, r - радиальная координата, u - осевая скорость и v - радиальная скорость. Уравнение сохранения импульса в общем виде записывается в виде: (2) где p - статическое давление, ρ - плотность, τ_{rr} - тензор напряжений и $\sim g$ и $\sim F$ являются силой тяжести тела и внешней силой, зависящий от условий задачи. Для двумерного осесимметричного потока, радиальные и осевые уравнения сохранения импульса имеют вид: (3) (4) где (5) - радиальная скорость, u - осевая скорость, μ - молекулярная вязкость. Закон сохранения энергии в цилиндрических системах координат записываются в виде: (6) Для нашего случая уравнение энергии решается в следующей форме: (7) где (8) где E - полная энергия, k - молекулярный коэффициент теплопроводности, μ - молекулярный коэффициент вязкости. Описание термодинамических свойств чистого диоксида углерода в гидродинамической модели осуществляется при помощи уравнения состояния идеального газа: $Pv=RT$ (9) Вязкость диоксида углерода рассчитывается по формулам [156]: (10) где μ_{ideal} - вязкость идеального газа, (11) где C_1, C_2 - коэффициенты,

представленные в работе [4]. Здесь $\omega = \rho/\rho_c$ - приведённая плотность. Теплопроводность находится по следующей зависимости [4]: (12) где λ_{id} - теплопроводность идеального газа (13) Для учета турбулентности использована модель k- ϵ второго порядка. Давление на входе в канал ($P_x=0$) принимается равным давлению в системе до начала процесса расширения. Граничная температура на входе в канал ($T_x=0$) принимается равным к температуре предрасширения. Допускается, что на стенке канала $u_x=0$, . Термодинамические условия на выходе из камеры расширения приравняются к нормальным физическим условиям. Геометрические условия определяются из соотношения L/D . Решения уравнений сохранения импульса, сохранения массы и сохранения энергии проводятся численно методом конечных объемов. В начальном приближении задается температура по всей расчетной области равной 320 K, давление 250 бар, а плотность 50 кг/м³. Построение расчетной области выполнялось в графическом приложении программы Fluent - Gambit. В нашем случае для двухмерной (2D) осесимметричной геометрии потока была построена сетка для канала с отношением $L/D=1000/300$ мкм, а также для области свободной струи для камеры расширения $L/D=100/40$ мм. Входные граничные условия капиллярного канала (область 1 в рис.1) определяются в соответствии с экспериментальными данными и равны: $T=343$ K, $P=250$ бар. Результаты моделирования полей приведены на рис. 2-4. Рис. 2 - Профиль давления вдоль сопла и свободной струи Рис. 3 - Профиль осевой скорости вдоль сопла и свободной струи Рис. 4 - Профиль числа Маха вдоль сопла и свободной струи Как видно из рис.2 на выходе из канала в процессе расширения флюида наблюдается снижение давления до атмосферного. Как видно из рис. 3, после ударной волны осевая скорость в определенной области приобретает отрицательные значения, можно предположить о сильно турбулентности в этой области [5]. Скорость потока до ударной волны достигает значений в 700 м/с, что является нормой для подобного сопла и данных термодинамических параметров, а число Маха (рис. 4) достигает до значения 6, что свидетельствует о сверхзвуковом характере потока. На рис.4 можно наблюдать профиль числа Маха вдоль канала расширения и свободной струи. Выявлено, что на выходе из канала число Маха стремится к увеличению, после встречи расширяющегося потока со сверхзвуковой волной наблюдается резкое снижение значения числа Маха до нуля. Выводы Полученные профили расширяющегося сверхкритического флюида в канале и свободной струе позволяют оценивать значение равновесной концентрации растворенного вещества в сверхкритическом флюиде по уравнению состояния Пенга-Робинсона. Так как уравнения описывающие процессы зародышеобразования и роста частиц являются функциями от температуры, давления, мольной доли растворённого компонента и перенасыщения, то можно рассчитать зародышеобразование и рост частиц вдоль канала и свободной струи в соответствии с профилями

термодинамических параметров состояния.