

## УЛАВЛИВАНИЕ СУБМИКРОННЫХ АЭРОЗОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ ФИЛЬТРАМИ ИЗ НАНОВОЛОКОН

© 2023 г. В. А. Кириш<sup>1</sup>, \*, А. А. Кириш<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,  
Ленинский просп. 31, корп. 4, Москва, 119071 Россия

<sup>2</sup>Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”,  
пл. Академика Курчатова, 1, Москва, 123182 Россия

\*e-mail: va\_kirsch@mail.ru

Поступила в редакцию 27.06.2022 г.

После доработки 27.08.2022 г.

Принята к публикации 05.09.2022 г.

Рассмотрено осаждение аэрозольных частиц из стокового потока в фильтрах из нановолокон при числах Кнудсена  $K_n \sim 1$ . Эффективность улавливания частиц модельными фильтрами с 2D и 3D структурой определена численным моделированием с учетом эффекта скольжения газа на волокнах в зависимости от радиуса частиц  $r_p$ , параметров фильтров (радиуса нановолокон  $a$ , плотности упаковки  $\alpha$  и толщины фильтра) и от условий фильтрации. Показано, что коэффициенты захвата частиц нановолокнами в 2D и 3D модельных фильтрах при одинаковой малой плотности упаковки  $\alpha < 0.02$  практически не отличаются. Установлено, что зависимость проскока частиц от их радиуса при постоянной скорости, порядка нескольких см/с, при  $K_n \sim 1$  проходит через максимум, соответствующий частицам с радиусом  $r_p \sim a$ . Рассчитанные размеры наиболее проникающих частиц согласуются с экспериментом. Полученные результаты найдут применение при выборе аэрозолей для испытания фильтров из нановолокон.

DOI: 10.31857/S0023291222600316, EDN: KESENS

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема совершенствования фильтрующих материалов для тонкой очистки воздуха в наше время вновь стала актуальной. Достижения теории и практики тонкой фильтрации газов обеспечили научно-техническую революцию в 1980-х годах, в результате которой были осуществлены в широких масштабах технологические процессы микроминиатюризации, а теперь и наноминиатюризации. Однако проблема совершенствования фильтрующих материалов для тонкой очистки воздуха все еще остается актуальной из-за опасности эпидемий. Необходимо создавать высокоэффективные волокнистые фильтрующие материалы для респираторов с минимально возможным сопротивлением потоку (при заданной эффективности улавливания). Только с помощью тонковолокнистых фильтров можно обеспечить персональную защиту органов дыхания от взвешенных в воздухе частиц, включая биологические аэрозоли. Представляются перспективными методы совершенствования фильтрующих материалов за счет их электризации [1, 2] или модификации поверхности волокон фильтра при выращивании на них высокопористых слоев или наноиголочек [3].

В последнее время в качестве нового средства для тонкой очистки воздуха распространение получили фильтры из нановолокон [4–6]. Их привлекательность вызвана тем, что при одинаковом перепаде давления (сопротивлении потоку) они более эффективны или при одинаковой эффективности улавливания частиц такие фильтры обладают меньшим сопротивлением потоку. Рост их эффективности и уменьшение сопротивления связаны с эффектом скольжения газа на волокне, который характеризуется величиной числа Кнудсена  $K_n = \lambda/a$ , где  $\lambda$  – средняя длина свободного пробега молекул воздуха,  $a$  – радиус волокна. В предыдущем сообщении [7] было рассмотрено осаждение наночастиц (в точечном приближении) на нановолокна и было показано, что эффект скольжения газа слабо влияет на эффективность улавливания точечных частиц с малым параметром зацепления  $R = r_p/a \ll 1$ , где  $r_p$  – радиус частиц. Это наблюдалось в эксперименте, и было подтверждено расчетами. Но эффект скольжения должен заметно сказываться при увеличении размера частиц относительно радиуса волокна, когда частицы движутся в непосредственной близости у поверхности волокна, где скорость потока отлична от нуля.

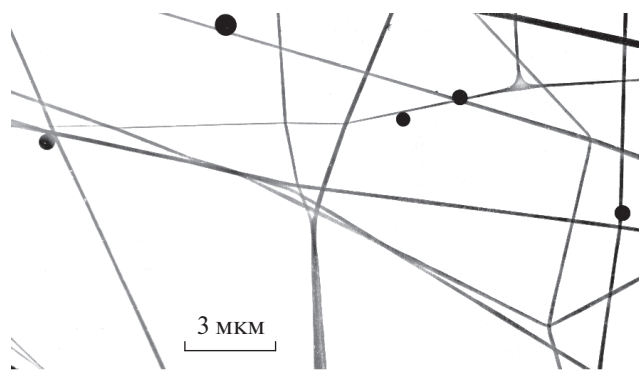


Рис. 1. Оплавленные субмикронные стеклянные частицы на полимерных нановолокнах фильтра.

В отсутствии диффузии частицы движутся по линиям тока, и осаждаются на волокно за счет эффекта касания (зацепления) [8]. В этом случае безразмерный коэффициент захвата (доля частиц из набегающего потока на волокно) равен расходу воздуха в пределах граничной траектории и для двумерного осесимметричного течения дается формулой

$$\eta_R = \int_1^{1+R} u_x(0, y) dy, \quad (1)$$

где  $u_x$  — тангенциальная компонента скорости потока. Все величины здесь и далее приведены к безразмерному виду. За характерные масштабы длины и скорости выбраны радиус волокна  $a$  и скорость потока перед фильтром  $U$ . Коэффициент захвата частиц волокном связан с эффективностью фильтра следующей формулой

$$E = 1 - n/n_0 = 1 - \exp(-2aL\eta), \quad (2)$$

где  $n$  и  $n_0$  — концентрация частиц после и до фильтра,  $L$  — длина волокон на единице площади фильтра. При одновременном учете эффекта зацепления и броуновского движения частиц величина коэффициента захвата возрастает. Совместное действие диффузии и зацепления при заданной постоянной скорости  $U$  характерно для области максимума проскока частиц. В этом случае кривая зависимости проскока  $n/n_0$  от размера частиц при заданной скорости проходит через максимум, соответствующий размеру, при котором осаждение происходит одновременно благодаря диффузии и зацеплению, причем их вклад в общий коэффициент захвата соизмерим [8]. Отметим, что для высокоэффективных фильтров характерна малая скорость потока, а в этом случае число Пекле  $Pe$ , определяющее диффузионное осаждение наночастиц за счет броуновского движения, для нановолокон соответствует  $Pe \sim 1$ , когда теория пограничного слоя не применима. Но при  $R \geq 1$  и  $Kn \sim 1$  осаждение частиц конечного размера на

волокна ранее не рассматривалось. Однако для новых типов высокопористых бимодальных (бидисперсных) фильтров расчет улавливания частиц при этих условиях представляет интерес, поскольку добавки нановолокон существенно повышают фильтрующие характеристики материала [9]. На рис. 1 показан слой нановолокон со сферическими частицами субмикронного размера. Осаждение таких частиц на нановолокна будет рассчитано в данном сообщении.

## 2. ВЫБОР МОДЕЛИ И ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ УРАВНЕНИЯ

Для рассмотрения осаждения на нановолокна более крупных микронных частиц при  $R > 1$  с учетом эффекта скольжения газа выберем соответствующую модель фильтра. Обычно используются модели, в которых принимается, что на единицу длины волокна в фильтре набегающий двумерный поперечный поток с однородной концентрацией аэрозолей. Результаты расчетов осаждения частиц на основе такого подхода, реализуемого в так называемой ячеечной модели [10] или в рядах параллельных волокон, перпендикулярных потоку, удовлетворительно согласуются с результатами экспериментов при диффузионном осаждении точечных частиц [8]. Но в случае, когда  $R > 1$ , ячеечная 2D модель не корректна для анализа эксперимента из-за того, что при малой диффузионной подвижности микронных частиц их концентрация за волокном не успевает стать однородной перед следующим слоем волокон. В этом случае в качестве 2D модели удобно рассматривать только отдельный ряд (рис. 2а) с расстоянием между волокнами, соответствующим расстоянию между волокнами в реальных фильтрах [8]. Поле течения в модельных фильтрах при малых числах Рейнольдса  $Re \ll 1$  не зависит от  $Re$ , а определяется отношением диаметра волокна  $2a$  к расстоянию между соседними волокнами  $2h$ . Для сравнения с экспериментальными данными для реальных фильтров необходимо выяснить, как сказывается трехмерность потока на осаждение слабодиффундирующих частиц. Это будет проверено с помощью двойной гексагональной модели (ДГМ) [11], составленной из двух гексагональных решеток параллельных волокон, вставленных одна в другую под прямым углом, где все волокна расположены перпендикулярно потоку (рис. 2б). Коэффициенты захвата частиц будут рассчитаны с одновременным учетом броуновской диффузии и зацепления в зависимости от числа Кнудсена, параметров фильтров и скорости течения газа. Метод расчета изложен в [12].

При обтекании волокон поле скоростей находилось численным решением стационарных урав-

нений Стокса [13], записанных в безразмерных переменных

$$\nabla p = \Delta \mathbf{u}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3)$$

где  $\mathbf{u}$  – вектор скорости потока,  $p$  – давление. В качестве граничных условий на поверхности волокон при  $\text{Kn} = 0$  ставится условие прилипания  $\mathbf{u} = 0$ , а при  $\text{Kn} > 0$  ставится условие прилипания для нормальных компонент скорости  $u_n$  и условие скольжения для тангенциальных компонент

$$u_n = 0, \quad \mathbf{u}_s = \tau \text{Kn} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{nn}), \quad (4)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}$  – тензор напряжений,  $\mathbf{I}$  – единичный тензор,  $\mathbf{n}$  – единичный вектор внешней нормали к поверхности,  $\tau = 1.147$  – коэффициент изотермического скольжения, учитывающий взаимодействие газовых молекул с поверхностью волокон [14]. При двумерном обтекании волокна условие (4) примет вид

$$u_r = 0, \quad u_\theta = \tau \text{Kn} \sigma_{r\theta}, \quad (5)$$

где  $\sigma_{r\theta}$  – касательное напряжение,  $r, \theta$  – безразмерные полярные координаты. Мы используем приближенную модель течения со скольжением вплоть до промежуточных чисел Кнудсена  $\text{Kn} \sim 0.1 - 1$ , поскольку профили скоростей, рассчитываемые этим методом, оказались близки к найденным в [15] более точным методом в рамках кинетической теории газов (решением уравнения Больцмана в приближении БГК). На входной границе расчетной ячейки (рис. 2) при  $x = -X$  ставится условие невозмущенной скорости  $u = 1$ , а при  $x = X$  – условие отсутствия вязких напряжений и нулевого давления  $p = 0$ . На боковых границах ячейки ставятся условия симметрии компонент скорости.

Поле концентрации находилось численным решением уравнения конвективной диффузии [16]

$$2\text{Pe}^{-1} \Delta n - \mathbf{u} \cdot \nabla n = 0, \quad (6)$$

где  $\text{Pe} = 2aU/D$  – диффузионное число Пекле,  $D$  – коэффициент диффузии частиц,  $n$  – концентрация, нормированная на  $n_0$ . В качестве граничных условий для концентрации на поверхности волокна ставилось условие полного поглощения  $n = 0$ , а на входе и выходе из расчетной ячейки ставились соответственно условия  $n = 1$  ( $x = -X$ ) и  $\partial c/\partial x = 0$  ( $x = X$ ). На боковых гранях ставились условия симметрии. Уравнения (3) и (6) решались с помощью методов вычислительной гидродинамики [17].

Безразмерный коэффициент захвата частиц конечного размера волокном в ряду с учетом диффузии и зацепления в общем случае рассчитывался по формуле

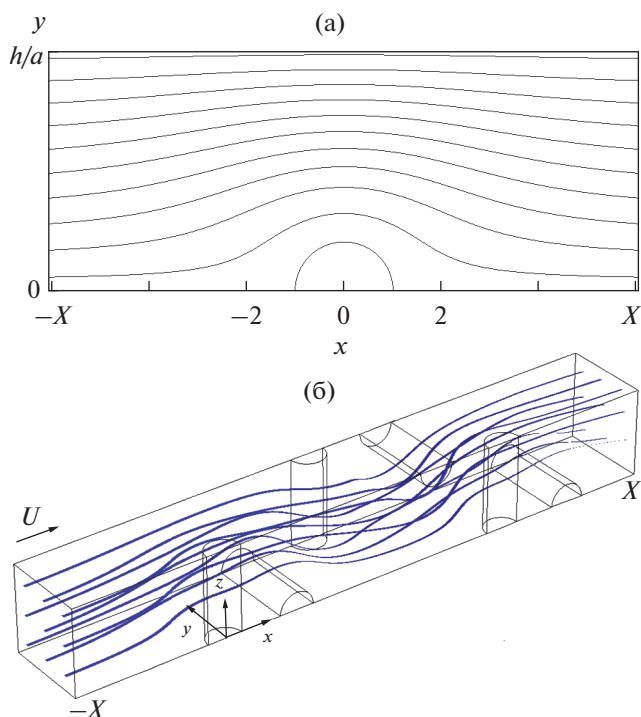


Рис. 2. Расчетные ячейки для ряда параллельных волокон (а) и ДГМ-фильтра (б).

$$\eta = \int_S j_n \Big|_{\rho = 1 + R} dS, \quad (7)$$

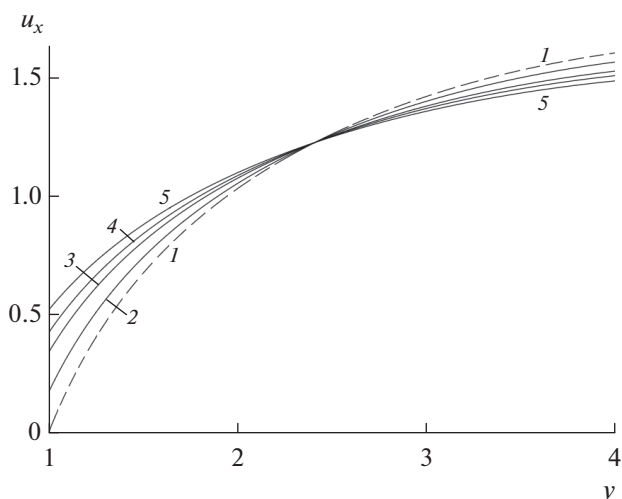
где  $j_n$  – нормальный диффузионный поток на волокно,  $dS$  – элемент поверхности волокна,  $\rho$  – полярный радиус в локальной системе координат в поперечном сечении волокна. Для ряда волокон с двумерным полем течения расчеты велись по формуле

$$\eta = \frac{2}{\text{Pe}} (1 + R) \int_0^\pi (\partial n / \partial r) \Big|_{r = 1 + R} d\theta. \quad (8)$$

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

#### 3.1. Осаждение частиц за счет эффекта зацепления

На рис. 3 дан пример рассчитанных профилей скорости потока вблизи волокон на линии, соединяющей центры соседних волокон в ряду при нескольких значениях  $\text{Kn}$  (поток направлен по оси  $Ox$ ), откуда видно, что расход воздуха вблизи волокон возрастает с ростом  $\text{Kn}$  и, следовательно, увеличивается осаждение частиц. Это наглядно показано на рис. 4, где приведены зависимости коэффициента захвата частиц за счет зацепления от  $R$  при разных  $\text{Kn}$ . На рис. 4 точки 1 и 2 получены численным моделированием для ряда волокон, а кривые 1' и 2' оценены по формуле [8]



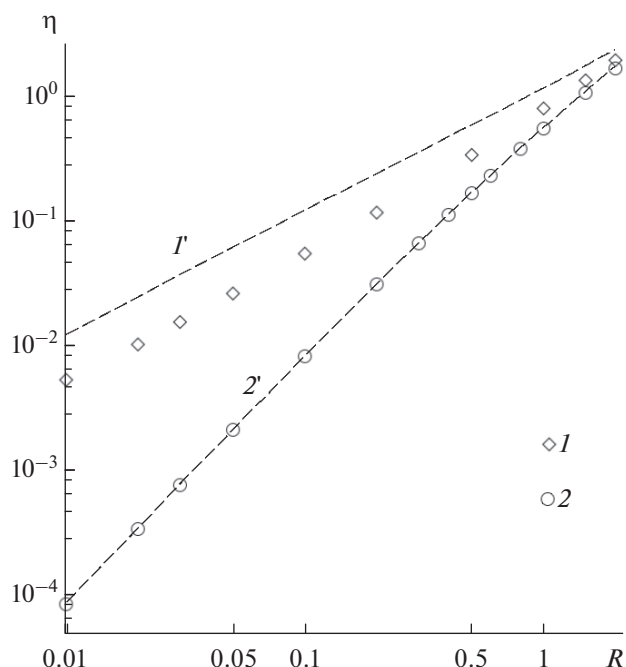
**Рис. 3.** Скорость потока вблизи волокна на линии, соединяющей центры соседних волокон в ряду с  $b = 0.2$  при  $\text{Kn} = 0$  (1), 0.1 (2), 0.3 (3), 0.5 (4); 1 (5).

$$\eta_R = (2k_1)^{-1} \{ (1+R)^{-1} - (1+R) + 2(1+R) \ln(1+R) + 2\tau \text{Kn} R(2+R)(1+R)^{-1} \}, \quad (9)$$

где  $k_1 = 4\pi/F$  – гидродинамический фактор. Здесь сила сопротивления волокна в ряду  $F$  (10) была получена экстраполяцией силы сопротивления, рассчитанной по (3) и (5), на область промежуточных и линейных чисел Кнудсена. Этот метод, впервые предложенный в [18], расширяет область применимости модели течения со скольжением.

Из рис. 4 следует, что значения  $\eta$  различаются в несколько раз при малых  $R$  и при разных  $\text{Kn}$ , а при больших  $R$  – всего на несколько процентов, причем при  $R > 1$  значения  $\eta$ , рассчитанные при довольно большом числе Кнудсена,  $\text{Kn} = 1.5$ , мало отличаются от расчетов  $\eta$  по (9). Таким образом, для частиц с размером, соизмеримым с радиусом нановолокон, при  $R \sim 1$  влияние эффекта скольжения на осаждение частиц мало. Отметим, что расчетные  $\eta$  (кривая 2) точно совпадают с оценками  $\eta$  (2') по аналитической формуле во всем диапазоне  $R$ . Этот результат может быть использован в расчетах фильтрации грубодисперсных аэрозолей, когда влияние диффузии не существенно.

Здесь следует особо отметить, что к расчету силы сопротивления  $F$  для нановолокон при  $\text{Kn} \sim 1$  гидродинамический подход “течения со скольжением” не применим, поскольку поправка на скольжение в этом случае [19] пропорциональна величине  $\text{Kn}/(1+\text{Kn})$ , в результате чего расчетная эффективность при  $\text{Kn} \sim 1$  будет сильно завышена. Поэтому мы используем подход, впервые предложенный в [18], основанный на экспериментальных данных, из которых следует, что обратная ве-



**Рис. 4.** Зависимости коэффициента захвата частиц за счет эффекта зацепления (без учета диффузии) от параметра зацепления  $R$  в отдельном ряду с  $b = 0.169$  при  $\text{Kn} = 1.5$  (1, 1') и  $\text{Kn} = 0$  (2, 2'), 1, 2 – численное моделирование, 1', 2' – оценки по формуле (9).

личина перепада давления для модельных и реальных фильтров, в том числе полидисперсных, в широком диапазоне чисел Кнудсена пропорциональна давлению газа или, что  $F^{-1} \sim \text{Kn}$ . Для изолированного ряда волокон эта зависимость, полученная линейным разложением (экстраполяцией) по  $\text{Kn}$  формулы, выведенной при  $\text{Kn} \ll 1$ , оказалась применима для расчета  $F$  и при  $\text{Kn} > 1$  до  $\text{Kn} \approx 4$  [18, 8]:

$$\begin{aligned} F^{-1} &= F_0^{-1} + \frac{\tau \text{Kn}}{4\pi} \left( 1 - \frac{2}{3} t^2 \right), \\ F_0 &= 4\pi \left( 1 - 2 \ln 2t + \frac{2}{3} t^2 \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (10)$$

где  $t = \pi a/2h$ ,  $F_0$  – сила сопротивления волокна в ряду при  $\text{Kn} = 0$ . Сила сопротивления волокна единичной длины  $F$  связана с перепадом давления в ряду волокон формулой  $\Delta p = U\mu FL$ , где  $U$  – скорость потока перед фильтром,  $\mu$  – вязкость газа,  $L = 1/2h$  – длина волокон на единице площади.

Линейность зависимости  $F^{-1}(\text{Kn})$  впоследствии была подтверждена методами кинетической теории газов в [15].

### 3.2. Осаждение броуновских частиц с учетом эффекта зацепления

При вычислении осаждения броуновских частиц учитываем одновременно диффузию частиц, размер частиц и влияние эффекта скольжения в кнудсенском слое у поверхности волокна с толщиной порядка радиуса волокна. Отметим, что ряд задач в этой области был решен ранее [8]. Для  $R < 1$  для двумерного течения, без учета эффекта скольжения, Стечкина и Фукс впервые показали, что коэффициент захвата, рассчитанный в приближении диффузионного пограничного слоя с учетом конечного размера частиц, превышает сумму коэффициентов захвата за счет отдельных механизмов осаждения—диффузии и зацепления [20]. Много лет спустя было показано, что в условиях сильного влияния эффекта скольжения при  $\text{Kn} > 1$  суммарный коэффициент захвата должен быть равен сумме  $\eta_D + \eta_R$ , и может быть даже меньше этой суммы [21]. Эти расчеты относились к малым  $R$ . При  $\text{Kn} \sim 1$  и  $R \sim 1$  этого не происходит.

На рис. 5 даны примеры расчета коэффициентов захвата при  $\text{Kn} = 1.3$  для  $R = 1$  и  $R = 2$  в отдельном ряду (2D) нановолокон с  $2a = 100$  нм, откуда видно, что суммарный коэффициент захвата  $\eta$  превышает сумму коэффициентов захвата за счет диффузии  $\eta_D$  и зацепления  $\eta_R$ . Здесь коэффициенты захвата находились из рассчитанных величин проскока частиц через ряд волокон, которые связаны простой формулой

$$n/n_0 = 1 - 2a\tilde{N}\eta = 1 - b\eta, \quad (11)$$

где  $b = a/h$ ,  $2h$  — расстояние между центрами волокон в ряду,  $\tilde{N} = 1/2h$  — число волокон на единице площади. И, более того, как видно из следующего рис. 6, полученные численным моделированием значения коэффициентов захвата в области минимума примерно равны значениям коэффициентов захвата  $\eta$ , оцененным для изолированных рядов с разными диаметрами волокон и разными расстояниями между ними по формулам [8]

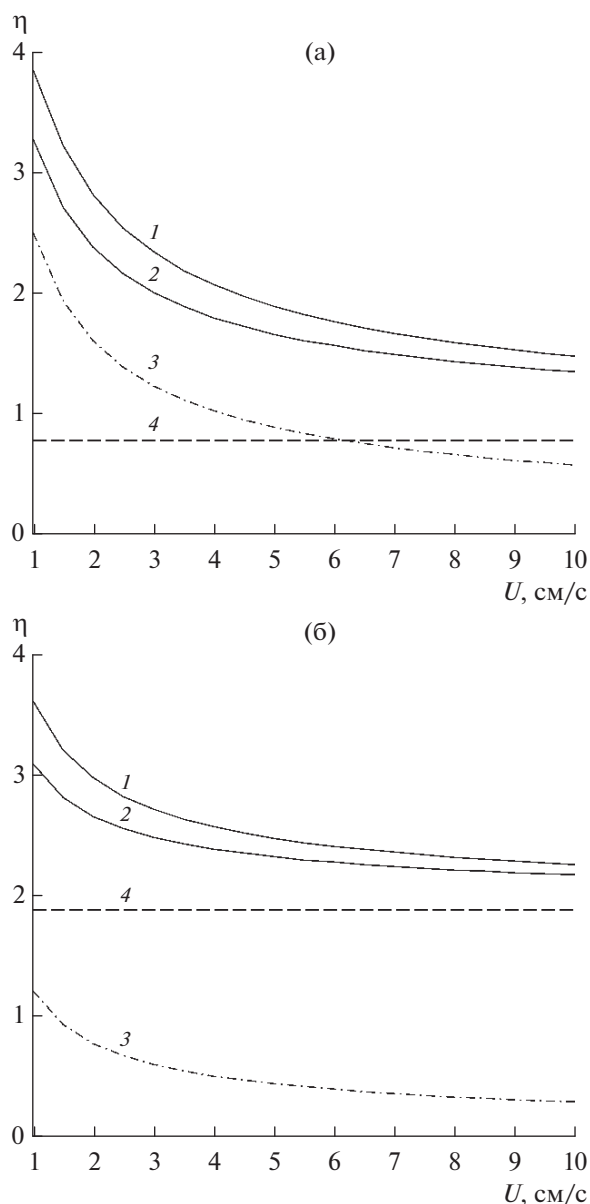
$$\eta = \eta_R + \eta_D + \eta_{DR}, \quad (12)$$

$$\eta_D = 2.9k_1^{-1/3} \text{Pe}^{-2/3} (1 + 0.39k_1^{-1/3} \text{Pe}^{1/3} \text{Kn}), \quad (13)$$

$$\eta_{DR} = 1.24k_1^{-1/2} \text{Pe}^{-1/2} R^{2/3}. \quad (14)$$

Здесь  $\eta_R$  — коэффициент захвата за счет зацепления (9). Отметим, что удвоение диаметра волокон или удвоение шага в ряду волокон слабо влияет на положение минимума, и соответствует размеру частиц, примерно равному толщине нановолокон.

Рассмотренные выше вопросы осаждения частиц на нановолокна относились к плоскому течению в 2D модели. Влияние трехмерного течения на осаждение частиц на нановолокна при  $\text{Kn} \sim 1$  и  $R > 1$  показано на рис. 7. Здесь представлены кри-

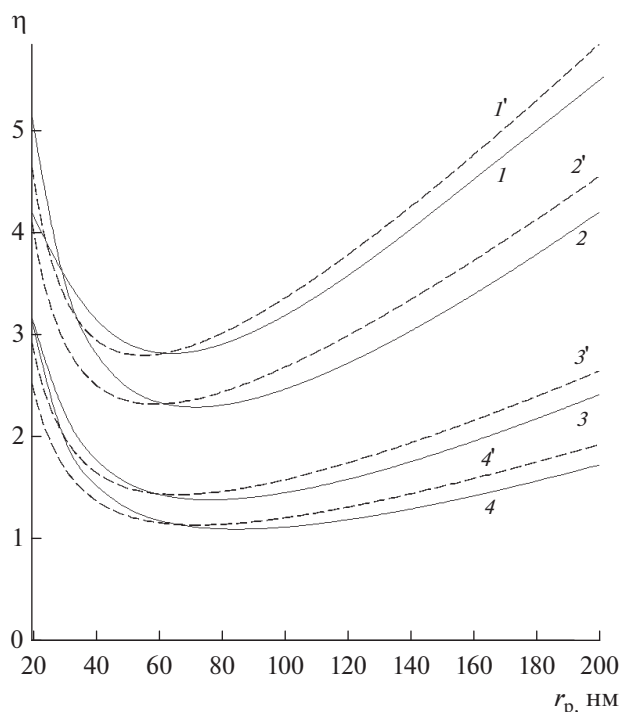


**Рис. 5.** Зависимости коэффициента захвата субмикронных частиц от скорости при  $R = 1$  (а) и  $R = 2$  (б) для ряда волокон с  $a = 50$  нм ( $\text{Kn} = 1.3$ ) и  $b = 0.17$ : 1 — численное моделирование с одновременным учетом диффузии и зацепления, 2 — аддитивное приближение  $\eta_R + \eta_D$ , 3 —  $\eta_D$ , 4 —  $\eta_R$ .

вые зависимости коэффициентов захвата при  $U = 2$  см/с и при  $\text{Kn} \sim 1$  и  $R > 1$  для 2D и для 3D модели. В качестве 3D модели выбраны пористые ДГМ фильтры, состоящие из шести параллельных рядов волокон с  $2a = 100$  нм и с  $2a = 200$  нм с  $b = 0.01$ ,  $b = 0.1$  и  $b = 0.2$ . Коэффициент захвата в отдельном ряду рассчитывался по формуле (11), а в ДГМ фильтре по формуле

$$n/n_0 = \exp(-bN\eta), \quad (15)$$





**Рис. 6.** Зависимости коэффициентов захвата от радиуса частиц, рассчитанные при  $U = 2$  см/с прямым численным моделированием (1–4) и по формуле (12) (1'–4') для рядов волокон с  $a = 50$  нм (1, 1', 2, 2') и  $a = 100$  нм (3, 3', 4, 4') при  $b = 0.2$  (1, 1', 3, 3') и  $b = 0.1$  (2, 2', 4, 4').

где  $N$  — число рядов волокон. В предположении о выравнивании концентрации за каждым слоем волокон проскок за фильтром может быть выражен как  $n/n_0 = (1 - b\eta)^N$ , откуда при  $N \rightarrow \infty$  следует формула (15). Из рис. 7 следует, что для рассмотренных высокопористых моделей кривые зависимостей почти сливаются. Различие коэффициентов захвата возрастает с увеличением плотности упаковки слоя волокон и с уменьшением толщины волокон, причем с ростом скорости течения различие уменьшается во всем диапазоне размеров (здесь не показано). Для наиболее распространенных сегодня фильтров из нановолокон с  $a = 100$  нм можно считать, что в области минимума эффективности (максимума проскока) значения  $\eta$  для 2D и 3D моделей почти равны и, следовательно, это новый и важный для практики результат, поскольку для оценки коэффициентов захвата и, соответственно, эффективности высокопористых однородных фильтров при больших значениях  $R$  и  $K_n$  можно использовать расчетные данные коэффициентов захвата для одного ряда, которые, как следует из рис. 6, в области минимума совпадают с оценками по простым аналитическим формулам. Отметим также,

что этот вывод относительно высокопористых слоев с  $b = 0.01-0.1$  является основой для расчета эффективности новых бимодальных фильтров, в которых нановолокна распределены между микроволокнами в слое на большом расстоянии друг от друга.

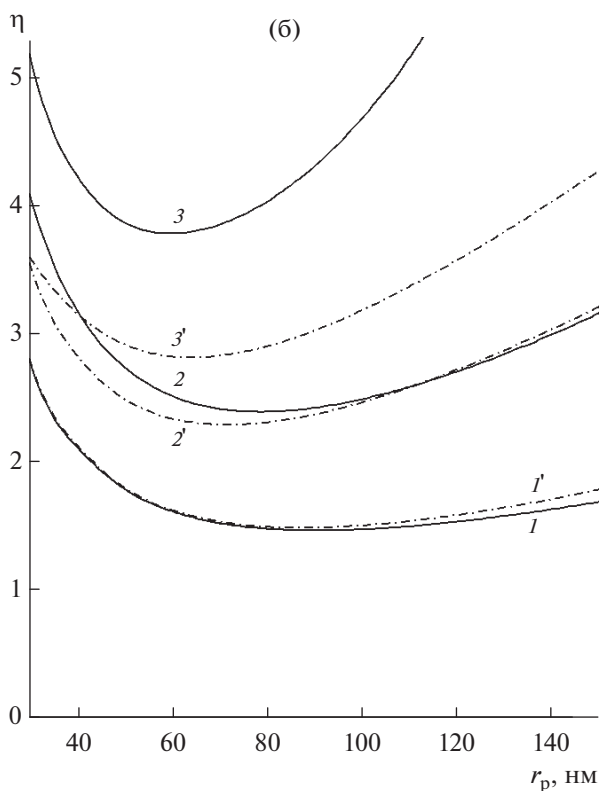
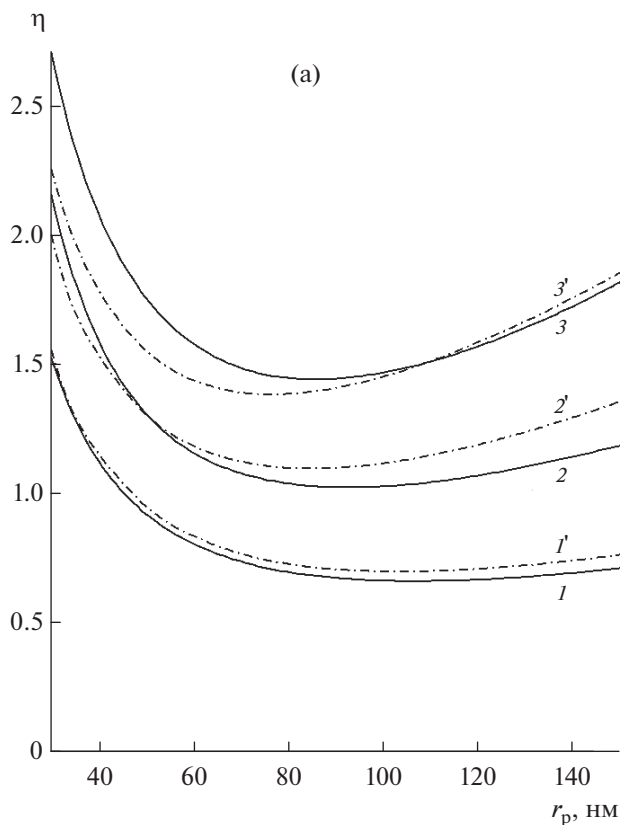
#### 4. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Поскольку экспериментов с моделями из рядов эквидистантных нановолокон пока проведено не было, сравнение расчетов дадим с результатами экспериментов, полученными с реальными слоями нановолокон. В данном случае для сравнения мы выбрали работы [5, 6], в которых фильтры были изготовлены методом электроспиннинга, когда слипания волокон не происходит [7]. При сравнении с экспериментальными данными для точечных частиц погрешность при оценке плотности упаковки не важна (поскольку, как было впервые обнаружено в [22], в трехмерной высокопористой системе при  $\alpha < 0.1$  диффузионное осаждение частиц не зависит от плотности упаковки, т.е. если высокопористый фильтр сжимается, то эффективность осаждения точечных частиц не изменяется). Но для сравнения коэффициентов захвата частиц в области их минимума необходимо точное знание  $\alpha$ . Однако авторы, например, работы [5], как и многие другие, величину  $\alpha$  находят по измеренной величине перепада давления из эмпирической формулы Девиса [23], полученной без учета эффекта скольжения газа на волокнах

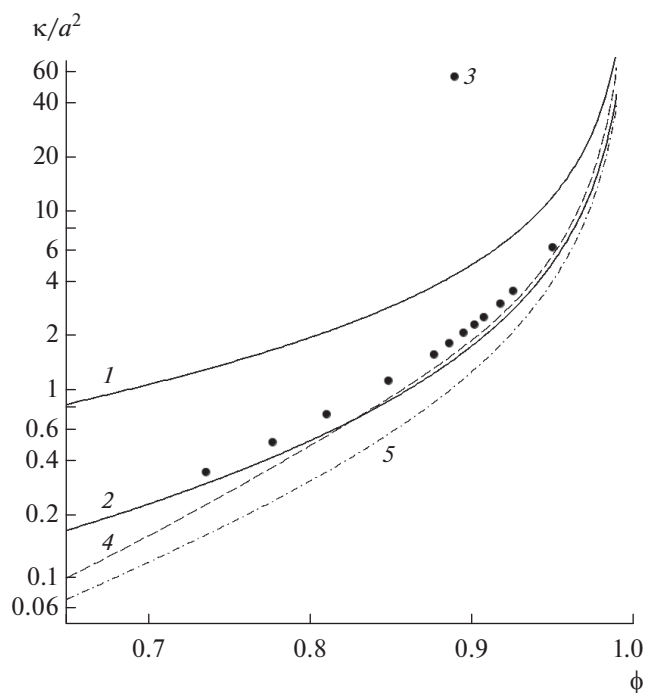
$$\kappa/a^2 = U\mu H/\Delta p a^2 = [16\alpha^{1.5}(1 + 56\alpha^3)]^{-1}. \quad (16)$$

Насколько большую ошибку при этом они совершают, можно судить по рис. 8, где в зависимости от пористости фильтров  $\varphi = 1 - \alpha$  даны значения, пропорциональные проницаемости воздуха  $\kappa$  через разные фильтры при  $K_n = 0$  (кривые и точки 2–5) и при  $K_n = 1$  (кривая 1). Из этого рисунка видно, что рост неоднородности расположения волокон в фильтре несколько увеличивает его проницаемость (точки выше кривых), но особенно резко проницаемость возрастает с ростом  $K_n$  и, следовательно, учет эффекта скольжения при определении  $\alpha$  для фильтров из нановолокон совершенно необходим.

При определении плотности упаковки фильтров в [5] были использованы данные, приведенные в этой статье в табл. 1 и на рис. 11 для фильтра из нановолокон с  $a = 47$  нм при  $U = 5$  см/с. Перепад давления при этой скорости был равен  $\Delta p = 20.91$  Па. Вес нановолокон на единице площади составлял  $W = 0.0423$  г/м<sup>2</sup>. Плотность материала волокон была равна  $\rho = 1.081$  г/см<sup>3</sup>. Исходя из этих данных, и принимая в качестве однородного 3D-фильтра ДГМ модель, находим плотность упаковки по формуле



**Рис. 7.** Зависимости коэффициента захвата от радиуса частиц: (а)  $a = 100$  нм, (б)  $a = 50$  нм;  $b = 0.01$  (1, 1'),  $b = 0.1$  (2, 2'),  $b = 0.2$  (3, 3'). 1'–3' – ряд параллельных волокон (2D), 1–3 – ДГМ 3D-фильтр,  $U = 2$  см/с.



**Рис. 8.** Зависимости проницаемости  $\kappa a^{-2}$  от пористости  $\phi = 1 - \alpha$ , 1, 2 – прямое численное моделирование для ДГМ 3D-фильтра при  $\text{Kn} = 1$  (1) и  $\text{Kn} = 0$  (2), 3 – расчеты для неоднородных рядов волокон [24], 4 – по эмпирической формуле Девиса (16), 5 – по формуле Кувабары для ячеечной модели с 2D полем течения.

$$\Delta p / U \mu = LF = (\alpha H / \pi a^2) F, \quad (17)$$

где  $\alpha H = W / \rho$ , а сила сопротивления единицы длины волокна  $F$  равна

$$F^{-1} = F_0^{-1} + (1.2/4\pi)(1 - \alpha) \text{Kn}, \quad (18)$$

$$F_0 = 4\pi(-0.5 \ln \alpha - 0.46 + \alpha^2)^{-1}.$$

Найденное значение плотности упаковки фильтра оказалось равным  $\alpha = 0.02$ , что в три раза превышает значение, приводимое в таблице в [5], и более соответствует фильтрам, показанным на приведенных там фотографиях (рис. 5, [5]), из-за малой толщины фильтра ( $H = 2$  мкм). Но экспериментальные значения проскоков наиболее проникающих частиц в области максимума во много больше расчетных, возможно из-за того, что на величину проскока оказывает влияние неоднородность слоя волокон по площади фильтра из-за малой толщины фильтра. Возможно также, что эта неоднородность расположения волокон в слое вызвана тем, что осаждение нановолокон происходит не на плоскую поверхность, а на субстрат – грубоволокнистую поверхность. В этом случае нановолокна стремятся осесть на эти волокна. Но, тем не менее, расчет осаждения частиц в слое таких волокон при скорости  $U = 5$  см/с по-

**Таблица 1.** Сравнение расчетных значений коэффициентов проскока  $n/n_0$  через модельные (ДГМ) 3D-фильтры из нановолокон с экспериментальными данными из [6] (даны в скобках)

$a$ (нм)	$r_p$ (нм)		
	50	100	150
100 (6 слоев волокон)	0.1340 (0.33)	0.1567 (0.39)	0.0842 (0.29)
150 (4 слоя)	0.3731 (0.60)	0.4553 (0.68)	0.3806 (0.61)

казывает, что в области максимума проскока радиус наиболее проникающих частиц примерно равен радиусу нановолокон.

Этот же вывод следует и из другой работы [6]. Здесь слой нановолокон наносился на гладкую металлическую заземленную поверхность, причем авторам удалось измерить толщину и плотность упаковки, но данные эффективности улавливания частиц сравнивали с эмпирическими формулами, полученными с неоднородными фильтрами из волокон диаметром 9 мкм без учета эффекта скольжения [25]. Более того, в своих расчетах авторы также использовали формулу Девиса (16). Но поскольку, как мы сказали выше, эти авторы получали фильтры электродинамическим методом и слипания волокон в них быть не должно, то их данные по проскоку можно использовать для сравнения с теорией. Сравнение полученных нами расчетных и экспериментальных данных, приведенных в [6], даны в табл. 1.

Из табл. 1 видно, что максимальные расчетные и экспериментальные значения проскоков частиц для фильтров из нановолокон соответствуют одинаковым частицам, причем положение максимума проскока наблюдаются именно при размере частиц, близким к диаметру нановолокон. Расчеты для параметров фильтров, приведенных в [6], были выполнены в [7] для модельных ДГМ 3D фильтров при  $U = 1.67$  см/с для  $N = 6$  слоев нановолокон с  $a = 100$  нм и  $N = 4$  слоя нановолокон с  $a = 150$  нм. Что касается абсолютных значений проскоков частиц, то, как и следовало ожидать, рассчитанные величины оказались меньше экспериментальных, что связано с тем, что реальные слои очень тонкие, и поэтому структура слоев нановолокон не вполне однородная, в результате чего через них наблюдается больший проскок частиц. Но важно, что размер наиболее проникающих частиц через фильтры из нановолокон соизмерим с толщиной нановолокон, т.е. максимум проскока частиц через фильтр из нановолокон при  $K_n \sim 1$  соответствует  $R \sim 1$ , что следует учитывать при выборе аэрозолей для испытания таких фильтров.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрено осаждение аэрозольных частиц из стокова потока в модельных фильтрах из нановолокон с 2D и 3D структурой с учетом эффекта скольжения газа. В работе были рассчитаны коэффициенты проскока частиц через модельные фильтры в зависимости от размеров частиц, параметров фильтров (диаметра нановолокон, плотности упаковки и толщины фильтра) и от условий фильтрации. Было показано, что в области размеров частиц, соответствующих максимуму их проскока через фильтр, осаждение частиц происходит в результате действия двух механизмов осаждения – диффузии и зацепления, причем размер наиболее проникающих частиц оказался почти равным толщине нановолокон. Это должно быть учтено при выборе аэрозолей для испытания фильтров. Показано также, что в высокопористых фильтрах из нановолокон значения коэффициентов захвата частиц в 2D и 3D моделях оказались одинаковыми. Этот результат представляется полезным, поскольку расчеты эффективности фильтров из нановолокон можно проводить для более простого 2D течения в ряду нановолокон, что значительно сокращает расчетное время. И, более того, рассчитанные значения коэффициентов захвата частиц в высокопористых 2D моделях в области максимума проскока оказались примерно равными значениям коэффициентов захвата, рассчитанным по аналитическим формулам, что еще более упрощает теоретические оценки эффективности фильтров и размеров тестовых частиц. Для плотных фильтров из нановолокон эффективность осаждения частиц в 3D существенно больше, чем в 2D фильтрах, и расчеты эффективности в этом случае возможны только численными методами.

В заключение необходимо отметить, что, несмотря на возможное большое различие диаметров частиц и нановолокон (рис. 1), сдува частиц с нановолокон при обычных скоростях фильтрации, порядка нескольких см/с, не происходит. В этом случае коснувшиеся волокна частицы удерживаются молекулярными силами адгезии, которые на порядки превышают гидродинамическую силу сдува [26]. Добавим, что при использовании высокопористых материалов из нановолокон в респираторах, скорость потока через которые может составлять  $U \sim 10$  см/с и более, необходимо учитывать инерцию частиц. Осаждение инерционных частиц на нановолокна будет рассмотрено в следующих сообщениях.

## ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке НИЦ “Курчатовский институт” (приказ № 619 от 28.03.2022).



### КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Черняков А.Л., Кириш А.А. Эффективность фильтрации волокнистыми материалами с неоднородным распределением зарядов на волокнах // Коллоид. журн. 2015. Т. 77. С. 792–801.
2. Петрянов И.В., Кощеев В.С., Басманов П.И. и др. “Лепесток” – легкие респираторы. Издание 2-е, М.: Наука, 2015.
3. Кириш А.А., Кириш В.А. Улавливание аэрозольных частиц фильтрами из волокон, покрытых слоями вискером // Коллоид. журн. 2019. Т. 81. № 6. С. 706–716.
4. Xia T., Bian Y., Zhang L., Chen C. Relationship between pressure drop and face velocity for electrospun nanofiber filters // Energy and Buildings. 2018. V. 158. P. 987–999.
5. Hung C.H., Leung W.W.F. Filtration of nano-aerosol using nanofiber filter under low Peclet number and transitional flow regime // Separation and Purification Techn. 2011. V. 79. № 1. P. 34–42.
6. Kim H.B., Lee W.J., Choi S.C., Lee K.E., Lee M.N. Filter quality factors of fibrous filters with different fiber diameter // Aerosol Sci. Techn. 2021. V. 55. № 2. P. 154–166.
7. Кириш В.А., Кириш А.А. Улавливание наноаэрозолей фильтрами из нановолокон // Коллоид. журн. 2021. Т. 83. № 6. С. 651–659.
8. Kirsch A.A., Stechkina I.B. The theory of aerosol filtration with fibrous filters, Ch. 4, in Fundamentals of Aerosol Science / Ed. By Shaw D.T. N.Y.: Wiley-Interscience, 1978. P. 165–256.
9. Choi H.Y., Kumita M., Seto T., Inui Y., Bao L., Fujimoto T., Otani Y. Effect of slip flow on the pressure drop of nanofiber filters // J. Aerosol Sci. 2017. V. 114. P. 244–249.
10. Kuwabara S. The forces experienced by randomly distributed parallel circular cylinders or spheres in a viscous flow at small Reynolds numbers // J. Phys. Soc. Jpn. 1959. V. 14. № 4. P. 527–532.
11. Кириш В.А. Гидродинамическое сопротивление трехмерных модельных волокнистых фильтров // Коллоид. журн. 2006. Т. 68. № 3. С. 293–298.
12. Кириш В.А. Осаждение аэрозольных наночастиц в волокнистых фильтрах // Коллоид. журн. 2003. Т. 65. № 6. С. 795–801.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц И.М. Теоретическая физика, Т. 6 Гидродинамика. Издание 4-е, М.: Наука, 1988.
14. Albertoni S., Cercignani C., Gotsusso L. Numerical evaluation of the slip coefficient // Phys. Fluids. 1963. V. 6. № 7. P. 993–996.
15. Ролдугин В.И., Кириш А.А., Емельяненко А.М. Моделирование аэрозольных фильтров при промежуточных числах Кнудсена // Коллоид. журн. 1999. Т. 61. № 4. С. 530–542.
16. Левич В.Г. Физико-химическая гидродинамика. М.: ГИФМЛ, 1959.
17. Берковский Б.М., Полевиков В.К. Вычислительный эксперимент в конвекции. Минск: “Университетское”, 1988.
18. Kirsch A.A., Stechkina I.B., Fuchs N.A. Effect of gas slip on the pressure drop in a system of parallel cylinders // J. Colloid Interface Sci. 1971. V. 37. № 2. P. 458–461.
19. Pich J. Pressure drop of fibrous filters at small Knudsen Numbers // Ann. Occup. Hyg. 1966. V. 9. № 1. P. 23–27.
20. Стечкина И.Б., Фукс Н.А. Исследование в области волокнистых аэрозольных фильтров. Расчет диффузионного осаждения аэрозолей в волокнистых фильтрах // Коллоид. журн. 1967. Т. 29. № 2. С. 260–265.
21. Кириш В.А. Осаждение субмикронных аэрозольных частиц в фильтрах из ультратонких волокон // Коллоид. журн. 2004. Т. 66. № 3. С. 352–357.
22. Кириш А.А., Фукс Н.А. Исследования в области волокнистых аэрозольных фильтров. Диффузионное осаждение аэрозолей // Коллоид. журн. 1968. Т. 30. № 6. С. 836–841.
23. Davies C.N. The separation of airborne dust and particles // Proc. Inst. Mech. Engineers, London. 1952. V. 167. № 5. P. 185–213.
24. Reai M., Drolet F., Vidal D., Vadeiko I., Bertrand F. A Lattice Boltzmann approach for predicting the capture efficiency of random fibrous media // Asia-Pacific J. Chem. Eng. 2011. V. 6. № 1. P. 29–37.
25. Lee K.W., Liu B.Y.H. Theoretical study of aerosol filtration by fibrous filters // Aerosol Sci. Techn. 1982. V. 1. № 2. P. 147–161.
26. Кириш В.А., Кириш А.А. Влияние наноиголочек на волокнах и частицах на эффективность фильтрации аэрозолей // Коллоид. журн. 2021. Т. 83. № 3. С. 293–301.