

Рис.1. Лабораторная установка для сульфидирования арсенидов кобальта в парах элементарной серы (а) и в смеси с пиритом (б) при пониженном давлении: 1 — вакуумный кварцевый реактор; 2 — кварцевая ампула с навеской элементарной серы; 3 — низкотемпературная электропечь; 4 — высокотемпературная электропечь; 5 — алундовая лодочка с навеской арсенида кобальта; 6 — разъемный фарфоровый конденсатор; 7 — вакуумное уплотнение; 8 — к вакуумному насосу.

нием охраны окружающей среды, к которым относятся возгоночный обжиг в нейтральной, слабовосстановительной, серосодержащей среде [1, 2] или в вакууме [3–5] с удалением мышьяка в малотоксичной металлической или сульфидной форме.

Одними из наиболее прочных соединений мышьяка являются кобальтсодержащие минералы и продукты их термического разложения.

Арсениды кобальта трудно поддаются термическому разрушению с возгонкой мышьяка: даже в вакууме они разлагаются с большой скоростью при температуре выше 1000 °С. Значительно ускорить возгонку мышьяка возможно в присутствии пирита или паров серы. Поэтому для создания и оптимизации вакуумтермической технологии переработки кобальтсодержащего сырья в лаборатории вакуумных процессов АО «Центра наук о Земле, металлургии и обогащения» были исследованы закономерности процесса возгонки мышьяка из арсенидов кобальта при пониженном давлении в присутствии паров серы и в смеси с пиритом.

Кобальт с мышьяком образует ряд соединений. Наиболее часто встречаются в сырье или формируются в процессе термического разложения сульфоарсенидов арсениды $CoAs_2$, $CoAs$ и Co_2As .

Изучение процесса сульфидирования арсенидов кобальта при пониженном давлении осуществляли термогравиметрическим методом с периодическим взвешиванием навески исходного препарата на горизонтальной вакуумной установке с кварцевым реактором (рис.1), химическим, рентгенофазовым и минералогическим анализами огарков и конденсатов. Экспериментальное исследование проводили с синтетически полученными арсенидами кобальта.

Опыты по исследованию влияния основных факторов на степень возгонки мышьяка из ар-

сенидов кобальта в присутствии паров элементарной серы проводили с навесками арсенида кобальта и серы по 3 г, помещенных в прокаленную фарфоровую лодочку и кварцевую ампулу с открытым концом соответственно. Система промывалась аргоном и эвакуировалась. Затем лодочка и ампула устанавливались в кварцевой реакционной трубе так, чтобы при погружении трубы в нагретые до заданных температур электропечи навески размещались в изотермических зонах: низкотемпературной для серы и высокотемпературной для арсенида кобальта. При нагревании сера испарялась, пары серы проходили над поверхностью арсенида и реагировали с ним. Мышьяк соединялся с серой и испарялся, конденсируясь в холодной зоне.

При использовании пирита в качестве сульфидизатора навески арсенида кобальта брались по 2 г. Реактор с лодочкой, в которой находилась смесь арсенида кобальта и пирита, после промывки аргоном и откачки до требуемого давления помещался в изотермическую зону электропечи, предварительно нагретой до заданной температуры. Момент достижения навесками необходимой температуры считался началом опыта. По окончании опыта кварцевый реактор вынимали из печи и охлаждали под вакуумом, лодочку с огарком и ампулу с остатками серы взвешивали, а огарок анализировали

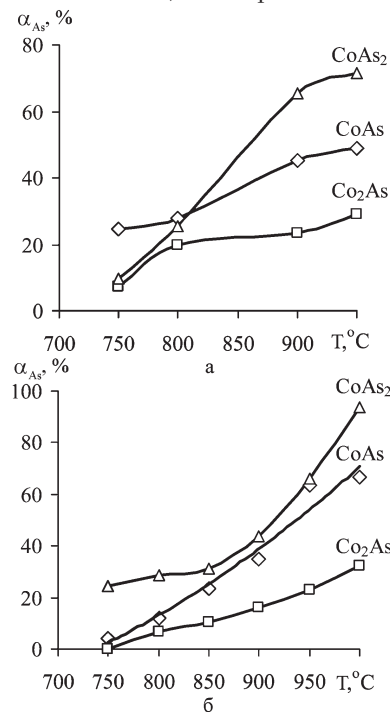


Рис.2. Влияние температуры (Т) обработки на степень возгонки мышьяка (α_{As}) из арсенидов кобальта при использовании в качестве сульфидизатора пирита (а) или паров серы (б).

Коэффициенты обобщенных уравнений (1), (2)

Материал	A	n1	n2	n3	n4	E _{каж} , кДж/моль
CoAs ₂	-4,12/-1,74	7,49/8,617	-0,11/-0,25	0,79/0,376	0,55/0,31	57,9/132,0
CoAs	-2,23/-3,9	11,49/3,085	-0,25/-0,09	0,55/0,359	0,23/0,53	145,8/60,8
Co ₂ As	-11,1/-10,8	6,61/6,605	-1,20/-0,24	0,80/1,142	0,82/1,22	96,7/99,5

Примечание. В числителе – сульфидирование парами элементарной серы, в знаменателе – сульфидирование в смеси с пиритом.

на содержание мышьяка. Кроме того, производили рентгенофазовый и минералогический анализы огарка и конденсата.

Конденсат состоял из сульфидов мышьяка различного состава, в огарке были обнаружены арсениды и сульфиды кобальта, пирротины различного состава.

Было исследовано влияние расхода сульфидизатора, температуры, давления и продолжительности вакуумной обработки на степень возгонки мышьяка из арсенидов кобальта.

Изучение влияния температуры процесса на степень возгонки мышьяка из арсенидов кобальта проводили при постоянных давлениях (1,33 или 0,04 кПа), продолжительности обработки (30 мин), расходе серы (≈ 80 %) или пирита (80–100 % от массы арсенида кобальта). Результаты опытов приведены на рис.2. Видно, что степень возгонки мышьяка из всех исследованных арсенидов возрастает с увеличением температуры и содержания мышьяка в исходном арсениде, то есть в ряду Co₂As – CoAs – CoAs₂.

На примере моноарсенида кобальта (CoAs) показано влияние основных факторов на степень возгонки мышьяка (рис.3), для сравнения приведены результаты ранее проведенных опытов по возгонке мышьяка без сульфидизаторов. Видно, что применение сульфидизаторов заметно увеличивает степень возгонки мышьяка, без которых возгонка начинается лишь при температурах более 1000 °С. При температурах менее 900–950 °С использование пирита в качестве сульфидизатора более эффективно, чем серы. С увеличением расхода серы и пирита возрастает и степень возгонки мышьяка, причем увеличение расхода пирита сильнее влияет на нее, особенно до 80 % от массы CoAs, затем увеличение степени возгонки замедляется. Увеличение продолжительности

обработки до 60 мин, повышение температуры, понижение давления (особенно ниже 0,13 кПа) значительно повышают степень возгонки мышьяка из CoAs.

Такая же закономерность наблюдается и для других арсенидов кобальта.

Уравнения зависимости степени возгонки мышьяка при сульфидировании арсенидов кобальта парами элементарной серы (1) или пиритом (2) имеют вид:

$$\alpha_{As} = 1 - \exp [-e^{-A} (t/1000)^{n1} P^{n2} \tau^{n3} S^{n4}]; \quad (1)$$

$$\alpha_{As} = 1 - \exp [-e^{-A} (t/1000)^{n1} P^{n2} \tau^{n3} FeS_2^{n4}], \quad (2)$$

где α_{As} – степень возгонки мышьяка, в долях единицы; t – температура, °С; P – давление, кПа; τ – время, мин; S , FeS_2 – количество серы и пирита, % от массы арсенида кобальта; A , $n1$, $n2$, $n3$, $n4$ – эмпирические коэффициенты (таблица).

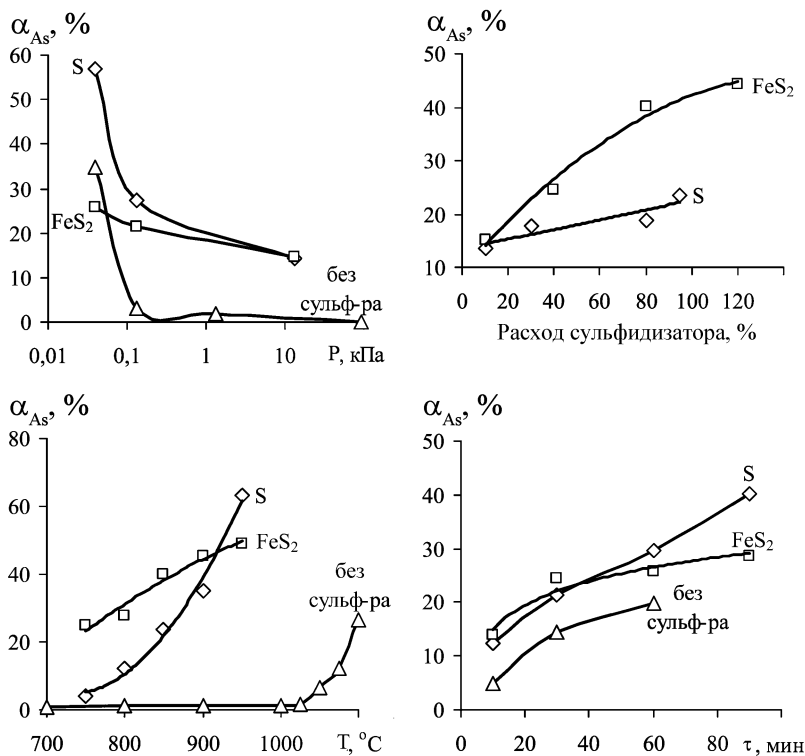


Рис.3. Влияние основных факторов процесса на степень возгонки мышьяка из моноарсенида кобальта (серии опытов проводились при постоянных $t = 850$ °С, $P = 1,33$ кПа, $\tau = 30$ мин, расход $S = 40$ %, расход $FeS_2 = 50$ %).

По величине коэффициентов n_1 – n_4 видно, что наиболее сильное влияние на степень возгонки оказывает температура, влияние остальных факторов проявляется слабее.

Определено, что степень возгонки мышьяка из арсенидов кобальта в присутствии пирита при температуре до 900 °С, наиболее интересной с точки зрения возможности аппаратурного оформления, заметно выше, чем в присутствии паров элементной серы. Это, возможно, связано с тем, что имеется более тесный контакт частиц арсенидов кобальта с выделяющейся серой от разложения пирита, которая, вероятно, более активна, чем элементная.

Таким образом, возгонка мышьяка из арсенидов кобальта в вакууме может быть осуществлена в присутствии паров серы или в смеси с пиритом при температуре 800–900 °С и давлении 1,33–0,13 кПа в течение 30 мин.

Кроме того, были впервые найдены кинетические закономерности процессов термического разложения и сульфидирования CoAs_2 , CoAs и Co_2As от основных факторов в вакууме, экспериментально определено давление пара мышьяка над арсенидами кобальта и показано, что в вакууме в парах серы разложение CoAs_2 и CoAs с образованием низших арсенидов и выделением мышьяка происходит через образование кобальтина (CoAsS), а Co_2As — с образованием CoAs и Co_xAs_y и сульфидов кобальта переменного состава. На основании проведенных исследований были составлены рекомендации по практическому осуществлению процесса.

При проведении процесса в вибровакuumном аппарате за счет более высокого коэффициента теплоотдачи, снижения сопротивления выходу паров из глубины слоя, активного перемешивания материала продолжительность переработки может быть сокращена. Использование в качестве сульфидизатора пирита эффективнее, чем серы, но ведет к большому разубоживанию сырья, что нежелательно, особенно для золото-содержащих материалов.

Список литературы

1. Исабаев С.М., Кузгибекова Х., Чунаева В.Д. Закономерности взаимодействия арсенидов меди, кобальта, железа с серой в неравновесных условиях // Журн. неорган. химии. — 1999. — Т. 44, № 12. — С. 2057–2058.
2. Чунаева В.Д., Исабаев С.М., Мулдагалиева Р.А. Сульфидирование кобальтмышьяковых соединений (CoAsS , CoAs_2 , CoAs) пиритом // Там же. — 1995. — Т. 68, вып. 12. — С. 1960–1963.
3. Нестеров В.Н., Исакова Р.А. Переработка шпейзы методом возгонки под вакуумом // Изв. АН КазССР. Сер. металлургии, обогащения и огнеупоров. — 1958. — № 3. — С. 53–61.
4. Жумабекова Н.Н., Храпунов В.Е., Марки И.А. и др. Взаимодействие диарсенида кобальта с серой при пониженном давлении // Комплекс. использ. минерал. сырья. — 2007. — № 5. — С. 66–71.
5. Храпунов В.Е., Жумабекова Н.Н., Требухов С.А. и др. Исследование процесса сульфидирования моноарсенида кобальта элементной серой // Там же. — 2008. — № 1. — С. 92–99.

Поступила в редакцию 28.09.09

Arsenium Vacuum and Thermal Extraction from End Products and Metallurgy Wastes by Sulfide Agents Application

Nitsenko A.V., Khrapunov V.E., Abramov A.S., Trebukhov S.A, Moldabaev M.

JSC «Center of the Sciences of the Earth, Metallurgy and Ores Benefication», Almaty, Kazakhstan

The results of arsenic sublimation process from cobalt arsenides experimental investigation in vacuum at pyrite or sulfur presence are resulted. It is displayed that under pyrite (sulfur) consumption, process duration and temperature increase and also under system pressure decrease an arsenium sublimation degree increase is observed. It is established that pyrite as sulfide agents application efficiency is major than application of sulfur.

Key words: arsenic sublimation process, cobalt arsenides, sulfide agents.

Received 28 September, 2009

Неоднородное распределение заряженных частиц в аэрозолях и продуктах сгорания

Драган Г.С., Коськин Е.В.

Одесский национальный университет

Предложен аналитический метод определения равновесного состояния линейной цепочки большого числа идентичных точечных частиц, взаимодействующих между собой посредством парного потенциала. В качестве характеристики, определяющей состояние равновесия, была использована функция смещения, показывающая отклонение каждой частицы от ее положения в случае базисного однородного распределения по длине. Было получено уравнение на функцию смещения, где задача о нахождении этой функции основывалась на условии баланса сил, действующих на все частицы со стороны ближайших соседей и всех остальных частиц цепочки. Найдена функция линейной плотности непосредственно из функции смещения. Предложенный метод нахождения равновесного состояния имеет преимущество над методом ближайших соседей, так как позволяет более точно определить равновесную конфигурацию цепочки.

Ключевые слова: парное взаимодействие, линейная цепочка, нелокальное взаимодействие, дымовая плазма, аэрозоль.

Запропоновано аналітичний метод визначення рівноважного стану лінійного ланцюжка великого числа ідентичних точкових частинок, взаємодіючих між собою за допомогою парного потенціалу. Як характеристику, що визначає стан рівноваги, було використано функцію зсуву, яка показує відхилення кожної частинки від її положення у випадку базисного однорідного розподілу по довжині. Було отримано рівняння на функцію зсуву, де задача про знаходження цієї функції ґрунтувалася на умові балансу сил, що діють на всі частинки з боку найближчих сусідів та всіх інших частинок ланцюжка. Знайдено функцію лінійної щільності безпосередньо з функції зсуву. Запропонований метод знаходження рівноважного стану має перевагу над методом найближчих сусідів, тому що дозволяє більш точно визначити рівноважну конфігурацію ланцюжка.

Ключові слова: парна взаємодія, лінійний ланцюжок, нелокальна взаємодія, димова плазма, аерозоль.

Упорядоченные пространственные структуры конденсированных частиц в низкотемпературной плазме давно привлекают внимание исследователей [1–6], тем не менее вопрос о механизмах их возникновения до сих пор остается дискуссионным [7]. В первых работах [8–10] предполагалось, что причиной формирования структур является электростатический заряд на поверхности частиц, который вызывает их кулоновское взаимодействие. Дальнейшие исследования показали, что в пылевой плазме [11] важную роль играют также силы ионного ветра и силы гидродинамического происхождения. Особенно существенную роль эти силы играют в процессе формирования войдов — сферических полостей в плазменных кристаллах, которые были обнаружены и исследованы экспериментально [12–16]. В дымовой плазме равновесные упорядоченные структуры могут возникать так же, как и в газоразрядной пылевой

плазме, но причиной их появления является результирующее взаимодействие сил кулоновского происхождения и диффузионной силы неравновесных носителей заряда [5]. В обоих случаях имеет место неравномерное распределение частиц на границе облака, а также на внутренней границе войда. Именно поэтому представляет интерес задача о нахождении распределения плотности конденсированных заряженных частиц в пылевой плазме внутри и на границах пылевого облака, что позволит описать процессы формирования войдов, а также изучить механизмы их образования в пылевой и дымовой плазме.

Постановка одномерной задачи. Существуют методы, позволяющие описывать поведение систем, состоящих из большого числа взаимодействующих частиц, с помощью которых удается объяснять макроскопические свойства этих систем на основе микроскопических

параметров, определяющих элементарные взаимодействия между частицами. Среди этих методов явно выделяются гидродинамические, статистической физики и молекулярной динамики. При низкой температуре, когда тепловая энергия движения частиц намного меньше их потенциальной энергии взаимодействия, частицы с характерным типом потенциала парного взаимодействия склонны к структурированию в кластеры или кристаллы. В таких системах частицы закреплены в узлах решетки и совершают случайное блуждание из узла в узел с вероятностью, нелинейно зависящей от соотношения энергии перескока к температуре. Из результатов наблюдений макроскопических структурированных систем таких, как плазменные кристаллы [15], видно, что пылинки не совершают перескоков на протяжении всего времени эксперимента. Это свидетельствует о неприменимости методов статистической физики для глобального описания подсистемы пылевых частиц и невозможности использования нелокальных уравнений для корреляционных функций. В связи с этим оказывается удобным использование методов молекулярной динамики, с помощью которых удастся смоделировать равновесную конфигурацию системы и наблюдать специфические эффекты самоорганизации частиц в ней. Однако это численное решение уравнений движения не объясняет причины и критерии существования полученных упорядоченных структур. Поэтому для их анализа необходим соответствующий аналитический подход.

В большинстве работ, посвященных исследованию образования войдов, результаты были получены из решения соответствующих гидродинамических задач численными методами [17, 18]. Во всех этих случаях на границе войда наблюдалось уплотнение частиц, вызванное, очевидно, поверхностными эффектами. Например, в работах [18, 19] наблюдалось заметное повышение плотности пылевых частиц на границе войда. В работе [20] было показано, что линейная неустойчивость плотности частиц в пылевой плазме может быстро разрастись и превратиться в войд. Наряду с тем, распределение частиц в пылевом облаке может быть описано не в терминах понятия плотности, а с помощью более общего понятия — равновесной функции смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, определяющей отклонение всех частиц дисперсной системы от любой заданной базисной конфигурации. Распределение плотности частиц, как будет показано ниже, будет однозначно выражаться через функцию смещения. Что касается условия стабильного существования войда, то его уплотненная внутренняя

оболочка должна служить жестким каркасом, противодействующим сжатию со стороны внешних частиц.

Любое межчастичное взаимодействие в конденсированной среде можно задать с помощью модельного (классические кристаллы: потенциалы Леннарда-Джонса, Морзе, Тоды, Ми и т.д.) или эффективного (плазменные кристаллы, коллоидные системы: потенциал Дебая-Хюккеля) парного потенциала взаимодействия $\Phi(x)$. Поэтому вопрос об условии существования войда сводится к поиску метода, позволяющего с помощью известного парного потенциала взаимодействия получить зависимость потенциальной энергии кристалла от радиуса войда, которая в итоге должна привести к наличию локального минимума потенциальной энергии кристалла при ненулевом радиусе войда.

В настоящей работе предложен метод нахождения равновесного состояния одномерной системы идентичных точечных частиц, взаимодействующих между собой посредством парного потенциала. Несмотря на то, что для этого случая возникновение войда маловероятно из-за отсутствия взаимодействия между частицами в направлении, перпендикулярном к направлению сжатия, практические результаты, касающиеся образования войда, имеют смысл после обобщения метода на двух- и трехмерный случаи.

Рассмотрим одномерную квазистатистическую систему, состоящую из N одинаковых частиц, для которых среднеквадратичное смещение от состояния равновесия незначительно по отношению к среднему расстоянию между частицами. Необходимо найти равновесное распределение частиц в системе и учесть вклад краевых эффектов в постановке задачи, связанных с конечным размером цепочки.

Потенциальную энергию такой системы в отсутствии внешнего поля можно приближенно представить в виде суммы парных взаимодействий, где частицы влияют друг на друга только посредством парного потенциала с энергией взаимодействия между j -й и i -й частицами, равной $\Phi(x_j - x_i)$, которая является четной функцией:

$$W = 0,5 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \Phi(x_j - x_i). \quad (1)$$

Тогда сила, действующая на каждую из частиц, будет равна:

$$F(x_i) = \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N f(x_j - x_i), \quad i = 1 \dots N. \quad (2)$$

$$\text{где } f(x_j - x_i) = \frac{d\Phi(x_j - x_i)}{d(x_j - x_i)}.$$

Выражение (2) описывает силу, действующую на i -ю частицу со стороны всех остальных частиц. Такая система может находиться в состоянии равновесия, когда результирующая всех сил, действующая на каждую частицу, будет равна нулю. Результатом устойчивого состояния равновесия будет некоторое распределение частиц в пространстве, причем в общем случае это распределение будет неравномерным. Записав N выражений для $F(x_i)$ и приравняв их к нулю, получим систему N уравнений с N неизвестными для x_i . Решение системы алгебраических уравнений позволит определить координату каждой частицы и таким образом найти распределение частиц в пространстве. Однако в случае большого числа частиц в двух- и трехмерном пространстве данные методы являются нерациональными, в связи с необходимостью решения $\sim N$ (в общем случае нелинейных) уравнений, что значительно усложняет процессы вычислений. В таком случае необходимо перейти от дискретного распределения частиц к непрерывному, сведя задачу к поиску одной характеристической функции. В непрерывном случае, когда расстояние между соседними частицами намного меньше размеров системы, основной характеристикой, определяющей распределение частиц по оси цепочки, является функция смещения $u(x)$, показывающей отклонение i -й частицы от ее положения в случае некоторого базисного (однородного) распределения по длине. Линейная плотность частиц $n(x)$, как будет показано ниже, может выражаться через функцию смещения.

При построении уравнения для $u(x)$ необходимо учесть баланс сил не только при взаимодействии с ближайшими соседями, но и со всеми остальными частицами. В противном случае краевые эффекты, связанные с обрывом цепочки, учесть не удастся, а уравнение на функцию смещения примет классический вид: $u''(x) = 0$. Для того, чтобы оценить вклад всех остальных частиц в баланс сил, действующих на выбранную частицу, запишем выражение (2) в терминах базисного распределения и функции смещения:

$$F(\tilde{x}_i + u(x_i)) = \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N f(\tilde{x}_j - u(\tilde{x}_j)) - \tilde{x}_i - u(\tilde{x}_i), i = 1 \dots N, \quad (3)$$

где $\tilde{x}_i = \tilde{x}_1 + (i - 1)d$, $x_1 = a$, $x_N = b$ — координаты частиц в случае базисного (однородного) распределения по длине, для которого среднее расстояние между частицами равно d . Ниже будет показано, что этот параметр определяется для цепочки частиц с закрепленными и свободными концами.

Для вывода уравнения для функции смещения запишем выражение (3), выделяя из соответствующей суммы взаимодействие i -й частицы с соседними и приравнявая силы к нулю:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{i-2} f(\tilde{x}_j - u(\tilde{x}_j)) - \tilde{x}_i - u(\tilde{x}_i) + \\ & + \sum_{j=i+2}^N f(\tilde{x}_j - u(\tilde{x}_j)) - \tilde{x}_i - u(\tilde{x}_i) + \\ & + f(\tilde{x}_{i-1} - u(\tilde{x}_{i-1})) - \tilde{x}_i - u(\tilde{x}_i) + \\ & + f(\tilde{x}_{i+1} - u(\tilde{x}_{i+1})) - \tilde{x}_i - u(\tilde{x}_i) = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

В случае, когда среднее расстояние между частицами намного меньше размеров системы и края цепочки закреплены, можно перейти от суммирования в вышеуказанном выражении к интегрированию, записав уравнение баланса в виде:

$$\begin{aligned} & d^{-1} \int_a^{x-2d+u(x-2d)} f(y+u(y)) - x - u(x) dy + \\ & + d^{-1} \int_{x+2d+u(x+2d)}^b f(y+u(y)) - x - u(x) dy + \\ & + f(u(x-d) - u(x) - d + f(u(x+d) - u(x) + d)) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Выражение (5) можно упростить, если положить, что $u(x) < d$ и учесть $f(-x) = -f(x)$:

$$\begin{aligned} & \int_a^{x-2d} f(y+u(y)) - x - u(x) dy + \\ & + \int_{x+2d}^b f(y+u(y)) - x - u(x) dy + \\ & + d^3 \cdot f'(d) u''(x) = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Полученное уравнение позволяет найти функцию смещения частиц в одномерной системе при известных краевых условиях. Здесь и далее будем использовать случай закрепленных концов: $u(a) = u(b) = 0$.

Теперь выясним, как функция смещения $u(x)$ связана с локальной плотностью частиц $n(x)$. Для этого используем очевидное положение: во сколько раз увеличится расстояние между двумя соседними (по отношению к средней) частицами, во столько раз уменьшится средняя плотность вещества в окрестности середины этого интервала:

$$\frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_{i-1}} = \frac{n_0}{n(x_i)}$$

Из этого выражения в приближении малых смещений получим:

$$n(x) = \frac{n_0}{1 + u(x+d) - u(x-d) / 2d}$$

Решение поставленной задачи для цепочки частиц с парным потенциалом взаимодействия типа Морзе. Применим предложенную теорию на случай модельного межчастичного потенциала Морзе, которым могут быть хорошо аппроксимированы межчастичные взаимодействия в кристаллических телах:

$$\Phi(x) = E[e^{-2\alpha(|x|-\sigma)} - 2e^{-\alpha(|x|-\sigma)}],$$

где E – глубина потенциальной ямы; σ – равновесное расстояние между двумя частицами; α – варьирует ширину потенциальной ямы. Этот потенциал не имеет особенности в нуле, но обладает минимумом, характерным для большинства межчастичных взаимодействий.

Прежде, чем решать задачу с потенциалом Морзе, упростим уравнение (6), положив функцию смещения в подынтегральном выражении равной нулю. Введем для удобства новые переменные: $x = td$, $q = \alpha d$, $p = \sigma\alpha$, $u = vd$, $a = 0$, $b = L$, $L/d = N$, где L – длина цепочки; N – число частиц в цепочке. Тогда после простого интегрирования безразмерная функция смещения для $N \gg 1$ примет вид:

$$v(t) = [0,25e^{-2(q(N-t)-p)} - 2e^{-(q(N-t)-p)} - 0,25e^{-2(qt-p)} + 2e^{-(qt-p)} - C_1] / Aq + C_2t;$$

$$C_1 = 2e^p - 0,25 e^{2p};$$

$$C_2 = (4 e^p - 0,5 e^{2p}) / ANq^2. \quad (7)$$

В случае незакрепленных концов цепочки необходимо найти соответствующее среднее межчастичное расстояние d из условия минимума потенциальной энергии цепочки (1). Но принимая во внимание тот факт, что сама функция смещения была найдена в нулевом приближении, учет ее в выражении (1) оказывается бессмысленным. Поэтому потенциальная энергия цепочки примет вид:

$$W = \frac{N}{2} \sum_{k=1}^N \Phi(kd). \quad (8)$$

Для потенциала Морзе в пределе $N \gg 1$ и в терминах p , q потенциальная энергия после суммирования примет вид:

$$W = \frac{EN}{2} \left(\frac{e^{2p}}{1-e^{-2q}} - \frac{2e^p}{1-e^{-q}} \right). \quad (9)$$

Минимум функции (9) для области $q > 0$ определяет равновесное среднее безразмерное межчастичное расстояние q :

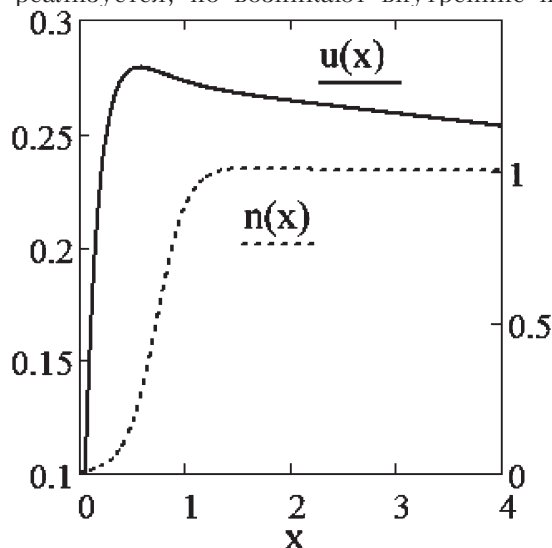
$$q(p) = \ln(2) - \ln(e^p - 2 - \sqrt{e^{2p} - 4e^p}), \quad p > 2\ln(2). \quad (10)$$

Если $p < 2 \ln(2)$, то $q = 0$, что соответствует коллапсу системы.

На рисунке изображены функция смещения и плотности для цепочки из $N = 100$ атомов меди в отсутствии внешнего натяжения. Для меди параметры потенциала Морзе будут равны: $E = 0,3429$ эВ, $\alpha = 0,13588$ нм⁻¹, $\sigma = 0,2866$ нм [21]. Тогда $p = 3,886$, а среднее расстояние между частицами из условия минимума (9) равно $q = 3,844$, что почти совпадает с p .

Функция смещения меняет знак с «+» на «-» при переходе через середину цепочки, что указывает на появление дополнительного сжатия свободной цепочки, связанного с ее конечным размером.

Результаты. С помощью условия баланса сил парного взаимодействия между частицами в линейной цепочке было выведено уравнение на функцию смещения $u(x)$ (6), имеющее в общем случае нелинейные и нелокальные особенности. Поиск этой функции по определению эквивалентен нахождению координат равновесного положения частиц в цепочке для случая дискретного распределения. С помощью приближений, которые пришлось ввести для упрощения математических расчетов, функции смещения и линейной плотности частиц были найдены в нулевом приближении для межчастичного потенциала взаимодействия типа Морзе. Обнаружено, что для свободной цепочки атомов меди функция смещения положительная на первой половине ее длины и отрицательная на второй. Это объясняется тем, что в однородном случае средняя сила, действующая со стороны всей цепочки на ее отдельные частицы, направлена внутрь. Таким образом, поверхностное натяжение в свободной цепочке Морзе для меди не реализуется, но возникают внутренние на-



Зависимость функции смещения и плотности частиц в системе.

пряжения, о которых свидетельствует линейный наклонный участок функции смещения. Из анализа выражения (10) видно, что равновесное среднее межчастичное расстояние в свободной цепочке всегда меньше положения минимума парного потенциала, но быстро к нему стремится при его увеличении. Если $0 < p < 2/\ln(2)$, то равновесное среднее межчастичное расстояние равно нулю, что свидетельствует о коллапсе цепочки, состоящей из большого числа точечных частиц.

Дальнейшее обобщение предложенного метода для двух- и трехмерного случая может быть осуществлено с целью объяснения внутренних краевых эффектов в кристаллах (в частности, плазменных), приводящих к образованию устойчивых полостей — войдов.

Список литературы

1. Thomas H. et al. // Phys. Rev. Lett. — 1994. — Vol. 73. — P. 652.
2. Nefedov A.P. et al. PKE-Nefedov : Plasma crystal experiments on the international space station // New J. Phys. — 2003. — Vol. 5, № 3. — P. 33.1–33.10.
3. Vishnyakov V.I., Dragan G.S. // Phys. Rev. — 2005. — E 71, 016411.
4. Vishnyakov V.I., Dragan G.S. // Phys. Rev. — 2006. — E 74, 036404.
5. Vishnyakov V.I., Dragan G.S. // Phys. Rev. — 2006. — E 73, 026403.
6. Fortov V.E. et al. // Phys. Usp. — 2004. — Vol. 74. — P. 495.
7. Proceedings of the Fifth International Conference on Physics of Dusty Plasmas, Ponta Delgada, Azores, May 18–23, 2008.
8. Ikezi H. // Phys. Fluids. — 1986. — Vol. 29. — P. 1764.
9. Chu J.H., Lin I. // Phys. Rev. Lett. — 1994. — 72, 4009.
10. Dragan G.S. // Proc. Sci. Techn. Meet. of Comecon Member Countries, Alma-Ata, USSR, 25–31 Oct., 1982. — Moscow : Institute of High Temperatures of the USSR Academy of Sciences (IVTAN), 1984. — P. 191.
11. Ivlev A.V., Zhdanov S.K., Khrapak S.A., Morfill G.E. // Phys. Rev. — 2005. — E 71, 016405.
12. Morfill G.E. // Phys. Rev. Lett. — 2006. — 83, 1598.
13. Chinese Science Bulletin. — 2004. — Vol. 49, № 24. — P. 2575–2580.
14. Dahiya R.P. // Phys. Rev. Lett. — 2002. — 89, 125001.
15. Molotkov V.I. et al. // Proc. II Intern. Conf. on Physics of Dusty and Buring Plasmas, Odessa, Ukr., 26–30 Aug., 2007. — P. 97.
16. Mikikian M., Boufendi L. // Phys. Plasmas. — 2004. — Vol. 11. — P. 3733–3737.
17. Tsyтович V.N., Vladimirov S.V., Morfill G.E., Goree J. // Phys. Rev. — 2001. — E 63, 056609.
18. Jovanovic D., Shukla P.K. // Phys. Lett. A. — 2003. — Vol. 308. — P. 369–374.
19. Akdim M. R., Goedheer W. J. // Phys. Rev. — 2001. — E 65, 015401.
20. Avinash K., Bhattacharjee A., Hu S. // Phys. Rev. Lett. — 2003. — 90, 075001.
21. Girifalco L. A., Weizer V. G. // Phys. Rev. — 1959. — Vol. 114. — P. 687.

Поступила в редакцию 28.09.2009

Nonhomogeneous Distribution of Aerosol Charged Particles and Combustion Products

Dragan G.S., Koskin Y.V.

Odessa National University

The analytical method of equilibrium condition definition for large number of identical point particles is proposed. The particles interact among themselves by means of pair potential. The bias function as the equilibrium status characteristic definition is applied. The function exhibits each particle arrangement deviation in a case of basic homogeneous length distribution. The equation on bias function is obtained. The task about the function determination is based on the forces that effect all particles from the direction of nearest neighbours and all other particles series equilibrium condition. The function of linear density is directly considered from bias function. The proposed method of equilibrium condition definition has advantage over a method of the nearest neighbours because it allows to define an equilibrium series configuration more precisely.

Key words: pair interaction, linear chain, non-local interaction, smoke plasma, aerosol.

Received 28 September, 2009

Содержание «Энерготехнологии и ресурсосбережение» №№1–6 2009

60 лет Институту газа Национальной академии наук Украины	4	3
Wilharm Th., Bernath J., Васильев И.П. Разработка требований к растительным маслам как топливам для дизелей	5	16
Антоненко Л.П., Васильчук О.В., Куликовская М.В., Сироштан Н.К. Низкотемпературная окислительная деглинификация пероксидом водорода. 3. Деглинификация соломы пшеницы	2	39
Барбаш В.А., Трембус И.В., Шевченко В.М. Органосольвентные способы получения волокнистых полуфабрикатов из пшеничной соломы	1	37
Безуглый В.К., Бондаренко Б.И. Термодинамика гетерогенных систем: Метод потенциалов химических элементов	5	50
Бектурганов С.Н., Суркова Т.Ю., Юлусов С.Б., Павлов А.В. Физико-химические исследования карбонатных урансодержащих руд и перспективы извлечения из них редкоземельных элементов	6	4
Бирюкова А.А., Тихонова Т.А., Боронина А.В., Осипанов Н.А. Влияние газовой среды на структурно-фазовые превращения в системе огнеупор – Pb(PbO)	6	41
Богатырева Г.П., Ильницкая Г.Д., Олейник Н.А., Невструев Г.Ф., Зайцева И.Н. Современные технологии повышения экологической безопасности переработки порошков сверхтвердых материалов	6	65
Бондаренко Б.И., Небесный А.А., Филоненко Д.С., Святенко А.М. Обобщенный анализ углеродообмена в системах $H-O-C-(C_{граф})$. 2. Влияние давления	5	55
Борук С.Д., Водяника В.Р. Влияние интенсивности межчастичных взаимодействий в системе металл – продукты коррозии на параметры процесса химической обработки поверхности стали	6	36
Бражник Д.В., Зажигалов В.А., Григорян Р.Р., Варткиян Л.А., Гарибян Т.А. Использование природных цеолитов для создания катализаторов нейтрализации газовых выбросов. 2. Окисление CO	1	27
Бражник Д.В., Зажигалов В.А., Григорян Р.Р., Варткиян Л.А., Гарибян Т.А. Использование природных цеолитов для создания катализаторов нейтрализации газовых выбросов. 3. Окисление CH_4^*	2	34
Будняк С.В., Калашников О.В., Тамалея Р.В. Подсистема выбора кожухотрубчатых теплообменников для установок промышленной подготовки природного газа. 2. Взаимодействие с базой данных	1	76
Быстрый А.И., Квицинский В.А., Крывошеев С.И., Макачук В.Н., Хилько И.Н. Автоматизированный масс-спектрометрический комплекс с криогенным адсорбционным модулятором газового потока	3	68
Володин В.Н., Акчулакова С.Т., Рузахунова Г.С., Храпунов В.Е. Дистилляционное рафинирование черного кадмия с высоким содержанием примесей	6	9
Гельмбольдт В.О. Гидрофториды органических оснований и «ониевые» соли с полигидрофторидными анионами – фторирующие агенты нового поколения (Обзор)	3	41
Гладков В.С., Гученко О.А., Ваврів Л.В., Шестеріков О.В. Високоєфективна екологічно чиста та безвідходна утилізація бетонних та залізобетонних виробів наносекундними імпульсами напруги	3	47
Гомеля Н.Д., Глушко Е.В., Крысенко Т.В., Ставская С.С. Электрохимическое извлечение ионов цинка и кадмия из регенерационных растворов при ионообменной очистке воды	2	68
Гомеля Н.Д., Незвиская Т.А., Омельчук Ю.А., Ставская С.С. Применение ингибиторов накипеобразования и коррозии металлов для водооборотных систем АЭС	5	45
Гумницький Я.М., Люта О.В., Сабадаш В.В. Вимивання компонентів мінеральних добрив із ґрунтового природного середовища	1	62
Демидик В.Н., Колодная Т.П. Энерго-экологическая оценка бескоксовых методов получения железа	5	41
Денисов А.А. Очистка выбросных газов от соединений серы (Обзор)	3	55
Дмитриков В.П., Проценко А.В. Реагентная утилизация отработанных железо-никелевых аккумуляторов. 1. Основные этапы и процессы переработки	5	62
Драган Г.С., Коськин Е.В. Неоднородное распределение заряженных частиц в аэрозолях и продуктах сгорания	6	74
Дунаевская Н.И., Засядько Я.И., Щудло Т.С., Бесценный И.В., Бондзик Д.Л. Экспериментальное исследование процесса совместного факельного сжигания антрацита с древесной биомассой	3	10
Жовтянський В.А. Розробки Інститута газу в області плазменних технологій і обладнання	4	97
Калашников О.В. Истоки и достижения «машинной термодинамики» углеводородов	4	73
Калашников О.В., Будняк С.В., Мельничук Р.Н., Сорока В.В. Подсистема выбора кожухотрубчатых теплообменников для установок промышленной подготовки природного газа. 3. Расчетные и фактические данные по работе газопромысловый теплообменной аппаратуры	3	74
Карп И.Н., Доброхотов Н.Н. – основатель и первый директор Института газа НАН Украины	4	10
Карп И.Н., Никитин Е.Е., Пьяных К.Е., Зайвый А.Н. Направления замещения природного газа альтернативными видами топлива и энергии в промышленности и коммунальной энергетике	4	16
Карп И.Н., Пьяных К.Е., Никитин Е.Е. Использование генераторного газа в коммунальной теплоэнергетике	2	18
Квашевскі П., Калініченко В.М. Аналіз результатів функціонування сонячних колекторів в м. Краків	6	61
Ковзаленко В.А., Мылтыкбаева Л.А., Тастанов Е.А., Бейсембекова К.О. Переработка алюмосиликатного сырья гидрохимическим способом с предварительным химическим обогащением	6	13
Корчевой Ю.П., Майстренко А.Ю., Топал А.И. Современное состояние развития чистых угольных технологий в энергетике	4	80
Купчик Л.А., Гасюк С.Г., Николайчук А.А., Гончаренко Л.М. Получение и свойства сорбентов из пектинсодержащих отходов пищевой промышленности	5	58
Кучера Я.И., Васійчук В.О., Гриців Ю.М. Розроблення ефективного методу очищення сірчисто-лужних стоків виробництва етилену	1	58
Магунов Р.Л., Магунов И.Р. Гидроксидные способы извлечения германия из надсмольных вод коксохимии	1	52

Майдуков Г.Л., Кислов Б.И., Григорюк М.Е. Эколого-экономический анализ твердых отходов угольных предприятий	1	42
Майстренко А.Ю., Рохман Б.Б., Выфатнюк В.Г., Чернявский Н.В. Разработка новых технологий сжигания твердых топлив в топках с псевдооживленным слоем. 2. Результаты экспериментальных и расчетных исследований	2	4
Майстренко А.Ю., Рохман Б.Б., Выфатнюк В.Г., Чернявский Н.В. Разработка новых технологий сжигания твердых топлив в топках с псевдооживленным слоем. 1. Инженерная методика расчета	1	4
Майстренко А.Ю., Рохман Б.Б., Топал А.И., Выфатнюк В.Г. Влияние различных факторов на процессы переноса в надслоевом пространстве реактора с циркулирующим кипящим слоем	3	64
Майстренко А.Ю., Рохман Б.Б., Выфатнюк В.Г., Чернявский Н.В. Разработка новых технологий сжигания твердых топлив в топках с псевдооживленным слоем. 3. Динамика выгорания коксовых частиц. Основные схемные решения КС-котлоагрегата паропроизводительностью 10 т/ч	5	3
Макаров А.С., Водянка В.Р., Борук С.Д., Тевтуль Я.Ю. Ингибирование растворения меди и ее сплавов в кислой среде производными тиоамидов	2	49
Мальований М.С., Крип І.М., Кириченко О.В. Очищення водного середовища від нафтових забруднень карбонатомісними сорбційними матеріалами	3	61
Марченко Г.С., Любчик Г.Н., Макаренко В.А. Газовые теплогенераторы	4	35
Мылтыкбаева Л.А. Технология получения цеолитов из зол ТЭЦ	6	49
Нагурський О.А., Ващук В.В. Дослідження кінетики біодеструкції відходів полістиролу в присутності природних полісахаридів	1	49
Найманбаев М.А., Лохова Н.Г., Балтабекова Ж.А., Квятковская М.Н. Исследование условий выщелачивания редкоземельных элементов из хвостов сорбции урана	6	53
Никитин Е.Е. Концепция управления энергоэффективностью систем теплоснабжения поселений	2	25
Никитин Е.Е. Системный подход к выбору мероприятий по энергоэффективности при модернизации систем теплоснабжения поселений в условиях финансовых ограничений	1	18
Никитин Е.Е. Системный подход к разработке энергоэффективных схем теплоснабжения городов и населенных пунктов	4	89
Ниценко А.В., Храпунов В.Е., Абрамов А.С., Требухов С.А. Вакуумтермическое удаление мышьяка из промпродуктов и отходов металлургических производств с использованием сульфидизаторов	6	70
Нохрина О.И., Рожихина И.Д. Способы переработки отходов ферросплавного производства	6	58
Павленко В.М., Яценко А.П., Корнилович Б.Ю. Иммунизация жидких радиоактивных отходов методом остекловывания	2	58
Пасичный В.В., Корчемная В.С., Остапенко С.А., Пасичная М.С. Особенности процесса термической переработки концентрированным лучистым нагревом псевдосплава Mo-Ni (1 %)	2	53
Петрова М.А., Петрушка І.М., Крип І.М. Вплив гідродинамічних режимів на процес сорбції цезію та стронцію модифікованими глинистими мінералами	1	65
Пикашов В.С. Энерго-и ресурсосберегающие технологии при сжигании топлива и оборудование для их реализации	4	51
Пикашов В.С., Великодный В.А. Энергосберегающая технология и оборудование термической утилизации органических соединений, содержащихся в воде	5	37
Пикашов В.С., Троценко Л.Н., Новиков Н.В., Дунайчук С.Н., Цветков С.В., Прусский А.А. Опыт перевода вращающихся барабанных печей на отопление природным газом	1	73
Пинчук В.А., Потапов Б.Б. Перспективы внедрения экологически чистых энерготехнологий переработки низкосортных углей Украины	3	27
Приемов С.И., Серебрянский Д.А., Долгарев Г.В. Оценка эффективности улавливания высокодисперсной сажи из дымовых газов при загрузке коксовых батарей	1	71
Пятничко А.И., Крушевнич Т.К. Производство биометана из биогаза	4	109
Радовенчик В.М., Отрох Е.А., Довбня Е.С. Регулирование влажности дисперсных сорбентов с магнитными свойствами	5	71
Ракитская Т.Л., Кнюс Т.А., Волкова В.Я., Эннан А.А. Биохимическое извлечение серебра из руд казахстанских месторождений	6	18
Русинковский О.Ю., Костогряз К.П., Сухоруков В.И. Повышение эффективности сушки во вращающихся барабанах	5	78
Рыжков А.Ф., Попов А.В., Богатова Т.Ф., Осипов П.В. Эффективность угольных парогазовых установок	3	18
Савицкий Д.П., Егурнов А.И., Макаров А.С., Завгородний В.А. Жидкое топливо на основе угольных шламов и бурого угля (Обзор)	1	13
Семенченко Г.В., Беркинбаева А.Н., Мукушева А.С., Пономарева Е.И. Совместная работа энергоактивной ограждающей конструкции и грунтового сезонного аккумулятора тепла в режиме зарядки	6	24
Сигал И.Я. Сжигание газа в котлах и защита воздушного бассейна	4	26
Сологуб В.А., Плосконос В.Г., Гаркуша І.М., Гілевич Ю.В., Гречок М.М., Коновац В.П. Вплив вуглецевих наповнювачів на електричні та фізико-механічні характеристики зразків устілкового картону	2	44
Сорока Б.С. Определение основных характеристик горения газовых смесей. 1. Физические основы современных моделей формирования фронта пламени	5	23
Сорока Б.С. Развитие в Институте газа работ в области математического и компьютерного моделирования горения газа и топочных процессов	4	62
Ставицкая С.С., Викарчук В.М., Петренко Т.П., Ковтун М.Ф. Сорбция катионов и комплексных анионов переходных металлов модифицированными углями СКС	2	63
Ставицкая С.С., Стрелко В.В., Емельянов В.А., Панько А.В., Петренко Т.П., Никпелова Е.М. Структурно-механические свойства композитов разного состава на основе донных осадков и модифицированного угля КАУ	5	65
Старчак В.Г., Замай Ж.В., Дзюба В.А., Пушкарева И.Д., Костенко И.А. Влияние гидрохимического состояния р. Стрижень на коррозионную стойкость металлоконструкций	2	76
Страшко В.В. Совместная работа энергоактивной ограждающей конструкции и грунтового сезонного аккумулятора тепла в режиме зарядки	5	31
Сыч Н.В., Вольнец В.П., Трофименко С.И., Ковтун М.Ф., Цыба Н.Н., Мирошок Т.И. Получение и оценка эффективности активированных углей из кофейного шлама	3	50
Трошенькин В.Б., Трошенькин Б.А., Маркосова В.П. Электрохимическая газификация угля. 1. Состояние вопроса и эксперимент	5	9
Тусупбаев Н.К., Калиева Р.С., Турысбеков Д.К., Семушкина Л.В., Нурахметова Г.Б. Адсорбционные и электрокинетические свойства шунгита в присутствии различных реагентов	6	29