

УДК 532.075.8

УПРАВЛЕНИЕ ГАЗОФАЗНЫМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫМ СИНТЕЗОМ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА ТИТАНА И ДИОКСИДА КРЕМНИЯ В ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЗАКАЛОЧНОЙ СТРУИ

С. М. Аульченко, Е. В. Картаев

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН,
630090 Новосибирск, Россия
E-mails: aulchsm@mail.ru, kartayev@mai.ru

Представлены результаты исследования влияния закалочной струи воздуха на физико-химические свойства и морфологию частиц диоксида титана, диоксида кремния и композитных частиц TiO_2-SiO_2 , синтезируемых с помощью одностадийного хлоридного метода в плазмохимическом реакторе проточного типа. Результаты расчетов и анализа образцов показывают, что возможно управление физико-химическими свойствами порошка и морфологией его частиц. Показано, что результаты математического моделирования синтеза частиц TiO_2 и SiO_2 хорошо согласуются с результатами проведенных экспериментов.

Ключевые слова: диоксид титана, диоксид кремния, композитная частица, плазмохимический реактор, односкоростная многокомпонентная среда, гомогенная и гетерогенная реакции, коагуляция.

DOI: 10.15372/PMTF20210308

Введение. Задачи управления в механике жидкости и газа играют большую роль в различных технологических разработках. Одна из первых задач пассивного управления течением газа, моделирование которой в Институте теоретической и прикладной механики (ИТПМ) СО РАН было поддержано Н. Н. Яненко, решена в [1]. Исследование газодинамического способа воздействия на параметры реагирующей смеси газов и, следовательно, на характеристики конечного продукта является перспективным направлением развития современных технологий плазмохимического синтеза новых материалов, в том числе наноструктурированных порошков. В работах [2–4], в которых представлены результаты экспериментальных и теоретических исследований конверсии паров тетрахлоридов титана и кремния и синтеза наночастиц диоксидов титана и кремния, сделан вывод, что размеры и фазовый состав наночастиц, полученные в результате численного моделирования, удовлетворительно согласуются с размерами и фазовым составом, полученными в экспериментах, проведенных на лабораторной установке для плазмохимического синтеза

Работа частично выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 гг. (код проекта АААА-А17-117030610120-2) и при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 18-08-00219а).

© Аульченко С. М., Картаев Е. В., 2021

субмикронных частиц хлоридным методом. В работах [5, 6] проведено моделирование одностадийного синтеза композитных наночастиц $\text{TiO}_2\text{-SiO}_2$ хлоридным методом на основе как отдельного окисления тетрахлоридов титана и кремния, т. е. при подаче смеси паров тетрахлорида кремния и воздуха значительно ниже по потоку от области подачи смеси паров тетрахлорида титана и воздуха, так и при совместной подаче реагентов. Используемый в этих работах одностадийный газофазный метод имеет ряд преимуществ по сравнению с другими методами [7–15]. В частности, газофазные процессы, как правило, более чистые, чем жидкофазные (поскольку растворители обычно содержат следы минералов), и скорость получения порошкового продукта существенно выше, что может обеспечить его массовое производство. Кроме того, контроль процесса газофазного синтеза и качества продукта, как правило, осуществляется более просто, чем при использовании других методов. В настоящей работе исследуется влияние закалочной струи воздуха на размеры наночастиц TiO_2 и SiO_2 , а также на размеры ядер и оболочек композитных наночастиц $\text{TiO}_2\text{-SiO}_2$.

Положение щели вдува закалочной струи выбирается таким образом, чтобы температура в зоне смешения закалочной струи с основным потоком не позволяла кислороду этой струи выступать в роли реагента. Расход реагентов в процессе синтеза одного типа частиц не варьируется. Различие расходов реагентов в разных экспериментах (и расчетах) обусловлено техническими особенностями подачи паров прекурсоров TiCl_4 и SiCl_4 в реактор, однако размеры частиц TiO_2 , SiO_2 и $\text{TiO}_2\text{-SiO}_2$ между собой не сравниваются. Расход закалочной струи варьируется лишь в случае синтеза наночастиц SiO_2 . В целом отсутствие вариации параметров закалочной струи объясняется тем, что цель получить частицы заданного размера не ставилась.

Постановка задач. На рис. 1 показана схема реактора для синтеза наночастиц диоксида титана, диоксида кремния и композитных наночастиц. Через канал в рабочую зону втекает струя воздуха или азота с температурой T_1 и расходом Q_1 . Через первую боковую щель при температуре T_2 с расходом Q_2 подаются пары смеси с воздухом тетрахлорида титана или тетрахлорида кремния либо смесь обоих реагентов с воздухом. В первом и втором случаях в зоне смешения происходит реакция с образованием сначала газофазного компонента TiO_2 (SiO_2), затем частиц TiO_2 (SiO_2). Далее по мере движения частиц вдоль тракта реактора происходит увеличение их размера за счет поверхностной реакции и коагуляции. Через вторую боковую щель может подаваться (или не подаваться) закалочная струя воздуха при температуре T_3 с расходом Q_3 .

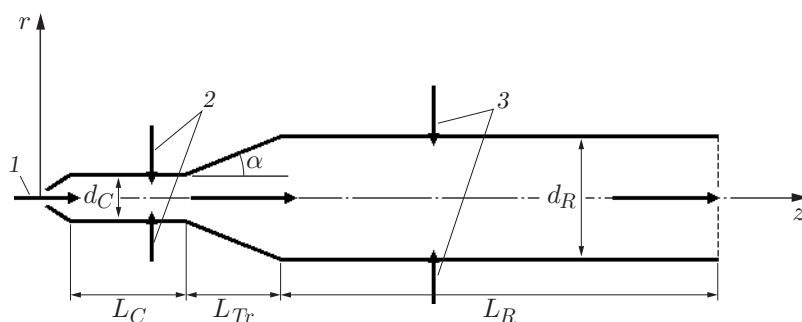
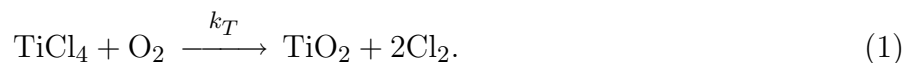


Рис. 1. Схема рабочей зоны проточного реактора при наличии боковой струи: 1 — центральная струя, 2 — первая боковая струя, 3 — вторая боковая (закалочная) струя

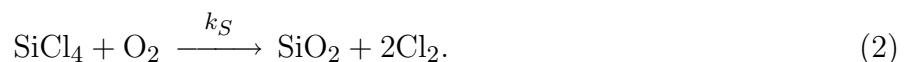
При синтезе композитных частиц в рабочую зону через канал втекает струя азота с температурой T_1 и расходом Q_1 . Через боковую щель при температуре T_2 с расходом Q_2 подается смесь тетраоксида титана, тетраоксида кремния и воздуха, причем доля тетраоксида кремния в несколько раз меньше, чем доля тетраоксида титана. В зоне смешения и ниже по потоку протекает несколько реакций: гомогенная реакция с образованием газофазного компонента TiO_2 , нуклеация, в результате которой образуются мономеры частиц TiO_2 , увеличение размера этих частиц за счет поверхностной реакции и коагуляции, гомогенная реакция с образованием газофазного компонента SiO_2 , который конденсируется на поверхности частиц диоксида титана и уже образовавшихся композитных частиц TiO_2-SiO_2 . В расчетах используются две модели: модель с полным покрытием ядра и модель, в которой определяется доля покрываемой диоксидом кремния площади поверхности каждой частицы в данном объеме [6]. Предполагается, что композитные частицы, полностью покрытые слоем SiO_2 , не коагулируют. При этом в модели предусмотрена возможность коагуляции частиц с частичным покрытием. Обе модели синтеза композитных наночастиц со структурой ядро TiO_2 — оболочка SiO_2 основаны на установленном экспериментально факте, что время агломерации наночастиц TiO_2 на два порядка меньше времени агломерации наночастиц SiO_2 [13].

При синтезе композитных наночастиц на размеры их ядер и оболочек можно влиять двумя способами: варьировать соотношение расходов реагентов или изменять режим течения. Первый способ не требует конструктивных изменений в схеме установки, однако для каждого варианта необходим контроль за составом конечного продукта. Управление режимом течения (изменение температуры, скорости, плотности потока, создание дополнительных зон циркуляции и т. д.), как правило, реализуется с помощью боковых струй. Управляющими параметрами являются их положение и расход, а в данной задаче состав, так как наличие или отсутствие в составе боковой струи тетраоксида кремния соответствует раздельному или совместному окислению прекурсоров. Вариант управления при раздельном окислении прекурсоров рассмотрен в [5]. В настоящей работе, в отличие от [5], исследуется влияние на размеры ядра и толщину оболочки только струй воздуха.

Математические модели. При моделировании рассматривается течение вязкой теплопроводной смеси газов. При конверсии $TiCl_4$ смесь состоит из следующих компонентов: O_2 , N_2 , $TiCl_4$, TiO_2 , Cl_2 . Последние два компонента появляются в результате обобщенной химической реакции



При конверсии $SiCl_4$ смесь состоит из компонентов O_2 , N_2 , $SiCl_4$, SiO_2 , Cl_2 . Последние два компонента образуются в результате обобщенной химической реакции



При синтезе композитных частиц смесь состоит из O_2 , N_2 , $TiCl_4$, $SiCl_4$, TiO_2 , SiO_2 , Cl_2 . Последние три компонента появляются в результате обобщенных химических реакций (1), (2).

Режим течения полагается одножидкостным и описывается системой квазигазодинамических уравнений [16], которая с учетом внешних сил и источников тепла имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{j} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p &= \rho \mathbf{F} + \operatorname{div} \Pi, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{j}H) + \operatorname{div} \mathbf{q} = (\mathbf{j} \cdot \mathbf{F}) + \operatorname{div}(\Pi \mathbf{u}) + Q.$$

Здесь \mathbf{F} — вектор плотности массовой силы; H — полная удельная энтальпия; Π — тензор вязких напряжений. Вектор плотности потока массы определяется соотношением

$$\mathbf{j} = \rho \mathbf{u} - \tau[\operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p - \rho \mathbf{F}],$$

где $\tau = (M/(\operatorname{Re} \operatorname{Sc}))T/p$; Re — число Рейнольдса; Sc — число Шмидта. К этой системе добавляются уравнения неразрывности для компонентов смеси:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}^i = \sum_j J^{(ji)} \quad (4)$$

и объемной концентрации твердой фазы c_p :

$$\frac{\partial c_p}{\partial t} + \operatorname{div}(c_p \mathbf{u}) = \sum_j J^{(jp)}. \quad (5)$$

Здесь $J^{(ji)}$ — интенсивность превращения j -го компонента в i -й; $J^{(jp)}$ — интенсивность превращения j -го компонента в твердую фазу. В правых частях уравнений (4), (5) в общем случае учтены следующие кинетические соотношения, описывающие изменение концентраций тетрахлорида титана, диоксида титана в газовой и твердой фазах, а также тетрахлорида кремния, диоксида кремния в газовой и твердой фазах за счет гомогенной, гетерогенной реакций и фазового перехода:

$$\begin{aligned} \frac{dC^1}{dt} &= -k_T^r C^1 = -(k_T^g + k_T^s A) C^1, & \frac{dC^2}{dt} &= k_T^g C^1 - k_T^p C^2, \\ \frac{dC^3}{dt} &= k_T^s C^1 A + k_T^p C^2, & \frac{dC^4}{dt} &= -k_S^r C^4 = -(k_S^g + k_S^s A) C^4, \\ \frac{dC^5}{dt} &= k_S^g C^4 - k_S^p C^5, & \frac{dC^6}{dt} &= k_S^s C^4 A_S + k_S^p C^5. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $C^1, C^2, C^3, C^4, C^5, C^6$ — концентрации тетрахлорида титана, диоксида титана в газовой фазе и диоксида титана в твердой фазе, тетрахлорида кремния, диоксида кремния в газовой фазе и диоксида кремния в твердой фазе; k_T^r, k_S^r — скорости обобщенных реакций; k_T^g, k_S^g — скорости гомогенных реакций; k_T^s, k_S^s — скорости поверхностных реакций; k_T^p, k_S^p — скорости фазовых переходов; A — относительная площадь частиц.

Дополнительные соотношения, замыкающие систему уравнений, имеют вид

$$p = \rho R_m T \frac{m_g}{1 - c_p}, \quad \alpha_i = \frac{\rho_i}{\rho}, \quad R_m = R_g \frac{1}{m_i} \sum_i \alpha_i,$$

где R_g — удельная газовая постоянная; R_m — удельная газовая постоянная смеси; m_g — массовая доля газа; α_i — массовая доля i -го компонента.

Добавляя к соотношениям (3)–(6) уравнение для числа частиц

$$\frac{dN}{dt} = k_T^g C^1 N_A - \frac{\beta N^2}{2} \quad (7)$$

(N_A — число Авогадро; β — параметр коагуляции [14]), с учетом начального диаметра d_0 , массы, количества и объемной концентрации частиц в каждый момент времени в каждой расчетной ячейке можно вычислить их размер.

Согласно [14, 15] в уравнениях (6), (7) были заданы следующие значения констант:

$$k_T^r = 8,26 \cdot 10^4 e^{-10681/T}, \quad k_T^s = 4,9 \cdot 10^3 e^{-8993/T}, \quad k_T^p = 1,2 \cdot 10^{10} e^{-10681/T},$$

$$k_S^r = 8,0 \cdot 10^{14} e^{-400000/T}, \quad k_S^s = 4,0 \cdot 10^{13} e^{-40828/T}, \quad k_S^p = k_T^p.$$

Граничные условия. На стенках реактора задавались условия прилипания, отсутствия потока тепла и равенство нулю нормальной производной давления (это дополнительное условие вызвано спецификой системы квазигидродинамических уравнений). Для струй задаются расход и температура. Для вычисления давления, плотности и скорости на входных границах струй используются граничные условия, основанные на использовании инвариантов Римана для уравнений Эйлера.

При численном интегрировании уравнения (3)–(5) записываются в цилиндрической системе координат (задача осесимметричная) и приводятся к безразмерному виду. В качестве основных размерных параметров задачи выбираются радиус канала, скорость звука в воздухе при температуре 300 К и плотность воздуха.

Для численного решения системы уравнений используется явная по времени разностная схема. Производные по времени аппроксимируются разностями вперед с первым порядком точности. Пространственные производные аппроксимируются центральными разностями со вторым порядком точности.

Результаты расчетов. Реакторы для синтеза наночастиц TiO_2 и SiO_2 имели следующие геометрические характеристики: длина и диаметр $L_R = 444$ мм, $d_R = 32$ мм соответственно, длина и диаметр канала $L_C = 38$ мм, $d_C = 14$ мм, длина переходного участка $L_{Tr} = 33$ мм, угол наклона боковой стенки переходного участка $\alpha = 15^\circ$. Координаты средних линий щели вдува боковых струй имели значения $z_1 = 28$ мм, $z_2 = 280$ мм.

Расчеты процесса конверсии тетрахлорида титана проведены при следующих значениях режимных параметров установки: $T_1 = 3400$ К, $Q_1 = 1$ г/с, $T_2 = 490$ К, $Q_2 = 1,87$ г/с, $T_3 = 300$ К, $Q_3 = 3,6$ г/с. На рис. 2 приведены распределения вдоль тракта реактора средневзвешенного по числу частиц диаметра частиц и осредненной по сечению температуры при наличии закалочной струи и после ее отключения.

Скачкообразное увеличение размера частиц в области вдува закалочной струи обусловлено сжатием потока частиц боковыми струями, увеличением плотности числа ча-

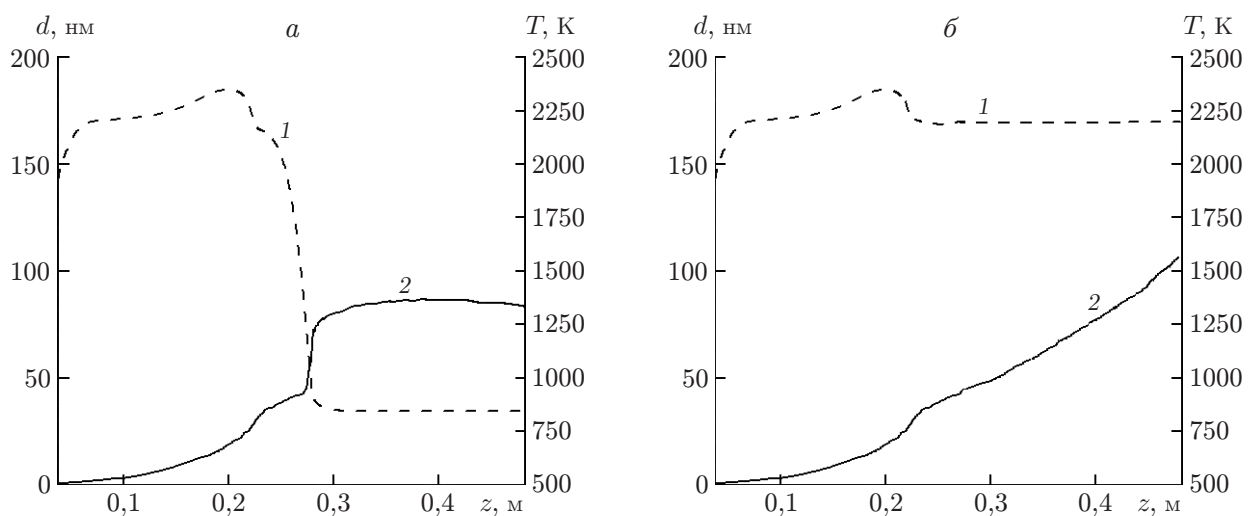


Рис. 2. Распределения вдоль тракта реактора осредненной по сечению температуры (1) и средневзвешенного диаметра частиц (2) при наличии закалочной струи ($Q_3 = 3,6$ г/с) (а) и через $\Delta t = 0,05$ с после ее отключения (б)

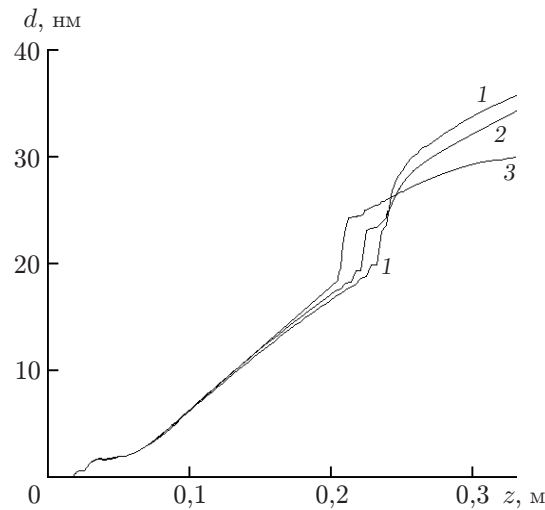


Рис. 3. Распределение вдоль тракта реактора осредненного по сечению диаметра частиц при различных значениях расхода закалочной струи:
 1 — $Q_3 = 1,8$ г/с, 2 — $Q_3 = 4,1$ г/с, 3 — $Q_3 = 8,1$ г/с

Микроструктура и физико-химические свойства образцов порошка SiO_2

Q_3 , г/с	$S_{\text{ВЕТ}}$, м ² /г (прибор "Сорби-М")	$d_{\text{ВЕТ}}$, нм	C_{Cl} (атом.), % (электронная дифрактометрия, JEM-2200FS)
1,8	70	39,0	0,38
4,1	73	37,4	0,12
8,1	96	28,4	0,13

стиц и, следовательно, увеличением скорости процесса коагуляции. Стабилизация размера обусловлена одновременным уменьшением числа частиц и увеличением скорости потока (и частиц) в области за закалочной струей (см. рис. 2,а). После отключения закалочной струи скорость частиц уменьшается с 40 м/с (см. рис. 2,а) до 25 м/с (см. рис. 2,б), что приводит к дальнейшему росту размеров частиц за счет коагуляции (см. рис. 2,б). Расчеты проводились с использованием модели конверсии тетраоксида титана [2], верифицированной на экспериментальных данных [3].

Расчеты конверсии тетраоксида кремния проведены при следующих значениях режимных параметров установки: $T_1 = 4300$ К, $Q_1 = 1,23$ г/с, $T_2 = 300$ К, $Q_2 = 0,47$ г/с, $T_3 = 300$ К и трех значениях расхода закалочной струи: $Q_3 = 1,8$; 4,1; 8,1 г/с. Данное исследование управления физико-химическими свойствами порошка SiO_2 и морфологией его частиц является одновременно валидацией используемой модели. На рис. 3 представлено распределение осредненного по сечению диаметра частиц. Выше по потоку от щели вдува закалочной струи с увеличением ее расхода и соответственно снижением температуры основного потока уменьшается скорость всех реакций, что приводит к уменьшению размеров синтезируемых частиц.

В таблице приведены результаты анализа микроструктуры и физико-химических свойств образцов порошка, состоящего из аморфных частиц SiO_2 ($S_{\text{ВЕТ}}$ — удельная площадь поверхности, $d_{\text{ВЕТ}}$ — средний размер частиц, рассчитанный по удельной площади поверхности, C_{Cl} — доля загрязняющего хлора в образце порошка).

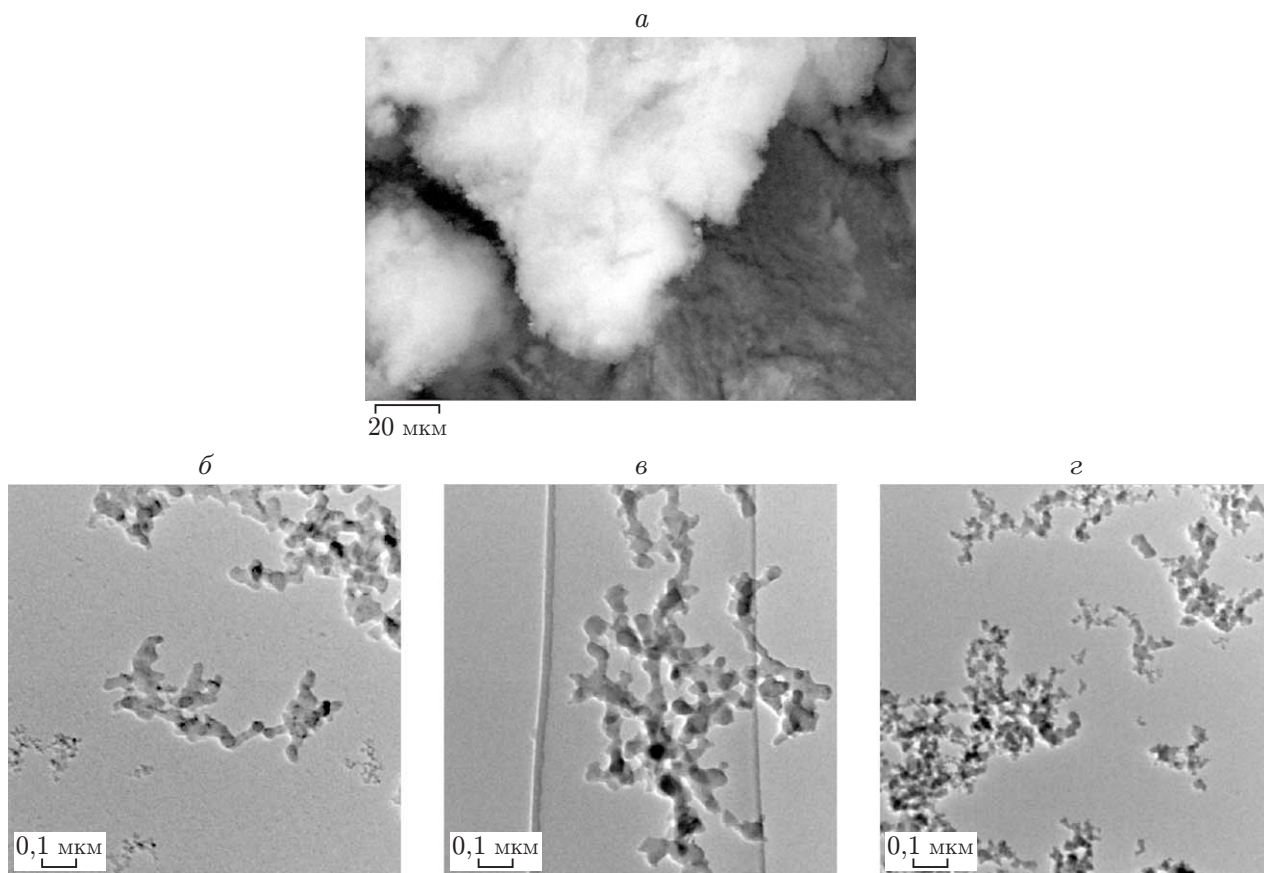


Рис. 4. Агломераты порошка SiO_2 в микромасштабе (растровый электронный микроскоп Carl Zeiss EV050 XVP) (*a*) и нанометровом масштабе (просвечивающий микроскоп высокого разрешения JEM-2200FS) (*б-г*) при различных значениях расхода закалочной струи:

a, г — $Q_3 = 8,1$ г/с, *б* — $Q_3 = 1,8$ г/с, *в* — $Q_3 = 4,1$ г/с

На рис. 4, *a* показаны агломераты порошка оксида кремния в микромасштабе, полученные при $Q_3 = 8,1$ г/с. Видно, что размеры агломератов составляют единицы микрометров. На рис. 4, *б-г* показаны агломераты в нанометровом масштабе при различных значениях расхода закалочных струй.

Результаты сравнения диаметров частиц, полученных в расчете (см. рис. 3) и эксперименте (см. таблицу), показывают, что относительная погрешность составляет 7–8 %. Это свидетельствует об адекватности моделей конверсии тетрахлорида кремния и синтеза частиц диоксида кремния.

Результаты расчетов и анализа образцов показывают возможность управления физико-химическими свойствами порошка и морфологией его частиц. Удельная площадь поверхности частиц увеличивается, а их характерный размер уменьшается с ростом отношения гидродинамических напоров закалочных струй и горячего сносящего потока. Также вследствие разбавления закалочными струями с увеличением данного отношения уменьшается доля загрязняющего хлора в конечном продукте.

Расчеты процесса синтеза композитных частиц проводились при следующих условиях. Геометрические характеристики реактора: $L_R = 600$ мм, $d_R = 32$ мм, $L_C = 38$ мм, $d_C = 14$ мм, $L_T = 33$ мм, $\alpha = 15^\circ$; координаты средних линий щелей вдува боковых струй: $z_1 = 28$ мм, $z_2 = 192$ мм; режимные параметры работы установки: $T_1 = 4500$ К, $Q_1 = 1$ г/с,

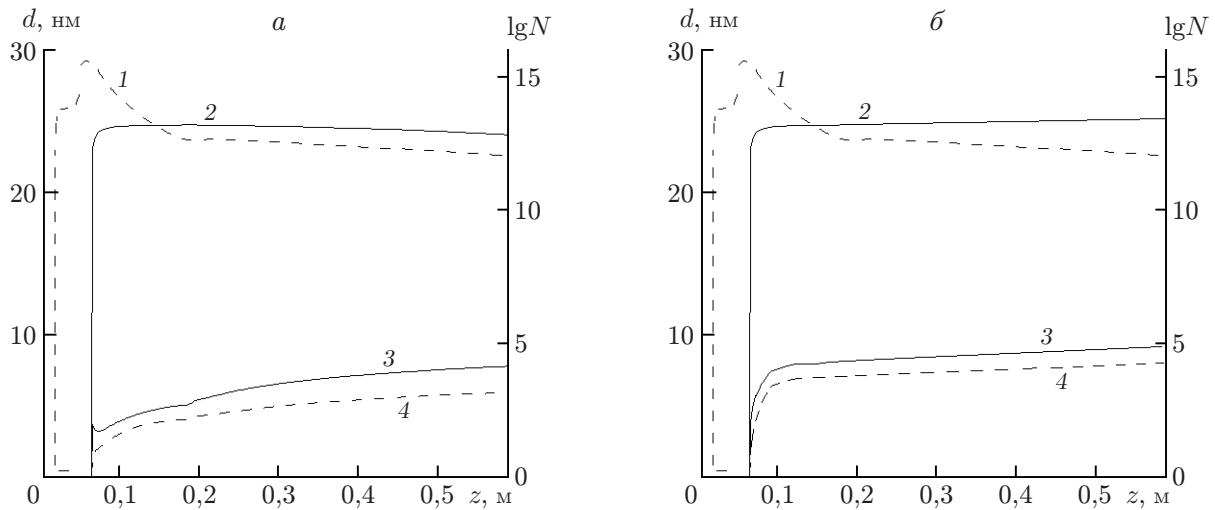


Рис. 5. Распределения вдоль тракта реактора средневзвешенного диаметра частиц и плотности числа частиц, полученные с использованием модели с полным покрытием ядра:

a — при отсутствии боковой струи, *б* — при наличии боковой струи; 1 — логарифм плотности числа частиц TiO_2 , 2 — логарифм плотности числа композитных частиц, 3 — диаметр композитных частиц, 4 — диаметр ядра композитных частиц

$T_2 = 300 \text{ K}$, $Q_2 = 4,0 \text{ г/с}$, $T_3 = 300 \text{ K}$, $Q_3 = 20 \text{ г/с}$; расход TiCl_4 в боковой струе равен $0,016 \text{ г/с}$, расход SiCl_4 в боковой струе — $0,004 \text{ г/с}$.

На рис. 5 представлены распределение вдоль тракта реактора средневзвешенных диаметров частиц по их числу

$$d_i = \frac{1}{N_i} \sum_j d_{ij} N_{ij} \quad \left(N_i = \sum_j N_{ij} \right),$$

а также распределение плотности числа частиц, полученные с использованием модели полного покрытия ядра.

В отличие от случая отдельной подачи паров TiCl_4 и SiCl_4 (см. [5]) при совместной подаче реагентов через первую боковую щель практически отсутствует область, в которой происходит увеличение размера частиц диоксида титана, что приводит к синтезу частиц с ядром, размер которого мал по сравнению с толщиной оболочки. При этом степень смешения образовавшихся частиц диоксида титана и диоксида кремния в газовой фазе выше, чем в зоне смешения второй боковой струи и основного потока при отдельной подаче, что приводит к существенному увеличению числа композитных частиц на выходе из рабочей зоны. При наличии второй боковой струи (см. рис. 2) поток перед зоной вдува тормозится, что увеличивает время нахождения частиц в этой области, соответственно увеличивается размер ядер композитных частиц, так как происходит коагуляция частиц TiO_2 . В этом случае толщина оболочки меньше, чем при отсутствии второй боковой струи.

На рис. 6 представлены результаты расчетов для той же схемы подвода реагентов и боковых струй, но с использованием модели синтеза с частичным покрытием поверхности ядра. На рис. 5, 6 видно, что при использовании модели с полным покрытием частиц число композитных частиц на выходе из реактора на несколько порядков меньше, чем число композитных частиц, полученных с использованием модели с частичным покрытием. Результаты, полученные с использованием этих двух моделей, различаются также качественно. На рис. 6 видно, что на выходе из реактора отсутствуют частицы диоксида

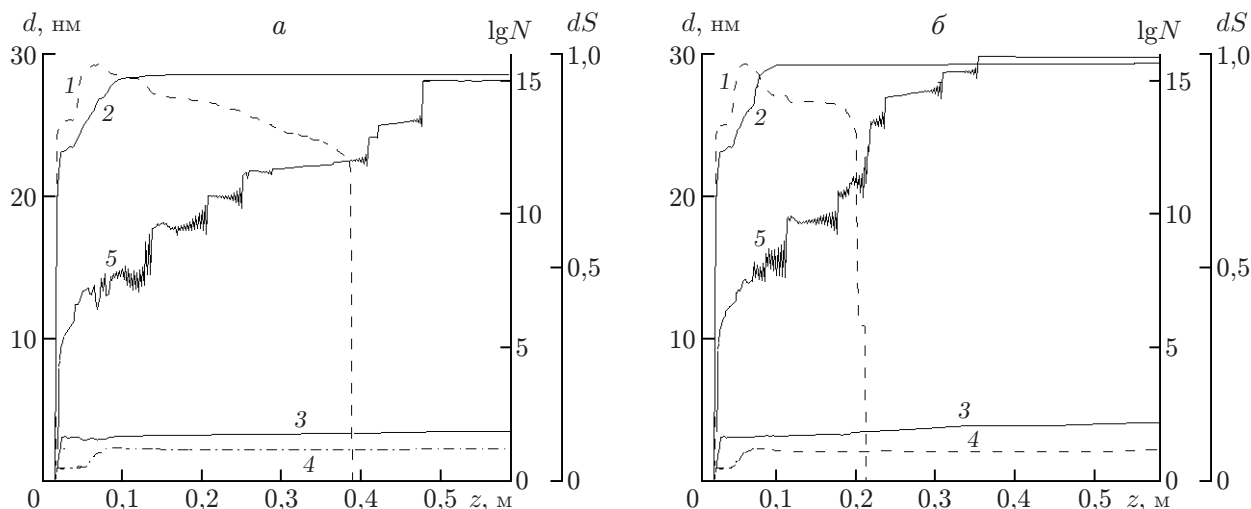


Рис. 6. Распределения вдоль тракта реактора средневзвешенного диаметра частиц, плотности числа частиц и средневзвешенной доли площади поверхности частиц, покрытой SiO_2 , полученные с использованием модели с частичным покрытием ядра:

a — при отсутствии боковой струи, *б* — при наличии боковой струи; 1 — логарифм плотности числа частиц TiO_2 , 2 — логарифм плотности числа композитных частиц, 3 — диаметр композитных частиц, 4 — диаметр ядра композитных частиц, 5 — доля площади поверхности частиц, покрытой SiO_2

титана. В результате процесса коагуляции частиц TiO_2 и процесса формирования оболочки, превращающего эти частицы в композитные, чистых частиц диоксида титана в потоке не остается, о чем свидетельствует характер кривой 1 на рис. 6. Причем в случае модели с частичным покрытием в зоне торможения перед второй боковой струей процесс перехода частиц TiO_2 в композитные частицы (даже при малой доле площади поверхности, покрытой SiO_2) преобладает над процессом коагуляции. Поэтому размер ядер меньше, чем при отсутствии боковой струи (ср. рис. 6, *a, б*), а толщина оболочки больше. Эта ситуация противоположна ситуации, имеющей место при использовании модели с полным покрытием ядер (ср. рис. 5, *a, б*). Вид кривой 5 на рис. 6, описывающей поведение средневзвешенной доли площади поверхности частиц, покрытой SiO_2 (наличие ступеней, немонотонность), объясняется заложенным в модель ограничением на минимальную толщину оболочки, равную диаметру мономеров диоксида кремния, и возможным уменьшением доли площади покрытия при переходе образовавшихся частиц TiO_2 в разряд композитных частиц, имеющих малую площадь покрытия поверхности ядра.

На рис. 7 представлены распределения вдоль тракта реактора температуры и скорости потока в случаях отсутствия и наличия боковой струи при синтезе композитных наночастиц. Видно, что боковая струя тормозит поток на выходе из канала реактора и уменьшает температуру газа. Это оказывает влияние на время нахождения частиц в активной зоне, скорость реакций и как следствие на размеры ядра и толщину оболочки.

Заключение. В работе представлены результаты исследования влияния закалочной струи воздуха на физико-химические свойства и морфологию частиц диоксида титана, диоксида кремния и композитных частиц $\text{TiO}_2\text{-SiO}_2$, синтезируемых с помощью одностадийного хлоридного метода в плазмохимическом реакторе проточного типа. Это влияние обусловлено изменением характеристик потока в тракте реактора (температуры, скорости) и возникновением дополнительных зон циркуляции в окрестности выдува струи. По-

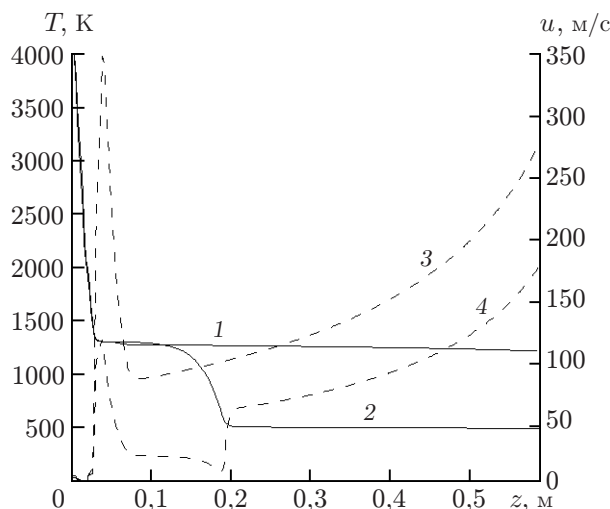


Рис. 7. Распределения вдоль тракта реактора осредненных по сечению температуры (1, 3) и продольной компоненты скорости потока (2, 4):
1, 2 — при отсутствии второй боковой струи, 3, 4 — при наличии второй боковой струи

казана возможность управления размерами синтезируемых частиц путем изменения параметров закалочной струи. Результаты математического моделирования синтеза частиц для случаев синтеза частиц TiO_2 и SiO_2 достаточно хорошо согласуются с результатами проведенных экспериментов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Аульченко С. М., Латыпов А. Ф., Яненко Н. Н. Применение проекционного метода для построения контура тела минимального сопротивления // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 1985. № 2. С. 108–113.
2. Аульченко С. М. Управление процессом роста наночастиц диоксида титана в проточном плазмохимическом реакторе // Инж.-физ. журн. 2013. Т. 86, № 5. С. 967–973.
3. Kartaev E. V., Lukashov V. P., Vashenko S. P., et al. Experimental study of the synthesis of the ultrafine titania powder in plasmachemical flow-type reactor // Intern. J. Chem. Reactor Engng. 2014. V. 12, N 1. P. 1–20. DOI: 10.1515/ijcre-2014-0001.
4. Kartaev E. V., Aulchenko S. M., Emelkin V. A. Experimental and numerical study of high-temperature synthesis of nanosized silica particles in flow-type plasmachemical reactor // Abstr. of the 14th Intern. conf. “Gas discharge plasmas and their applications”, Tomsk (Russia), 15–21 Sept. 2019. Tomsk: TRU Publ. House, 2019. P. 182.
5. Аульченко С. М., Картаев Е. В. Моделирование одностадийного синтеза композитных частиц типа ядро — оболочка при раздельном окислении тетрахлоридов титана и кремния в плазмохимическом реакторе // Инж.-физ. журн. 2020. Т. 93, № 1. С. 114–120.
6. Аульченко С. М., Картаев Е. В. Моделирование синтеза композитных частиц, имеющих ядро и оболочку, на основе совместного окисления тетрахлоридов титана и кремния в плазмохимическом реакторе // ПМТФ. 2020. Т. 61, № 4. С. 77–83.
7. El-Toni A. M., Yin S., Sato T. Control of silica shell thickness and microporosity of titania — silica core — shell type nanoparticles to depress the photocatalytic activity of titania // J. Colloid Interface Sci. 2006. V. 300, N 1. P. 123–130.

8. **Siddiquey I. A., Furusawa T., Sato M., et al.** Control of the photocatalytic activity of TiO₂ nanoparticles by silica coating with polydiethoxysiloxane // *Dyes Pigments*. 2008. V. 76, N 3. P. 754–759.
9. **Teleki A., Buesser B., Heine M. C., et al.** Role of gas-aerosol mixing during in situ coating of flame-made titania particles // *Industr. Engng Chem. Res.* 2009. V. 48, N 1. P. 85–92.
10. **Buesser B., Pratsinis S. E.** Design of gas-phase synthesis of core — shell particles by computational fluid — aerosol dynamics // *AIChE J.* 2011. V. 57, N 11. P. 3132–3142.
11. **Гриняева Е. А., Кочкоров Б. Ш., Пономарев Д. В. и др.** Плазмохимический синтез кристаллических нанодисперсных композиционных оксидов // *Изв. Том. гос. политехн. ун-та. Сер. Химия*. 2010. Т. 317, № 3. С. 33–37.
12. **Гришин П. В., Катнов В. Е., Степин Г. С. и др.** Газофазный синтез композитных частиц со структурой ядро — оболочка на основе оксидов кремния (IV) и цинка // *Вестн. Казан. технол. ун-та*. 2016. Т. 19, № 14. С. 56–60.
13. **Ehrman S. H., Friedlander S. K., Zachariah M. R.** Characteristics of SiO₂/TiO₂ nanocomposite particles formed in a premixed flat flame // *J. Aerosol Sci.* 1998. V. 29, N 5/6. P. 687–706.
14. **Kolesnikov A., Kekana J.** Nanopowders production in the plasmachemical reactor: modelling and simulation // *Intern. J. Chem. Reactor Engng.* 2011. V. 9. A83.
15. **Park H. K., Park K. Y.** Control of particle morphology and size in vapor-phase synthesis of titania, silica and alumina nanoparticles // *KONA Powder Particle J.* 2015. N 32. P. 85–101.
16. **Елизарова Т. Г.** Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Науч. мир, 2007.

*Поступила в редакцию 15/II 2021 г.,
после доработки — 9/III 2021 г.
Принята к публикации 29/III 2021 г.*
