

Сведения о выполненных работах и
полученных научных результатах в 2024 году

по проекту **«Научные основы технологии нейтрализации опасных химических и биологических объектов, распространяющихся в атмосфере»**,
поддержанному Российским научным фондом

Соглашение № 22-69-00108

Руководитель: Ворожцов Александр Борисович, д-р физ.-мат. наук

В работе проведена доработка и исследование эффективности конструкций распылителей для создания облака нейтрализующих аэрозолей с целью достижения максимально высокой дисперсности и скорости создания аэрозоля. Разработан и экспериментально исследован пневматический распылитель, основанный на работе сжатого газа, который позволяет диспергировать сотни граммов порошка за относительно небольшое время.

Разработана конструкция распылителя, работающего на основе генерации холодного газа за счет энергии высокоэнергетических материалов (ВЭМ). Разработан оригинальный лабораторный стенд позволяющий создать облако аэрозоля TiO_2 с дисперсностью частиц от 4 до 10 мкм и максимальной скоростью генерации за доли секунды. Установлено, что скорость создания аэрозоля и высокая дисперсность частиц являются важными условиями для протекания фотокаталитических реакций и адсорбции газов. Проведены испытания каталитических систем на примере адсорбционно-фотокаталитической нейтрализации паров ацетона.

Установлено, что влажность и температура оказывают значительное влияние на кинетику фотокаталитического окисления (ФКО) паров органических веществ на частицах TiO_2 . Показано, что состав атмосферы оказывает как положительное, так и отрицательное влияние на кинетику ФКО. Оптимальные условия ФКО для TiO_2 зависят от баланса между температурой и влажностью. Показано, что основная активность TiO_2 в фотокатализе наблюдается в УФ-диапазоне. Удельная поверхность частиц TiO_2 существенно влияет на кинетику ФКО паров. Получены результаты экспериментов по темновой адсорбции паров ацетона с помощью распыленных аэрозолей в климатической камере. Показано, что результирующая масса адсорбированных на частицах паров ацетона к концу эксперимента, практически, одинакова для случаев любой влажности от 25 до 90 %.

Из анализа экспериментальных данных получены значения параметров модели, описывающей уменьшение концентрации частиц и паров ацетона в воздухе. Проведен аналитический расчет с экстраполяцией по модельным формулам для уменьшения свободной поверхности частиц и увеличения массы адсорбированных на частицах паров ацетона в зависимости от времени. Показано, что распыление TiO_2 или ZnO , даже с небольшой концентрацией (0.1 г/м³) позволяет в течение времени до 100 минут полностью нейтрализовать пары ацетона, независимо от влажности среды и

наличия освещения. При этом важным условием является достаточно высокая дисперсность аэрозоля, которую обеспечивает импульсный способ распыления.

Развита математическая модель эволюции аэрозольного облака, которая в общем виде рассматривает полидисперсный аэрозоль и учитывает процессы осаждения частиц на стенках, гравитационное осаждение, коагуляцию. Получены аналитические зависимости и результаты численных расчетов оценки массы осевших и находящихся в воздухе частиц, изменения дисперсности частиц, суммарной поверхности частиц в воздухе.

Численно показано, что скорость вылета частиц из сопла распылителя и геометрия распыла не влияют на формирование нейтрализующего облака аэрозоля при выполнении трех условий: высокая дисперсность частиц, достаточно большой характерный размер помещения и высокая скорость создания первоначального облака частиц, в которых источник аэрозоля можно считать точечным. Дальнейшая эволюция аэрозоля, формирование облака в пространстве не зависит от первоначального импульса распыления, но характеризуется сложным комплексом процессов, которые учтены во взаимосвязи – диффузия, осаждение и коагуляция. Получено выражение для нахождения коэффициента скорости осаждения частиц, которое нелинейно зависит от размера частиц. Получен новый результат о существовании оптимального размера частиц аэрозоля, который позволит частицам оставаться в воздухе максимально долгое время. Предложена математическая модель для описания изменения дисперсности частиц со временем с учетом коагуляции на основе интегро-дифференциальных уравнений Смолуховского. Проведены модельные расчеты для различной интенсивности коагуляции.

Определена зависимость уменьшения относительной суммарной площади поверхности частиц от времени с учетом осаждения и коагуляции частиц. Модельные расчеты для аэрозоля TiO_2 демонстрируют динамику уменьшения площади поверхности, доступной для адсорбции и химических реакций – нейтрализации молекул токсичного газа.

Рассмотрены кинетические модели адсорбционно-фотокаталитических процессов для нейтрализации газофазных загрязнителей. Предложена оптимальная модель дробного порядка, описывающая процессы адсорбции и ФКО, и разработан численный алгоритм для идентификации параметров модели с применением методов оптимизации. Предложен оригинальный алгоритм для идентификации параметров математической модели применительно к проблеме нейтрализации модельного загрязняющего вещества, включающего процессы адсорбции и ФКО опасного химического соединения без заранее заданного ограничения на порядок процесса. Проведено совершенствование технологии получения нанотермитных систем и оценка влияния дисперсности нанопорошков алюминия (nAl) на их свойства. Экспериментально показано, что ручное смешивание нанотермитной смеси на основе алюминия не позволяет достичь высокой степени однородности, что приводит к низким значениям взрывчатых характеристик. Максимальные значения взрывчатых

характеристик нанотермитных систем достигаются при использовании частоты УЗВ 40 кГц и продолжительности 30 мин.

Получены новые экспериментальные данные об эволюции облака аэрозоля в зависимости от рецептуры и технологии изготовления нанотермитных составов. Установлено, что поведение облака аэрозоля зависит от свойств и методики получения частиц и смесей на их основе, условий окружающей среды и динамики реакции.

Разработана математическая модель нейтрализации биологических патогенов под воздействием биоцидсодержащих паров. Разработаны методики численной реализации модели для оценки параметров кинетических уравнений, что позволило детализировать процессы инактивации патогенов в зависимости от внешних условий (температура, влажность). Выполнены экспериментальные исследования с использованием модельного штамма *L. casei* ATCC 393. Получены кинетические кривые выживания микроорганизмов при воздействии паров йода. На основе экспериментальных данных проведена оптимизация параметров численной модели методом решения обратной задачи. Разработаны рекомендации по генерации и сохранению биоцидсодержащих паров для обеспечения эффективной инактивации опасных биологических патогенов. Проведено количественное сравнение факторов, непосредственно влияющих на эффективность инактивации в зависимости от метода воздействия йода. Показано, что количество молекул йода, поступающих из обогащенной йодом жидкости, сопоставимо с количеством молекул, поступающих из сильно разбавленных паров в воздухе.