

4.O. Figovsky, I. Nasyrov, D. Pashin, Z. Khalitov, D. Valeeva. Structure and Diffraction by Radial Cylindrical Crystals: Two-Dimensional Case. Scientific Israel – Technological Advantages, vol. 14, 1, 2012, p. 79-86.

Жукова Дарья Николаевна, студент 3 курса, E-mail: 79821160570darya@gmail.com.
Халитов Зуфар Яхъич, к.т.н., Доцент кафедры НТвЭ, zufar.khalitov@mail.ru

УДК 004.942; 543.544.33

МЕТОД РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ ГАЗОХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЙ КОЛОНКИ ПИЛЛЯРНОГО ТИПА

К.И. Миланина, А.Н. Агафонов, Т.А. Андреев, Т. Мурагиджимана
«Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева», г. Самара

Ключевые слова: пиллар, газовая хроматография, моделирование

На сегодняшний день наиболее распространенными газохроматографическими колонками являются колонки из плавленного кварца, которые могут быть заменены более совершенными микроколонками пиллярного типа. Такие колонки представляют собой реализованные в кремниевой подложке каналы с вертикальными столбцами (пиллярами), герметизированные кремниевой или стеклянной пластиной.

Преимущество пиллярных колонок заключается в лучшей управляемости параметрами потока внутри канала, а также большей площадью контакта компонентов анализируемой пробы со стенками, что обусловлено наличием вертикальных столбцов [1].

При разработке подобных колонок важно иметь возможность прогнозировать их параметры еще на этапе проектирования. Решение такой задачи требует комплексного моделирования широкого класса явлений, в частности, газовой динамики и адсорбционных процессов.

В рамках данной работы была разработана модель течения газа внутри пиллярного микроканала газохроматографической колонки с учетом диффузионных и адсорбционных процессов.

Предлагаемая модель имеет следующую структуру:

- Модуль расчета газовой динамики, реализованный в Comsol Multiphysics, предназначенный для расчета поля скоростей и поля давлений для стационарного случая с учетом геометрии канала;

- Модуль моделирования физико-химических процессов, разработанный в программной системе GNU Octave, позволяющий моделировать кинетику диффузии молекул внутри потока газа и их адсорбции на стенках канала и пилляров, при этом предварительно рассчитанные поля скоростей и давлений используются как исходные данные.

Результатом моделирования является пространственное распределение частиц пробы, позволяющее определить рабочие параметры колонки, в частности, ее эффективность.

Моделирование проводилось в 2D пространстве с целью экономии ресурсов. В качестве моделируемого газа был выбран аргон как один из наиболее используемых в хроматографии газов носителей. Геометрические параметры моделируемого канала соответствуют параметрам применяемых на практике газохроматографических колонок: диаметр 140 мкм, длина 2 м. Моделирование проводится на участке длиной 2 мм с последующим масштабированием результатов. Тестовые пиллары, расположенные внутри канала представляют собой вертикальные столбцы цилиндрической формы с диаметром $d = 30$ мкм и расстоянием между их центрами по вертикали и по горизонтали 84 и 210 мкм, соответственно. Схема расположения пилларов соответствует рисунку 1. На рисунке 1 представлен результат предварительного расчета поля скоростей газа внутри микроканала с использованием Comsol Multiphysics.

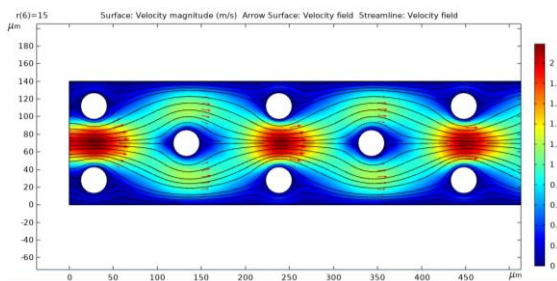


Рисунок 1 – Расчетное поле скоростей потока газа внутри микроканала

Согласно расчетным результатам, объемный расход газа при данных параметрах составляет 0,84 мл/мин.

Далее, полученные поля скоростей и давлений экспортировались в виде сетки значений (рисунок 2) по координатам с разрешением 1 мкм для использования в модуле моделирования физико-химических процессов.

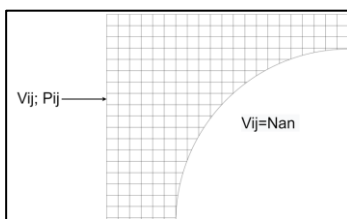


Рисунок 2 – схематическое отображение сетки значений

Каждой ячейке на рисунке 2 соответствуют постоянные значения скорости \vec{V}_{ij} и давления P_{ij} . Области с неопределяемыми значениями скорости соответствуют пилларам внутри колонки.

Коэффициент диффузии частиц пробы рассчитывается с использованием полученных значения давлений через длину свободного пробега для каждой ячейки моделируемой области. Далее, исходя из формулы (1), стохастическим методом [2] определяется новое положение диффундирующей частицы через промежуток времени dt , имеющий сравнительно большой масштаб (порядка 10^{-3} с), что позволяет моделировать эволюцию системы на достаточно длительных отрезках времени.

$$c_f(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{1}{4\pi D dt}} \exp\left(-\frac{\vec{r}^2}{4D dt}\right), \quad (1)$$

где $c_f(\vec{r}, t)$ – плотность вероятности обнаружения частицы ($c_f(\vec{r}, 0) = \delta(r)$ – дельта-функция, $c_f(\infty, t) = 0$), D – коэффициент диффузии.

Частицы, попавшие в область стенок, считаются адсорбированными и исключаются из дальнейших расчетов, также исключаются частицы, вышедшие за границы модельного участка. Таким образом, при исчерпании свободных частиц можно получить распределение длин их пробегов до контакта со стенками, что позволяет вычислить среднее количество взаимодействий частиц со стенкой и, следовательно, эффективность колонки. Расчетное значение эффективности (ВЭТТ) моделируемой колонки составило $H = 10$ мм для приведенного случая.

С помощью разработанной модели можно рассчитывать эффективность газохроматографического процесса для колонок с пилларами различной формы и конфигурации.

Список использованных источников

1. Azzouz I. and Bachari K. MEMS Devices for Miniaturized Gas Chromatography // MEMS Sensors - Design and Application – 2018. – Ch.7
2. Agafonov A. N., Eremin A. V., Milanina K. I. etc. Application of molecular dynamics for modeling processes in microfluidic devices // Journal of Physics: Conference Series. — 2021. — Vol. 1745.

Миланина Ксения Игоревна, аспирант кафедры наноинженерии, лаборант-исследователь НОЦ-НТ94, e-mail: potienko97@gmail.com.

Агафонов Андрей Николаевич, к.т.н., доцент кафедры наноинженерии, e-mail: agafonov.ssau@yandex.ru.

Андреев Тарас Андреевич, инженер кафедры наноинженерии, e-mail: taraffko@yandex.ru

Теонесте Мурагиджимана, студент группы 6282-030401D, tmuragijimana@yahoo.fr