

А. В. НИЦЕНКО\*, С. А. ТРЕБУХОВ

АО «Институт металлургии и обогащения», Алматы,

\*alina\_nitsenko@gmail.com

**РАСЧЕТНАЯ ОЦЕНКА КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ  
ПАРА МЫШЬЯКА ЧЕРЕЗ ПОРИСТУЮ СРЕДУ**

Мышьяк является одним из примесных элементов, подлежащих предварительному удалению из металлургического сырья, вследствие его негативного воздействия на технологию и окружающую среду. Одним из эффективных способов его извлечения является термическая обработка в вакууме. Для расчета и проектирования аппаратов по переработке сырья необходимы знания физических закономерностей массопереноса и информация о кинетических коэффициентах. При рассмотрении опубликованных исследований газодинамики сублимационных процессов установлена недостаточная изученность диффузии мышьяка. Поэтому нами был проведен расчет эффективного коэффициента диффузии мышьяка через пористый фильтр с экспериментальной проверкой данных. Вычисление коэффициента диффузии проводилось с использованием значений молекулярной диффузии диффундирующего газа, пористости и проницаемости фильтра, а также поправки на стефанов поток. В результате расчетов были получены температурные зависимости коэффициента диффузии пара мышьяка через пористый фильтр при различных остаточных давлениях в системе и крупности засыпки. Установлено, что значения коэффициента диффузии увеличиваются с увеличением крупности зерен фильтра, с понижением давления в системе и повышением температуры. С целью проверки точности рассчитанных данных методом стационарного потока было получено экспериментальное значение коэффициента диффузии пара мышьяка через кварцевую засыпку. На основании проведенной работы сделан вывод о том, что выбранное уравнение вполне пригодно для расчета коэффициента диффузии пара мышьяка через фильтр инертного материала с учетом погрешности, значение которой связано с проведением дополнительных расчетов неизвестных величин при вычислении молекулярной диффузии.

**Ключевые слова:** коэффициент диффузии, мышьяк, кварц, расчет, давление, температура.

**Введение.** Создание новых и совершенствование существующих процессов комплексной переработки минерального и техногенного сырья является основным направлением в развитии металлургической отрасли. Для разработки новых эффективных технологий, определения параметров процесса переработки, расчета и проектирования аппаратуры необходимо иметь данные о физико-химических особенностях тепло- и массопереноса, в том числе о коэффициентах диффузии составляющих паровой фазы.

Мышьяк является одним из примесных элементов, подлежащих первоочередному удалению из металлургического сырья, вследствие его негативного воздействия на технологию и окружающую среду. Однако, несмотря на разнообразие предложенных технологий переработки мышьяк-содержащих материалов [1-3], проблема деарсенации последних полностью не решена.

Признано, что для пирометаллургической переработки сырья, содержащего мышьяк, целесообразна организация предварительной стадии деарсенации материала. Так предварительная термическая обработка материала в серосодержащей и нейтральной атмосфере (аргон), а также в вакууме способствует наиболее полному удалению мышьяка.

В металлургических процессах испарение и возгонка веществ, в том числе мышьяка, обычно происходит из смесей с инертными компонентами, когда лимитирующей стадией процесса часто бывает диффузия летучих компонентов через слой пористых материалов. Несмотря на это, сведений о диффузии мышьяка через фильтр, в частности через кварцевую засыпку, в доступных источниках информации не обнаружено. Основное внимание ученых направлено на описание диффузионных процессов в полупроводниках, например [4-9]. Для металлургической отрасли экспериментальным и расчетным методами был определен только коэффициент диффузии мышьяка в расплаве железа [10].

В связи с вышесказанным нами выполнен расчет эффективного коэффициента диффузии пара мышьяка через пористую среду с экспериментальной проверкой данных.

**Расчетная часть и обсуждение полученных результатов.** Для расчета коэффициента диффузии существует значительное количество теоретических выражений [11, 12], основывающихся на первом (1) и втором (2) законах Фика:

$$I_i = -D_i \text{grad} \bar{C}_i \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = D_i \nabla^2 C_i \quad (2)$$

где  $I_i$  – плотность потока  $i$ -го компонента, моль/( $m^2 \cdot c$ ) или  $kg/(m^2 \cdot c)^1$ ;  $D_i$  – коэффициент диффузии  $i$ -го компонента,  $m^2/c$ ;  $grad \bar{C}_i$  – градиент концентрации  $i$ -го компонента, моль/ $m^4$  или  $kg/m^3/m$ ;  $\nabla^2 = div(grad)$  – оператор Лапласа.

Из ряда уравнений, приведенных в работах [11-14] и удовлетворительно описывающих процесс диффузии одного газа в другом, лучшим по мнению авторов работы [12, 13] является уравнение Чепмена и Энскога (средняя ошибка в расчетах 6-8 %):

$$D = 0,001858 \cdot T^{3/2} \frac{[(M_1 + M_2)/M_1 M_2]^{1/2}}{P \sigma_{12}^2 \Omega_D} \quad (3)$$

где  $D$  – коэффициент диффузии,  $cm^2/c$ ;  $T$  – температура, К;  $M_1, M_2$  – молекулярные массы участвующих веществ;  $P$  – давление, атм;  $\sigma_{12}$  – силовая постоянная Леннарда-Джонса для смеси, Å;  $\Omega_D$  – интеграл столкновений для диффузии.

Ранее проведенный нами сравнительный анализ [15] двух уравнений для расчета коэффициента диффузии в бинарной газовой системе мышьяк-аргон показал, что в сравнении с уравнением Вильке-Ли уравнение Чепмена-Энскога имеет наименьшую погрешность (25,6 %).

Коэффициент диффузии  $D$ , вычисленный по уравнению (3) и называемый «табличный» (таблица 1), описывает диффузию в объеме как одного, так и другого газа. Это объясняется тем, что при взаимной диффузии двух газов через капилляр на концах данного капилляра появляется разность давлений (барометрический эффект). При этом возникает гидродинамический (массовый) поток, который изменяет распределение концентраций газов в капилляре и величины диффузионных потоков газов таким образом, что численное значение коэффициента диффузии первого газа во второй оказывается равным значению коэффициента диффузии второго газа в первый ( $D_{12} = D_{21} = D$ ).

В отсутствие гидродинамического потока, например, когда на концах капилляра поддерживается одинаковое давление, коэффициенты диффузии двух газов не равны друг другу и принимают «истинные» значения ( $D_{1(2)} \neq D_{2(1)}$ ) (таблица 2), которые можно рассчитать по уравнению:

Таблица 1 – Табличные значения коэффициента диффузии мышьяка в аргон ( $D \cdot 10^{-4}$ ,  $m^2/c$ ), найденные по уравнению Чепмена-Энскога [15]

$t, ^\circ C$	Т, К	Р, кПа						
		1,33	2,66	6,66	13,3	26,6	53,2	91,77
200	473	394,76	197,38	78,95	39,48	18,73	9,87	5,72
250	523	477,76	238,88	95,55	47,78	23,89	11,94	6,92
300	573	567,11	283,56	113,42	56,71	28,36	14,18	8,22
350	623	662,52	331,26	132,50	66,25	33,13	16,56	9,6
400	673	763,71	381,85	152,74	76,37	38,19	19,09	11,07
450	723	870,42	435,21	174,08	87,04	43,52	21,76	12,61
500	773	982,46	491,23	196,49	98,25	49,13	24,56	14,24
550	823	1099,62	549,82	219,93	109,96	54,98	27,49	15,94
600	873	1221,79	610,89	244,38	122,18	61,09	30,54	17,71

$$D_{1(2)} = \frac{D(1 + \sqrt{\mu_1/\mu_2})}{2\sqrt{\mu_1/\mu_2}} \quad (4)$$

При диффузии газа через слой инертного пористого материала происходит снижение значения коэффициента диффузии за счет уменьшения сечения для прохода газа и увеличения длины пути газа через извилистые каналы по сравнению с линейным размером пористого тела. Снижение коэффициента диффузии за счет извилистости каналов описывают введением коэффициента извилистости или диффузионной проницаемостью. При этом для расчета коэффициента диффузии используют уравнение вида [16]:

$$D_{\phi} = D \cdot \varepsilon \cdot \Pi, \quad (5)$$

где  $\varepsilon$  – объемная пористость засыпки, %;  $\Pi$  – проницаемость засыпки, %.

Таблица 2 – Истинные значения коэффициента диффузии мышьяка в аргон ( $D \cdot 10^{-4}$ ,  $m^2/c$ )

$t, ^\circ C$	Т, К	Р, кПа						
		1,33	2,66	6,66	13,3	26,6	53,2	91,77
200	473	269,45	134,73	53,89	26,95	12,78	6,74	3,90
250	523	326,11	163,05	65,22	32,61	16,31	8,15	4,72
300	573	387,09	193,55	77,42	38,71	19,36	9,68	5,61
350	623	452,22	226,11	90,44	45,22	22,61	11,30	6,55
400	673	521,29	260,64	104,26	52,13	26,07	13,03	7,56
450	723	594,13	297,06	118,82	59,41	29,71	14,85	8,61
500	773	670,60	335,30	134,12	67,06	33,53	16,76	9,72
550	823	750,57	375,29	150,12	75,06	37,53	18,76	10,88
600	873	833,96	416,98	166,81	83,40	41,70	20,85	12,09

<sup>1</sup> Здесь и далее приведены, а также использованы при расчете единицы измерений, указанные в литературных источниках

Кроме того, извилистые поры создают значительное вязкое сопротивление гидродинамическому потоку газов, торможение которого снижает стефанов перенос, возникающий при диффузии газа к непроницаемой для него поверхности.

Для крупнопористой засыпки такое торможение не будет слишком заметно, поэтому эффективный коэффициент диффузии рассчитывают по формуле с учетом стефанова потока (6), выраженного в виде некоторой поправки. При расчете коэффициента диффузии через мелкопористое тело, в котором имеет место значительное вязкое сопротивление гидродинамическому потоку газов, используется уравнение вида (7).

$$D_{эф} = D \cdot \varepsilon \cdot \Pi \cdot K_C, \quad (6)$$

$$D_{эф} = D_{1(2)} \cdot \varepsilon \cdot \Pi, \quad (7)$$

где  $K_C$  – поправка, учитывающая стефанов поток.

Для расчета поправки на стефанов поток ( $K_C$ ) используют формулу типа (8) [17]. Результаты расчета приведены в таблице 3.

Таблица 3 – Значения  $K_C$  для расчета эффективного коэффициента диффузии мышьяка через пористый фильтр

t, °C	T, K	P, кПа						
		1,33	2,66	6,66	13,3	26,6	53,2	91,77
200	473	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
250	523	1,0005	1,0003	1,0001	1,0001	1,0000	1,0000	1,0000
300	573	1,0062	1,0031	1,0012	1,0006	1,0003	1,0002	1,0001
350	623	1,0522	1,0252	1,0099	1,0049	1,0024	1,0012	1,0007
400	673	1,4775	1,1763	1,0615	1,0295	1,0145	1,0072	1,0041
450	723	–	–	1,4096	1,1576	1,0710	1,0339	1,0193
500	773	–	–	–	3,7015	1,3698	1,1458	1,0779
550	823	–	–	–	–	–	1,9308	1,3289
600	873	–	–	–	–	–	–	–

Как видно из приведенных данных, при некоторых параметрах возможность вычисления поправки отсутствует. В этих условиях давление насыщенного пара мышьяка становится больше остаточного давления в системе, что влечет за собой превышение количества мышьяка над количеством аргона под слоем инертного порошка. Поэтому здесь влияние стефанова потока на скорость реакции сводится к нулю [11].

$$K_C = \frac{P}{P_{II} - P_C} \ln \frac{P - P_C}{P - P_{II}}, \quad (8)$$

где  $P$  – общее давление опыта, Па;  $P_{II}$  – давление паров мышьяка у поверхности испарения, Па;  $P_C$  – давление паров в парогазовой смеси вдали от поверхности испарения, которое принято исчезающе малым, т.е.  $P_C = 0$ .

В качестве модельного инертного пористого тела принят кварцевый порошок различной крупности. Необходимые для расчета коэффициента диффузии значения объемной пористости ( $\varepsilon$ ) и проницаемости ( $\Pi$ ) засыпки (таблица 4) были получены экспериментально по известным методам, исходя из соотношений:

$$\varepsilon = 1 - \rho_H / \rho_C, \quad (9)$$

$$\Pi = 1 / (1 - 0,5 \ln \varepsilon), \quad (10)$$

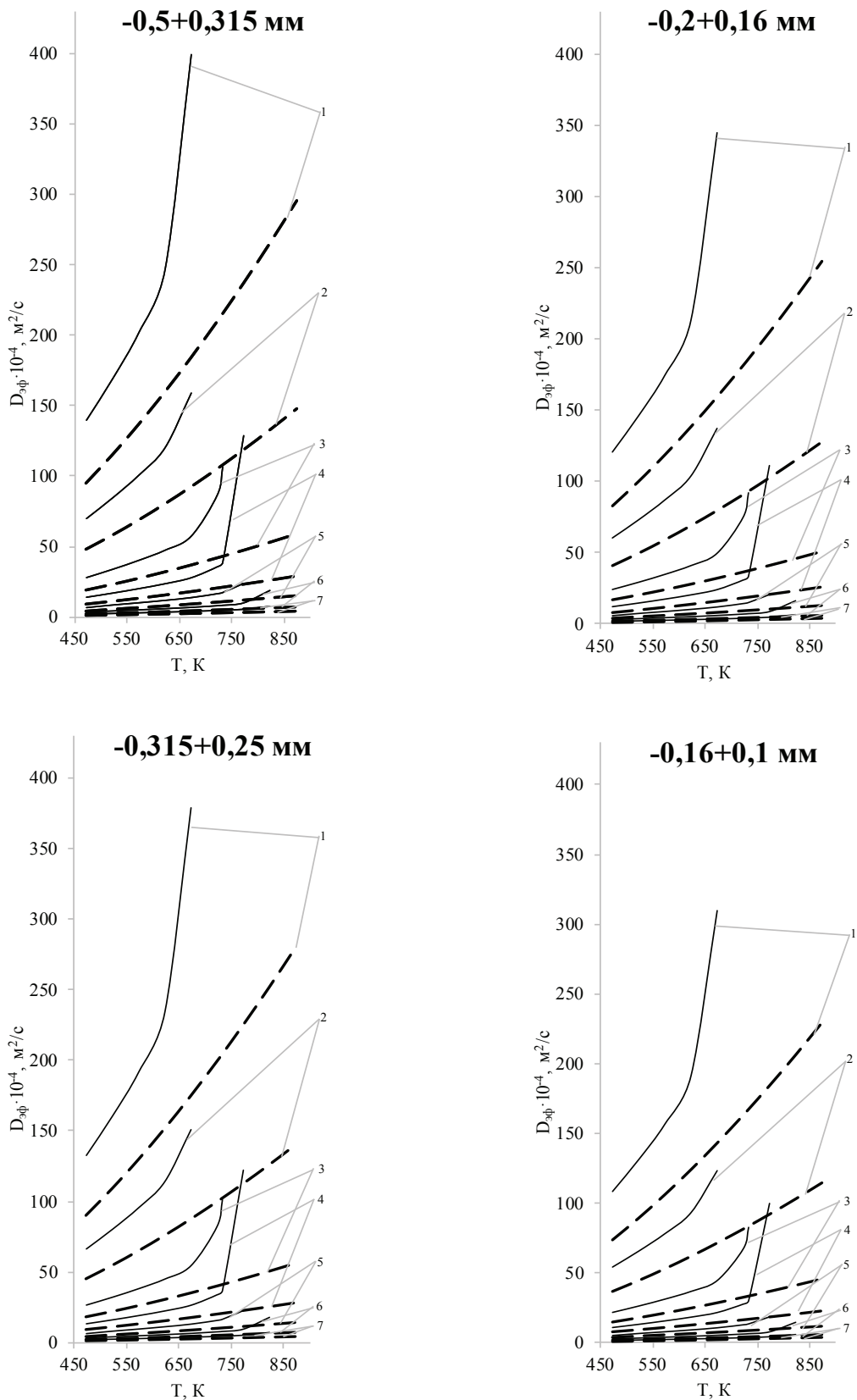
где  $\rho_H$  – насыпная плотность, г/см<sup>3</sup>;  $\rho_C$  – плотность скелета, г/см<sup>3</sup>.

Таблица 4 – Физические характеристики кварцевого порошка различной крупности

Класс крупности кварца, мм	Усредненная крупность кварца, мм	$\varepsilon$ , %	$\Pi$ , %
-0,5+0,316	0,408	0,48259	0,7330
-0,316+0,25	0,283	0,46442	0,7228
-0,2+0,16	0,18	0,43315	0,7051
-0,16+0,1	0,13	0,40015	0,6859

Результаты расчетов эффективного коэффициента диффузии пара мышьяка через пористую среду проиллюстрированы на рисунке (сплошная линия – расчет по уравнению (6), пунктирная – по уравнению (7)). Установлено, что значения коэффициента диффузии увеличиваются с увеличением крупности зерен фильтра, с понижением давления в системе и повышением температуры. Резкий перегиб на кривых зависимости коэффициента диффузии от температуры, полученных при расчете  $D_{эф}$  с учетом стефанова потока, связан с изменением механизма диффузии.

Для проверки полученных данных нами методом стационарного потока получено экспериментальное значение коэффициента диффузии пара



Давление, кПа: 1 – 1,33, 2 – 2,66, 3 – 6,66, 4 – 13,3, 5 – 26,6, 6 – 53,2, 7 – 91,77.

Рисунок – Зависимость коэффициента диффузии мышьяка через пористый фильтр от температуры при различных давлениях в системе и крупности засыпки

мышьяка через кварцевую засыпку при температуре 733 К и давлении 13,3 кПа. Сопоставление экспериментальных и рассчитанных по уравнениям (6) и (7) значений коэффициентов диффузии представлено в таблице 5.

Таблица 5 – Анализ точности выбранных формул при T = 733 К и P = 13,3 кПа

Крупность фильтра, мм	Способ определения коэффициента диффузии As	Коэффициент диффузии As, $D \cdot 10^{-5}, \text{ м}^2/\text{с}$	Погрешность, %
-0,5+0,315	Эксперимент	3,750	–
	Уравнение (6)	3,865	3,067
	Уравнение (7)	2,155	41,268
-0,315+0,25	Эксперимент	3,320	–
	Уравнение (6)	3,668	10,482
	Уравнение (7)	2,045	34,760
-0,2+0,16	Эксперимент	3,010	–
	Уравнение (6)	3,337	10,864
	Уравнение (7)	1,860	34,462
-0,16+0,1	Эксперимент	2,590	–
	Уравнение (6)	2,999	15,792
	Уравнение (7)	1,672	30,617

Как видно из таблицы, наилучшее совпадение экспериментальных данных наблюдается с данными, полученными теоретическим расчетом коэффициента диффузии с учетом стефанова потока. При этом величина погрешности уравнения (6) увеличивается с уменьшением крупности зерен, погрешность же значений коэффициента диффузии, полученных по уравнению (7), уменьшается. Последнее подтверждает вывод об уменьшении влияния стефанова потока на диффузию пара мышьяка через кварцевую засыпку.

**Выводы.** Таким образом, сравнение экспериментальных и расчетных данных (уравнение (6)) свидетельствует об уменьшении эффективного коэффициента диффузии с уменьшением размера зерен кварцевого фильтра (с -0,5+0,315 до -0,16+0,1 мм) за счет сдвига табличного коэффициента диффузии в сторону истинного и снижения влияния стефанова потока. При диффузии пара мышьяка через более мелкую фракцию (< 0,1 мм) влияние стефанова потока будет сведено к нулю, тогда расчет коэффициента диффузии нужно проводить по уравнению (7).

Полученные результаты позволяют сделать вывод о применимости выбранных методик для практических целей с учетом величины ошибки уравнения. Следует отметить, что в случае наличия эмпирически найденных значений силовых постоянных в уравнении (3), величина погрешности не будет превышать 10 %.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Храпунов В.Е., Исакова Р.А. Переработка упорных золотомышьяковых концентратов с применением вакуума. – Алматы: Ғылым, 2002. – 252 с.
- 2 Переработка мышьяксодержащего сырья: обзорная информация. Сер. Горнохимическая промышленность. – М.: НИИТЭХИМ, 1983. – 23 с.
- 3 Шалаева Т.С., Южанин А.В., Мастюгин С.А., Хусаинов Ф.К., Пивоварова Л.С., Кох Н.Л. Гидрометаллургическая хлоридно-щелочная технология переработки медеэлектролитных шламов // Химия и технология халькогенов и халькогенидов: тез. докл. 5 междунар. конф. – Караганда, Казахстан, 1995. – С. 113-114.
- 4 Александров О.В. Моделирование низкотемпературной диффузии мышьяка из сильно легированного слоя кремния // Физика и техника полупроводников. – 2002. – Т. 34, вып. 4. – С. 392-396.
- 5 Демаков К.Д., Старостин В.А., Шемордов С.Г. О диффузии ионов мышьяка и самодиффузии в кремнии при имплантации // Журнал технической физики. – 2002. – Т. 72, вып. 10. – С. 131-133.
- 6 Surech Uppal, J.M. Bonar, Jing Zhang, A.F.W. Willoughby. Arsenic diffusion in Si and strained Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x</sub> alloys at 1000 °C // Materials Science and Engineering. – 2004. – V. 114-115. – P. 349-351.
- 7 Атомная диффузия в полупроводниках / под ред. Д. Шой. – М.: Мир, 1975. – 686 с.
- 8 Джодан М., Челябинский А.Р., Явид В.Ю. Влияние радиационных эффектов на диффузию мышьяка и сурьмы в имплантированном кремнии // Микроэлектроника. – 2012. – Т. 44, № 2. – С. 98-103.
- 9 Рудаков В.М., Овчаров В.В., Лукичев В.Ф., Денисенко Ю.И. Исследование диффузии бора, фосфора и мышьяка в кремнии при отжиге // Микроэлектроника. – 2014. – Т. 43, № 4. – С. 289-295.
- 10 Харлашина О.А., Бендич А.В. Определение диффузии мышьяка в расплаве железа // Вестник Приазовского государственного технического университета. – 2013. – Вып. 26. – С. 9-14.
- 11 Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – М.: Наука, 1987. – 502 с.
- 12 Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.
- 13 Берд Р., Стьюарт В., Лайтфут Е. Явления переноса. – М.: Химия, 1974. – 688 с.
- 14 Варгафтик Н.Б. Справочник по физическим свойствам газов и жидкостей. – М.: Физматгиз, 1963. – 708 с.
- 15 Ниценко А.В. Расчетная оценка коэффициента диффузии пара мышьяка в нейтральной среде // Комплексное использование минерального сырья. – 2015 – № 4. – С. 47-53.
- 16 Куликов И.С., Ростовцев С.Т., Григорьев Э.Н. Физико-химические основы процессов восстановления окислов. – М.: Наука, 1978. – 134 с.
- 17 Ивановский М.Н., Сорокин В.П., Субботин В.Н. Испарение и конденсация металлов. – М.: Атомиздат, 1976. – 216 с.

## REFERENCES

- 1 Khrapunov V.E., Isakova R.A. *Pererabotka upornyh zolotomys'h'yakovyh koncentratov s primeneniem vakuuma* (Stubborn gold-concentrate treatment with a vacuum application). Almaty: Gylym, **2002**. 252 (in Russ.).
- 2 *Pererabotka mysh'yaksoderzhashhego syr'ya: obzornaya informatsiya* (Arsenic-containing raw materials treatment: a background information). Ser. Gornokhimicheskaya promyshlennost'. Moscow: NIITJeHIM, **1983**. 23 (in Russ.).
- 3 Shalaeva T.S., Yuzhanin A.V., Mastuyugin S.A., Khusainov F.K., Pivovarova L.S., Kokh N.L. *Gidrometallurgicheskaya khlordno-shchelochnaya tekhnologiya pererabotki medeehlektrolitnykh shlamov* (Hydrometallurgical chloride-alkaline treatment technology of copper electrolytic slimes). *Khimiya i tekhnologiya hal'kogenov i hal'kogenidov: teziy dokl. 5 Mezhdunar. konf.* (Chemistry and Technology of chalcogenes and chalcogenides: 5 Intern. Conf. Abstracts). Karaganda, Kazakhstan. **1995**, 113-114 (in Russ.).
- 4 Aleksandrov O.V. *Modelirovanie nizkotemperaturnoy diffuzii mysh'yaka iz sil'no legirovannogo sloya kremniya* (Simulation of low-temperature arsenic diffusion from the heavily doped silicon layer). *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Semiconductors physic and technic*. **2002**. 34, 4, 392-396 (in Russ.).
- 5 Demakov K.D., Starostin V.A., Shemordov S.G. *O diffuzii ionov mysh'yaka i samodiffuzii v kremnii pri implantacii* (About arsenic ions diffusion and self-diffusion in silicon by implantation). *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki = Journal of Applied Physic*. **2002**. 72, 10, 131-133 (in Russ.).
- 6 Surech Uppal, J.M. Bonar, Jing Zhang, A.F.W. Willoughby. *Arsenic diffusion in Si and strained SixGe1-x alloys at 1000 °C. Materials Science and Engineering*. **2004**. 114-115, 349-351 (in Eng.).
- 7 *Atomnaya diffuziya v poluprovodnikah* (Atomic diffusion in semiconductors). pod red. (editor) D. Shou. Moscow: Mir, **1975**. 686 (in Russ.).
- 8 Dzhodan M., Chelyadinskij A.R., Javid V.Ju. *Vliyanie radiacionnyh jeffektov na diffuziyu mysh'yaka i sur'my v implantirovannom kremnii* (Influence of radiation effects on the arsenic and antimony diffusion in implanted silicon). *Mikroelektronika = Microelectronics*. **2012**. 44, 2, 98-103 (in Russ.).
- 9 Rudakov V.M., Ovcharov V.V., Lukichev V.F., Denisenko Ju.I. *Issledovanie diffuzii bora, fosfora i mysh'yaka v kremnii pri otzhige* (Investigation of the boron, phosphorus and arsenic diffusion in silicon during annealing). *Mikroelektronika = Microelectronics*. **2014**. 43, 4, 289-295 (in Russ.).
- 10 Harlashina O.A., Bendich A.V. *Opredelenie diffuzii mysh'yaka v rasplave zheleza* (The arsenic diffusion in the iron melt testing). *Vestnik Priazovskogo gosudarstvennogo tehničeskogo universiteta = Bulletin of Pryazov State Technical University*. **2013**. 26, 9-14 (in Russ.).
- 11 Frank-Kameneckij D.A. *Diffuziya i teploperedacha v himicheskoy kinetike* (Diffusion and heat transfer at the chemical kinetic). Moscow: Nauka, **1987**. 502 (in Russ.).
- 12 Rid R., Prausnic Dzh., Shervud T. *Svoystva gazov i zhidkostej* (The properties of gases and liquids). Leningrad: Khimiya, **1982**. 592 (in Russ.).
- 13 Berd R., St'juart V., Lajftut E. *Yavleniya perenosa* (Transport effect). Moscow: Khimiya, **1974**. 688 (in Russ.).
- 14 Vargaftik N.B. *Spravochnik po fizicheskim svoystvam gazov i zhidkostej* (Physical properties of gases and liquids reference book). Moscow: Fizmatgiz, **1963**. 708 (in Russ.).
- 15 Nitsenko A.V. *Raschetnaya ocenka koeficienta diffuzii para mysh'yaka v nejtral'noj srede* (Calculation of the diffusion coefficient of arsenic vapor in an inert medium). *Kompleksnoe ispol'zovanie mineral'nogo syr'ya = Complex Use of Mineral Resources*. **2015**. 4, 47-53 (in Russ.).
- 16 Kulikov I.S., Rostovcev S.T., Grigor'ev Je.N. *Fiziko-khimicheskie osnovy protsessov vosstanovleniya okislov* (Physicochemical basics of oxides reduction processes). Moscow: Nauka, **1978**. 134 (in Russ.).
- 17 Ivanovskij M.N., Sorokin V.P., Subbotin V.N. *Isparenie i kondensatsiya metallov* (Evaporation and condensation of metals). Moscow: Atomizdat, **1976**. 216 (in Russ.).

## ТҮЙІНДЕМЕ

Мышьяк қоспалы элементтердің бірі болып келеді, ол металлургиялық шикізаттан алдын ала жоюды талап етеді, өйткені оның бар болғаны технология мен қоршаған ортаға теріс әсер етеді. Оны бөліп алудың әсерлі әдістерінің бірі вакуумда термиялық қайта өңдеу болып табылады. Шикізатты қайта өңдейтін аппаратты жобалау және есептеу үшін масса алмасудың физикалық заңдылықтары жайлы білімі және кинетикалық коэффициенттері жайлы мағлұматтары болу қажет. Сублимациялық үрдістердің газодинамика зерттеулерінің баспаға шыққандарын қарай отырып барлық айтылған орталардағы мышьяк диффузиясының жеткіліксіз зерттелген деген шешімге келдік. Осыған байланысты эксперименттік мәліметтерді тексере отырып кеуекті фильтр арқылы мышьяқты тиімді диффузиялау коэффициентін есептеу жүргізілді. Диффузия коэффициентін анықтау молекулалық диффузияда өтетін газдардың, кеуектіліктің және фильтрдің өткізгіштігінің мәндерін қолданумен, сонымен қоса стефан ағынына қарай түзету арқылы жүргізіледі. Есептеулердің нәтижесінің арқасында төгудің ірілігі мен жүйедегі әр түрлі қалған қысымдарда кеуекті фильтр арқылы мышьяк буының диффузия коэффициентінің температуралық тәуелділіктері алынды. Фильтрдегі түйіршіктерінің ірілігі үлкейген сайын, жүйедегі қысымның төмендегенде және температураның көтерілуімен диффузия коэффициентінің мәні үлкейетіндігі анықталған. Стационарлы ағымдағы әдіспен есептелген мәліметтердің дәлдігін тексеру мақсатында кварцты төгу арқылы мышьяк буларының диффузия коэффициентінің сынақтық мәні алынды. Атқарылған жұмысқа негізделе отырып, мынадай тұжырымға келдік, таңдалған теңдеу қателіктерді игере отырып толығымен инертті материалдан тұратын фильтр арқылы мышьяк буларының диффузия коэффициенттерін есептеуге жарамды, молекулалық диффузиясын анықтағанда белгісіз өлшемдерге қосымша есептеулер жүргізуге байланысты мән берілді.

**Түйінді сөздер:** диффузия коэффициент, мышьяк, кварц, есептеу, қысым, температура.

## SUMMARY

Arsenic is one of the admixture elements subject to prior removal out of metallurgical raw materials. It is connected with its negative effect on the technology and the environment. One of the most effective ways to its extract is a thermal treatment in vacuum. It is necessary to have knowledge of the physical laws of mass transfer and information about the kinetic coefficients for calculation and design of apparatus for raw materials processing. In inspection of the published papers about gas dynamics of sublimation processes was ascertained lack of information about arsenic diffusion. Therefore, we carried out a calculation of arsenic effective diffusion coefficient through a porous filter with experimental data verification. The calculation of diffusion coefficient was done through the use values of diffusing gas molecular diffusion, porosity, filter permeability, also Stephan-stream amendment. Temperature dependence of the arsenic vapor diffusion coefficient through porous filter at various residual pressure in system and filling fineness were obtained as a result of the calculation. It was ascertained that the value of the diffusion coefficient increases with fineness of filter grain increase, system pressure decreasing and temperature increasing. Experimental value of the arsenic vapor diffusion coefficient through quartz filling was obtained by steady flow for the purpose of accuracy check of the calculated data. Based on the conducted work it concluded that the selected equation is quite suitable for the calculation of the diffusion coefficient of arsenic vapor through a filter from inert material with a glance of error. Value of error is connected with the carrying out additional calculations of unknown quantities during calculation of molecular diffusion.

**Key words:** diffusion coefficient, arsenic, quartz, calculation, pressure, temperature.

*Поступила 20.04.2016*