

А. В. НИЦЕНКО

*АО "Центр наук о Земле, металлургии и обогащения", Алматы,
alina_nitsenko@gmail.com*

РАСЧЕТНАЯ ОЦЕНКА КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ПАРА МЫШЬЯКА В НЕЙТРАЛЬНОЙ СРЕДЕ

Мышьяк – один 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 в тех или иных средах. Поэтому нами выбран наиболее приемлемый для практического использования метод расчета коэффициента диффузии мышьяка в аргоне с экспериментальной проверкой данных. Для расчета коэффициента диффузии пара мышьяка в аргоне выбраны два метода: Чепмена – Энскога и Вильке – Ли, позволяющие получить достаточно достоверные данные при небольшом количестве допущений и приближенных расчетов неизвестных параметров. В результате расчета по выбранным уравнениям были получены близкие между собой данные. Это позволяет полагать, что выбранные уравнения дают объективные результаты и они вполне пригодны для расчета коэффициента диффузии в условиях низкого вакуума (до 3,3 кПа). Установлено, что значение коэффициента диффузии пара мышьяка в аргоне увеличивается с повышением температуры и понижением давления. С целью проверки точности рассчитанных данных методом стационарного потока было получено экспериментальное значение коэффициента диффузии пара мышьяка в аргоне. На основании проведенной работы сделан вывод о том, что выбранные уравнения вполне пригодны для расчета коэффициента диффузии пара мышьяка в аргоне с учетом погрешности, большое значение которой связано с проведением дополнительных расчетов неизвестных величин.

Ключевые слова: коэффициент диффузии, мышьяк, аргон, расчетные данные, давление, температура.

Введение. Разработка новых и совершенствование существующих процессов комплексной переработки минерального и техногенного сырья являются основными направлениями в развитии металлургической отрасли. Для создания 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 удалению из металлургического сырья вследствие его негативного воздействия на технологию и окружающую среду. Однако, несмотря на разнообразие предложенных технологий переработки мышьяксодержащих материалов [1-3], проблема деарсенации последних полностью не решена.

Признано, что для пирометаллургической переработки сырья, содержащего мышьяк, целесообразна организация предварительной ста-

дии деарсенации материала. Так, предварительная термическая обработка материала в серусодержащей и нейтральной атмосферах (аргон), а также в вакууме способствует наиболее полному удалению мышьяка.

При рассмотрении опубликованных исследований газодинамики сублимационных процессов установлена недостаточная изученность диффузии мышьяка в тех или иных средах. Основное внимание направлено на описание диффузионных процессов в полупроводниках [4-9]. Для металлургической отрасли экспериментальным и расчетным методами был определен коэффициент диффузии мышьяка только в расплаве железа [10]. Сведений о диффузии мышьяка в газовых средах, в частности в аргоне, в доступных источниках информации не обнаружено.

В этой связи нами выполнен выбор наиболее приемлемого для практического использования метода расчета коэффициента диффузии мышьяка в аргоне с экспериментальной проверкой данных.

Расчетная часть и обсуждение 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/(м²·с) или кг/(м²·с)*;

D_i – коэффициент диффузии i -го компонента, м²/с;

$\text{grad} \bar{C}_i$ – градиент концентрации i -го компонента, моль/м⁴ или (кг/м³/м);

$\nabla^2 = \text{div}(\text{grad})$ – оператор Лапласа.

Из ряда уравнений [11-14], удовлетворительно описывающих процесс в тех или иных условиях, для расчета коэффициента диффузии смеси мышьяка в аргоне нами были выбраны два метода, позволяющие получить достаточно достоверные данные при небольшом количестве допущений и приближенных расчетов неизвестных параметров.

Одним из них является метод Чепмена и Энскога с расчетом по формуле:

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

где D_{12} – коэффициент диффузии, см²/с;

T – температура, К;

M_1, M_2 – молекулярные массы участвующих веществ;

P – давление, атм;

σ_{12} – силовая постоянная Леннарда – Джонса для смеси, Å;

Ω – интеграл столкновений для диффузии.

Авторы [12, 13] считают, что выражение (3) является лучшим из имеющихся, при средней ошибке в расчетах 6-8 %.

Небольшое расхождение с экспериментальными данными (4-7 %) было получено после расчета коэффициента диффузии и по методу Вильке и Ли [12, 13], где указанные авторы предложили постоянную 0,001858 в уравнении (3) заменить на выражение

$$0,00214 - 0,000492 [(M_1 + M_2)/M_1 M_2]^{1/2}$$

* Здесь и далее приведены, а также использованы при расчете единицы измерений, указанные в литературных источниках.

Тогда уравнение Чепмена – Энскога принимает вид:

$$D_{12} = \left[0,00214 - 0,000492 \left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \right)^{1/2} \right] \cdot \left[T^{3/2} \frac{[(M_1 + M_2)/M_1 M_2]^{1/2}}{P \sigma_{12}^2 \Omega_D} \right] \quad (4)$$

Для многих веществ значения интеграла столкновений и силовых постоянных табулированы, часть из которых приведена в [15]. Однако мышьяк является одним из малоизученных веществ, поэтому отсутствующее в литературе значение силовой постоянной для него было определено, исходя из следующих соображений:

$$\sigma_{12} = \frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_2) \quad (5)$$

$$\sigma = \frac{5}{6} \cdot V_c^{1/3} \quad (6)$$

где σ_1, σ_2 – постоянные Леннарда – Джонса для участвующих веществ, Å;

$V_c = (0,377 P_{ch} + 11,0)^{1,25}$ – критический удельный объем, см³/моль [16];

P_{ch} – парахор (для мышьяка взят из [17]).

Для определения интеграла столкновений, зависящего от соотношения kT/ε_{12} , удобно использовать справочные данные, приведенные в [12]. При этом значение Ω_D при указанной температуре находится по наиболее близкой величине соотношения kT/ε_{12} , которую можно рассчитать на основании следующих выражений:

$$\varepsilon_{12}/k = [(\varepsilon_1/k)(\varepsilon_2/k)]^{1/2}, \quad (7)$$

$$\varepsilon/k = 1,21 T_b, \quad (8)$$

где T_b – нормальная температура кипения, К.

Согласно [11] можно получить более точное значение для указанной температуры, если воспользоваться уравнением, предложенным Нойфельдом:

$$\Omega_D = \left(\frac{A}{T^*} \right) + \left(\frac{C}{\exp DT^*} \right) + \left(\frac{E}{\exp FT^*} \right) + \left(\frac{G}{\exp HT^*} \right), \quad (9)$$

где $T^* = kT/\varepsilon_{12}$;

$$A = 1,06036; \quad E = 1,03587;$$

$$B = 0,16510; \quad F = 1,52996;$$

$$C = 0,19300; \quad G = 1,76474;$$

$$D = 0,47635; \quad H = 1,89411.$$

При сравнении справочных и рассчитанных по уравнению (9) данных (таблица 1) видно, что полученные значения интеграла столкновений близки, расхождение составляет 0,001-0,006 единиц.

Таблица 1 – Значения интеграла столкновений для некоторых температур

T, K			
		рассчитанный по уравнению (9)	справочные данные
473	1,506	1,197	1,198
523	1,665	1,150	1,153
573	1,824	1,111	1,116
623	1,983	1,079	1,075
673	2,143	1,051	1,057
723	2,302	1,026	1,026
773	2,461	1,005	0,9996
823	2,620	0,987	0,9878
873	2,779	0,970	0,9672

В данной работе использованы рассчитанные данные, что объясняется приоритетом точности.

Таким образом, для расчета коэффициента диффузии пара мышьяка в аргоне использованы как известные справочные данные, так и величины, требующие дополнительных расчетов ввиду отсутствия эмпирически полученных значений (таблица 2).

Анализ результатов проведенных расчетов (таблица 3) показал, что по выбранным нами уравнениям получены близкие между собой данные. При их сравнении видно, что разница в численных значениях тем больше, чем меньше давление и выше температура. Так, при температуре 873 К и давлении 1,33 кПа разница составляет 130,94 ед., а при 473 К и 91,77 кПа – 0,61 ед. Это дает основание полагать, что уравнения (3) и (4) дают объективные результаты и они вполне пригодны для расчета коэффициента диффузии в условиях низкого вакуума (до ~ 3,3 кПа).

Также установлено, что значение коэффициента диффузии пара мышьяка в аргоне увеличивается с повышением температуры и понижением давления.

С целью проверки точности рассчитанных данных нами методом стационарного потока получено экспериментальное значение коэффициента диффузии пара мышьяка в аргоне при

Таблица 2 – Величины, используемые при расчете коэффициента диффузии пара мышьяка в аргоне, и их значения

Величина	Размерность	Обозначение	Элемент	Используемое значение
Молекулярная масса	а.е.м.	M_1	As	299,68*
		M_2	Ar	39,95
Силовая постоянная Леннарда – Джонса	Å	σ_{12}	As+Ar	4,55
		σ_1	As	5,49
		σ_2	Ar	3,60
Критический удельный объем	см ³ /моль	V_c	As	286,60
Парахор	эрг ^{1/4} ·см ^{5/2}	P_{2h}	As	216,00*
Интеграл столкновений	–	Ω_D	As+Ar	**
Отношение постоянной сил к постоянной Больцмана		ε_{12}/k	As+Ar	314,115
		ε_1/k	As	1057,54
		ε_2/k	Ar	93,300
Нормальная температура кипения	К	T_b	As	874,000

* Молекулярная масса атома мышьяка равна 74,92 а.е.м. Парахор для атома мышьяка равен 54 эрг^{1/4}·см^{5/2}. В связи с тем, что в интересующем нас интервале температур пар мышьяка представлен молекулами As₂, то указанные величины для молекулы мышьяка будут соответствовать значениям 299,68 а.е.м. и 216 эрг^{1/4}·см^{5/2} соответственно

** Интеграл столкновений с учетом необходимой температуры взят из таблицы 1.

температуре 733 К и давлении 13,3 кПа. Сопоставление экспериментальных и рассчитанных по уравнениям (3) и (4) значений коэффициентов диффузии представлено в таблице 4.

Как видно, погрешность в расчетах относительно экспериментального значения велика, но для уравнения Чепмена – Энскога она находится в пределах максимальной ошибки (20-35 %), а погрешность уравнения Вильке – Ли не на много больше нее [11]. Такая величина погрешности связана с тем, что при расчетах взяты приближенные значения и полученные с учетом других рассчитанных параметров.

Таблица 3 – Коэффициент диффузии мышьяка в аргоне ($D \cdot 10^{-4}$, $\text{м}^2/\text{с}$), рассчитанный по уравнениям (3) и (4)

t, °C	T, K	Р, кПа													
		1,33		2,66		6,66		13,3		26,6		53,2		91,77	
		рассчитано по уравнению													
		(3)	(4)	(3)	(4)	(3)	(4)	(3)	(4)	(3)	(4)	(3)	(4)	(3)	(4)
200	473	394,76	437,08	197,38	218,54	78,95	87,42	39,48	43,71	18,73	21,85	9,87	10,93	5,72	6,33
250	523	477,76	528,96	238,88	264,48	95,55	105,79	47,78	52,90	23,89	26,45	11,94	13,22	6,92	7,67
300	573	567,11	627,90	283,56	313,95	113,42	125,58	56,71	62,79	28,36	31,39	14,18	15,7	8,22	9,10
350	623	662,52	733,53	331,26	366,77	132,50	146,71	66,25	73,35	33,13	36,68	16,56	18,34	9,60	10,63
400	673	763,71	845,56	381,85	422,78	152,74	169,11	76,37	84,56	38,19	42,28	19,09	21,14	11,07	12,25
450	723	870,42	963,71	435,21	481,86	174,08	192,74	87,04	96,37	43,52	48,19	21,76	24,09	12,61	13,97
500	773	982,46	1087,75	491,23	543,88	196,49	217,55	98,25	108,78	49,13	54,39	24,56	27,19	14,24	15,76
550	823	1099,62	1217,49	549,82	608,74	219,93	243,50	109,96	121,75	54,98	60,87	27,49	30,44	15,94	17,65
600	873	1221,79	1352,73	610,89	676,37	244,38	270,55	122,18	135,27	61,09	67,64	30,54	33,82	17,71	19,60

Таблица 4 – Анализ точности выбранных формул при $T = 733 \text{ K}$ и $P = 13,3 \text{ кПа}$

Способ определения коэф. диффузии As	Коэффициент диффузии As, $D \cdot 10^{-5}, \text{ м}^2/\text{с}$	Погрешность, %
Эксперимент	7,1	–
Уравнение (3)	8,92	25,6
Уравнение (4)	9,89	39,2

Выводы. Таким образом, в результате проведенной работы получено удовлетворительное совпадение экспериментального и расчетных значений коэффициента диффузии пара мышьяка в аргоне, что позволяет говорить о применимости выбранных методик для практических целей с учетом величины ошибки уравнения. При этом лучше использовать формулу Чепмена – Энскога ввиду меньшего значения погрешности.

Следует отметить, что в случае наличия эмпирически найденных значений силовых постоянных в уравнениях (3) и (4) величина погрешности не должна превышать 10 %.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Храпунов В.Е., Исакова Р.А. Переработка упорных золотомышьяковых концентратов с применением вакуума. – Алматы: Ғылым, 2002. – 252 с.
- 2 Переработка мышьякосодержащего сырья: обзорная информация. Сер. Горнохимическая промышленность. – М.: НИИТЭХИМ, 1983. – 23 с.
- 3 Шалаева Т.С., Южанин А.В., Мاستюгин С.А., Хусаинов Ф.К., Пивоварова Л.С., Кох Н.Л. Гидрометаллургическая хлоридно-щелочная технология переработки медеелектролитных шламов // Химия и технология халькогенов и халькогенидов: матер. 5 Междунар. конф. – Караганда, 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 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys at 1000 °C // Materials Science and Engineering. – 2004. – V. 114-115. – P. 349-351.
- 7 Атомная диффузия в полупроводниках / Под ред. Д.Шоу. – М.: Мир, 1975. – 686 с.
- 8 Джодан М., Челядинский 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 Бертшнайдер С. Свойства газов и жидкостей. – М.-Л.: Химия, 1966. – 536 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 Саттерфилд Ч.Н. Массопередача в гетерогенном катализе. – М.: Химия, 1976. – 204 с.

16 Краткий справочник физико-химических величин / Под ред. К.П.Мищенко, А.А.Равдель. – Л.: Химия, 1972. – 200 с.

17 Справочник химика: Общие сведения. Строение вещества. Свойства важнейших веществ. Лабораторная техника / Гл. ред. Б.П.Никольский – М.-Л.: Химия, 1966. – Изд. 2-е. – Т. 1. – 1071 с.

REFERENCES

- 1 Khrapunov V.E., Isakova R.A. *Pererabotka upornykh zolotomys'h'yakovykh kontsentrato'v s primeneniem vakuuma* (Stubborn gold-concentrate treatment with a vacuum application). Almaty: Gylym, 2002. 252 (in Russ.).
- 2 *Pererabotka mysh'yaksoderzhashchego syr'ya: obzornaya informatsiya. Ser. Gornokhimicheskaya promyshlennost'* (Arsenic-containing raw materials treatment: survey information. Series Mining and Chemical Industry). Moscow: NIITEKhIM, 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* (Hydro-metallurgical chloride-alkaline treatment technology of copper electrolytic slimes). *Khimiya i tekhnologiya khal'kogenov i khal'kogenidov: mater. 5 Mezhdunar. Conf.* (Chemistry and technology of chalcogenes and chalcogenides: proceedings of 5-th Intern. Conf). Karaganda, 1995, 113-114 (in Russ.).
- 4 Aleksandrov O.V. *Modelirovanie nizkotemperaturnoj 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 physics 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*

implantatsii (On the 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, Bonar J.M., Zhang Jing, Willoughby A.F.W. Arsenic diffusion in Si and strained Si_xGe_{1-x} alloys at 1000 °C. *Materials Science and Engineering.* **2004.** 114-115. 349-351 (in Eng.).

7 Atomnaya diffuziya v poluprovodnikakh (Atomic diffusion in semiconductors). Under the editorship of D. Shou. Moscow: Mir, **1975.** 686 (in Russ.).

8 Dzhodan M., Chelyadinskij A.R., Yavid V.Yu. Vliyaniye radiatsionnykh ehffektov 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 Yu.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 Kharlashina O.A., Bendich A.V. Opreделение diffuzii mysh'yaka v rasplave zheleza (Testing of the arsenic diffusion in the iron melt). *Vestnik Priazovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta* = *Bulletin of Pryazovsk State Technical University.* **2013.**

26, 9-14 (in Russ.).

11 Bertshnajder S. *Svoystva gazov i zhidkostej* (The properties of gases and liquids). Moscow-Leningrad: Khimiya, **1966.** 536 (in Russ.).

12 Rid R., Prausnits Dzh., Shervud T. *Svoystva gazov i zhidkostej* (The properties of gases and liquids). Leningrad: Khimiya, **1982.** 592 (in Russ.).

13 Berd R., St'yuart V., Lajftut E. *Yavleniya perenosov* (Transport effects). Moscow: Khimiya, **1974.** 688 (in Russ.).

14 Vargaftik N.B. *Spravochnik po fizicheskim svoystvam gazov i zhidkostej* (Reference book on physical properties of gases and liquids). Moscow: Fizmatgiz, **1963.** 708 (in Russ.).

15 Satterfild Ch.N. *Massoperedacha v geterogennom katalize* (Mass transfer in heterogeneous catalysis). Moscow: Khimiya, **1976.** 204 (in Russ.).

16 *Kratkij spravochnik fiziko-khimicheskikh velichin* (Brief reference book of physicochemical quantities). Under the editorship of K.P. Mishchenko, A.A. Ravdel'. Leningrad: Khimiya, **1972.** 200 (in Russ.).

17 *Spravochnik khimika: Obshchie svedeniya. Stroenie veshchestva. Svoystva vazhnejshikh veshchestv. Laboratornaya tekhnika* (Chemist reference book: Overview. Materials structure. Important compounds properties. Lab. equipment). Editor-in-chief B.P. Nikol'skij. Moscow-Leningrad: Khimiya, **1966.** 1. 1071 (in Russ.).

ТҮЙІНДЕМЕ

Мышыяқ *оспалаы 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 мышыяқ диффузиясының жеткіліксіз зерттелген деген шешімге келдік. Осыған байланысты бізбен ерекше оңтайлы таңдау жасалды, ол сынақты мәліметтерді тексеру мен бірге аргонда мышыяқ диффузия коэффициентін есептеу әдісін практикалық түрде қолдануға оңтайлы. Аргонда мышыяқ буларының диффузия коэффициенттерін есептеу үшін екі әдіс таңдалды: Чипмен-Энског пен Вильке-Ли, ол белгісіз параметрлерде болжамды есептеулер мен шамалы мөлшерде қолдана отырып, сенімділігі жеткілікті мәліметтер алуға мүмкіндік береді. Таңдалған теңдеулер арқылы есептеулер нәтижесінде екеу ара бір-біріне ұқсас мәліметтер алынды. Осыған қарап таңдалған теңдеулер объективті нәтижелер беретіндігіне сенуге және олар 3,3 кПа-ға дейін вакуумдық жағдайда диффузия коэффициентін есептеуге толықтай жарамды. Температураның көтерілуімен және қысымның төмендеуімен аргондағы мышыяқ буларының диффузия коэффициентінің мәнінің жоғарылайтындығы анықталған. Стационарлы ағымдағы әдіспен есептелген мәліметтердің дәлдігін тексеру мақсатында аргондағы мышыяқ буларының диффузия коэффициентінің сынақтық мәні алынды. Атқарылған жұмысқа негізделі отырып, мынадай тұжырымға келдік, таңдалған теңдеу қателіктерді игере отырып толығымен аргонда мышыяқ буларының диффузия коэффициенттерін есептеуге жарамды, белгісіз өлшемдерге қосымша есептеулер жүргізуге байланысты үлкен мән берілді.

Түйінді сөздер: диффузия коэффициент, мышыяқ, аргон, есептеу, қысым, температура.

SUMMARY

Arsenic is one of the admixture elements subjected to prior removal from 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 know the physical laws of mass transfer and information about the kinetic coefficients for the calculation and design of apparatus for raw materials process-

ing. Lack of information about arsenic diffusion in different mediums was ascertained at inspection of the published papers about gas dynamics of sublimation processes. Therefore, we choose the most acceptable method for the calculation of arsenic diffusion coefficient in argon for the practical use with experimental check of data. Two ways of the calculation of diffusion coefficient of arsenic vapor in argon were selected: Chapman-Enskij and Wilke-Lee. They allow receiving quite reliable data with a small amount of assumptions and approximate calculations of unknown parameters. As a result close values of data were obtained at the calculation by the selected equations. It lets to suppose that the selected equations give objective results, and they are quite suitable for calculation of the diffusion coefficient in a low vacuum (up to ~3,3 kPa). It was ascertained that the value of the diffusion coefficient of arsenic vapor in argon increases with increasing temperature and decreasing pressure. Experimental value of the diffusion coefficient of arsenic vapor in argon was obtained by method of steady flow for the check of accuracy of the calculated data. On the basis of the conducted work it is concluded that the selected equations are quite suitable for the calculation of the diffusion coefficient of arsenic vapor in argon adjusted for error. Great value of the error is connected with the carrying out additional calculations of unknown quantities.

Key words: diffusion coefficient, arsenic, argon, calculation, pressure, temperature.

Поступила 02.10.2015.