



## Особенности структурообразования вблизи реакционного фронта в системе несмешивающихся растворов кислоты и основания<sup>1</sup>

Уточкин В.Ю.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь

Исследование взаимосвязи химических реакций и конвективного движения жидкости мотивируется двумя глобальными причинами. Первой причиной служит бурное развитие представлений о самоорганизации в сложных нелинейных системах, начавшееся в середине прошлого столетия. Технологические приложения обеспечивают вторую важную мотивацию. Локально воздействуя на концентрационные и температурные поля, реакция способна не только инициировать макроскопическое движение, но и осложнять его динамику более тонкими эффектами. Область применения данных эффектов включает технологические процессы хемосорбции при захвате CO<sub>2</sub> в почве, нефтедобычу и нефтепереработку, сепарацию руд. В качестве отдельной перспективной отрасли можно выделить химические микрореакторы проточного типа, где отыскание оптимального способа перемешивания реагирующих компонентов является ключевой проблемой.

Структурообразование вблизи реакционного

фронта в двухслойной системе несмешивающихся растворов подробно изучались в работах [1, 2]. Найденные режимы неустойчивости были обусловлены формированием в среде плотностных потенциальных ям, проявляющих себя локально. Это подчеркивает, что реакция является локализованным механизмом преобразования плотности среды, что совершенно не свойственно, например, классической тепловой конвекции, возникающей под действием внешнего нагрева жидкости.

В настоящей работе исследуется хемоконвективное движение, вызванное протеканием реакции нейтрализации в вертикально-ориентированной ячейке Хеле–Шоу. В начальный момент времени полость заполнена однородным водным раствором щелочи, который находится в состоянии механического равновесия. На верхней границе ячейки задается фиксированное значение концентрации кислоты (Рис. 1). Через некоторое время после приведения реагентов в контакт система приобретает неустойчивую стратификацию по плотности, что приводит к возбуждению макроскопического движения. Предлагаемая математическая модель данного явления включает в себя уравнения движения жидкости в приближениях Буссинеска и Хеле–Шоу, а также уравнения реакции — диффузии. В

<sup>1</sup>Исследование финансово поддержано Российским Научным Фондом (грант № 19-11-00133).

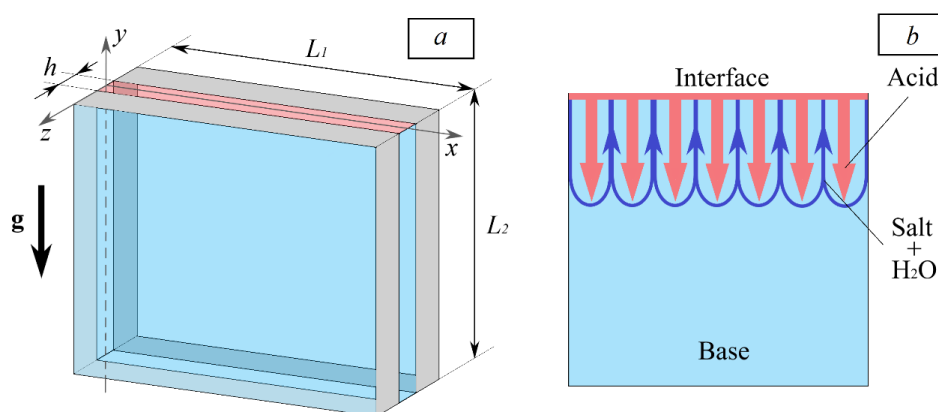


Рис. 1. Схематическое изображение ячейки Хеле-Шоу в координатах  $\{x, y, z\}$  (a), и конфигурации реагентов и продукта реакции в процессе эволюции течения (b)

используемом подходе учитывается не только расход кислоты и основания, но и производство растворителя, что впервые позволило объяснить возникновение регулярной системы вихрей, ранее наблюдавшейся экспериментально.

Проведено формальное параметрическое исследование системы при изменении безразмерного параметра, отвечающего за интенсивность производства воды. Показано, что при некотором критическом значении параметра в системе наблюдается переход от стандартной неустойчивости Рэлея-Тейлора к упорядоченной хемоконвекции. Картина течения представляет собой единую систему пальчиковых структур, чьи кончики выровнены вдоль горизонтальной линии (Рис. 2, а). Нижняя граница вихрей равномерно движется вниз. При этом вместо обычного огрубления структуры, наблюдается рост аспектного отношения вихрей, достигающего нескольких десятков. Изучена эволюция длины

волны конвективной структуры, а также динамика ее нижней границы. Сложные перестройки фронта реакции, которые включают процессы рождения и слияния плевмов, иллюстрируются с помощью пространственно-временных диаграмм (Рис. 2, б). Отмечается, что волновое число вихревой структуры постепенно выходит к асимптотическому значению близкому к единице. Ведущую роль в сохранении квази-постоянного значения длины волны играет процесс вторичной неустойчивости реакционного фронта.

## Список литературы

- [1] Bratsun D., Mizev A., Utochkin V., Nekrasov S., Shmyrova A. Nonlinear development of convective patterns driven by a neutralization reaction in immiscible two-layer systems. // *Phil. Trans. R. Soc. A*, 2023. DOI: 10.1098/rsta.2022.0178
- [2] Utochkin V., Bratsun D. Spontaneous Ordering of Chemoconvective Fingering Near an Interface in a Reacting Solution. // *Interfac. Phenom. Heat Transfer*, 2022. DOI: 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2022046303

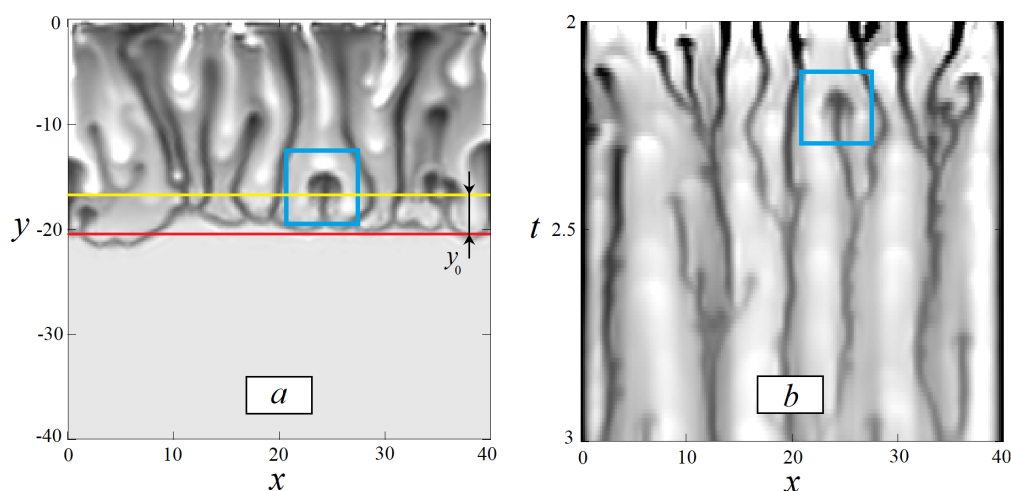


Рис. 2. Пространственное распределение плотности  $\rho(x, y)$  в заданный момент времени (a), и пространственно-временная диаграмма  $\rho(x, t)$  для фиксированного на реакционном фронте значения вертикальной координаты (b)