

И. А. Гарькина, А. М. Данилов (Пенза, ПГУАС). **Математическое моделирование свойств материалов: флокуляция и седиментация дисперсных систем.**

Изучается механизм флокуляции как результат взаимодействия между структурообразующими элементами; производится математическое моделирование флокулообразования и седиментации в дисперсных системах. Актуальность исследований определяется возможностью целенаправленного изменения свойств композитов: образующиеся при эволюции дисперсно наполненных материалов флокулы (также называемые кластерами) оказывают значительное влияние как на реологические свойства смесей, так и на эксплуатационные свойства композитов.

Моделирование основывается на моделях парного взаимодействия. Эволюция описывается системой уравнений $m_i \ddot{\mathbf{r}}_i - k_i (\dot{\mathbf{r}}_i - \mathbf{v}_i) = -\nabla U_i$, $i = 1, 2, \dots, N$, где: m_i — масса i -й частицы; x_i, y_i, z_i — ее координаты; $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$; k — коэффициент, характеризующий диссипативные свойства дисперсионной среды; \mathbf{v}_i, U_i — скорость и потенциал дисперсионной среды в точке (x_i, y_i, z_i) . Потенциал определяется характером межфазного взаимодействия.

На основе численного эксперимента с использованием разработанного комплекса программ определяются условия флокуляции и седиментационной устойчивости композиции с полидисперсным наполнителем. Для повышения вычислительной эффективности при моделировании используется специально разработанное автономное программное обеспечение, позволяющее осуществить визуализацию конфигураций и динамику частиц (см. рис).

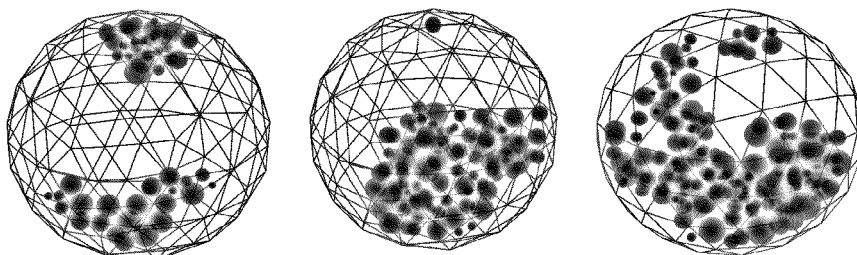


Рис. Некоторые установившиеся конфигурации систем

Показывается, что на однородность установившейся конфигурации и седиментационную устойчивость полидисперсной системы наибольшее влияние оказывает объемная степень наполнения. При достижении предельной объемной доли дисперсной фазы ($v_f = 0,16$) разделения системы на изолированные подобласти не происходит. Образование флокул возможно только для частиц, у которых линейные размеры и межчастичное расстояние сопоставимы с величиной

$$h_{c \max} = \frac{\sigma_w \cos \theta}{RT} \frac{M}{\rho_m},$$

где σ_m — поверхностное натяжение матричного материала, θ — краевой угол смачивания, ρ_m, M — плотность и молекулярная масса вяжущего, RT — тепловая энергия одного моля вяжущего.

Результаты исследований прошли апробацию при создании не имеющих мировых аналогов материалов для защиты от ионизирующего излучения, обладающих уникальными характеристиками и конкурентоспособных на рынке защитных материалов.

Работа выполнена по заказу Минобрнауки РФ, № гос. рег. 01200850940.