Приветсвие

Здравствуйте, я Крайнов Илья, В связи с этим тема моего доклада: Экспериментальное определение вязкостей систем ОКМ-2, PETA, DMEG – бутонол-1 составов от 0 до 20 процентов по массе бетанола в температурном интервале 15-40 С.

ОКМ-2, PETA, DMEG являются мономерами для реакции радикальной фотополимеризации, которая давно изучаются в лаборатории ФППМ ИМХ РАН. Само же явление фотополимеризации имеет множество применений как в научной, так и в технической сферах: фотолитография, 3D прототипирование, биопечать

Модель

Для описания явлений полимеризации в объеме существует математическая модель (СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ), рассчитывающая концентрационный профиль мономера, полимера и растворителя в смеси в каждый момент времени в каждой точке пространства. Она представляет из себя систему уравнений для потоков компонентов. Она дает возможность не только описать, но и прогнозировать некоторые свойства полученного полимера, варьируя параметры, характеризующие взаимодиффузию мономера и нейтральной компоненты, и определяющие контраст композиции (СНОСКИ)

Однако это - эмпирические коэффициенты, усредненные для целой группы веществ. При этом для упрощения принято, что реакция происходит в изотермических условиях. Для более точного моделирования, а также для предсказания полимеризации композиций разных составов, в отличных от данных условий смеси требуется оценить значение коэффициентов диффузии компонентов и их зависимости от температуры.

цЕЛЬ РАБОТЫ

В связи с этим целью данной работы являлось оценка коэффициентов диффузии через экспериментальное нахождение вязкостей смесей ОКМ-2, ПETA, ДМЭГ с бутанолом-1 (КАРТИНКИ)при разных температурах.

Диффузия

Вообще диффузия – это неравновесный процесс переноса частиц вещества из области с высокой концентрацией в область с низкой концентрацией, и что важно, без направленного объемного движения (РИСУНОК С КУБОМ)

Базовыми уравнениями для диффузии являются законы Фика (ЗАКОНЫ ФИКА), связывающие поток массы вещества и градиент его концентрации. Они строго выводятся для газов, но остаются справедливыми и для жидкостей. С другой стороны, коэффициент есть предел отношения квадрата расстояния, пройденного частицей за время t при стремлении t к бесконечности (ФОРМУЛА ПРЕДЕЛА), на данном рисунке (РИСУНОК С ТОЧКАМИ) это квадрат расстояния от А до С. Преобразуя эту формулу мы получаем удобное для расчета уравнение коэффициента через среднеквадратичное перемещение MSD, это расстояние от А до Б и тд. Справа представлена типичная кривая MSD полученная из симуляции молекулярной динамики для бутанола

~~Коэффициент диффузии маркера в бинарной системе, состоящей из веществ с разными коэффициентами самодиффузии~~

~~Зависимость коэффициента диффузии в жидкостях должна подчиняться закону арениуса~~

Однако нахождение коэффициента для всех составов и температур по этой формуле затрудненно из-за больших вычислительных затрат, а оценка через закон Фика сложна из-за необходимости точного контроля температуры на всем протяжении эксперимента. К тому же в системе в самом начале измерений могут появиться паразитные конвекционные потоки вещества, которые испортят результаты.

Поэтому был выбран другой путь.

Вязкость

Существует процесс переноса, косвенно связанный с диффузией – вязкость. Это свойство текучих тел оказывать сопротивление при перемещении 1 части относительно другой, которое возникает вследствие переноса импульса. Основным законом описания вязкость закон Ньютона (ФОРМУЛА НЬТОНА), связывающий изменение скорости среды и напряжение при трении между слоями этой среды, коэффициент вязкости мы непосредственно можем найти

Между вязкостью жидкости и диффузией макрочастиц в ней существует взаимосвязь – формула Стокса (ФОРМУЛА СТОКСА), строго выведенная для шарика, перемещающегося в вязкой среде. Из этой формулы можно получить соотношение для коэффициентов диффузии при разных температурах

Если использовать простую модель объекта гладкой формы, медленно перемещающегося в объем, те при этом перенос импульса осуществляется только через столкновения

, те при перемещении не возникает вихревых потоков , коэффициент диффузии, будет выражаться по такой формуле…

для шара в вязкой жидкости подвижность частицы выражается как

получаем достаточно простую формулу. Несмотря на это она применима для оценки коэффициента диффузии микрочастиц

Так как молекулы не являются шарами, и взаимодействуют друг с другом не только через друг с другом , тем самым знаменатель будет отличаться от идеальной модели.

МД

Оценочные коэффициенты диффузии для чистых веществ , а так же их значения в смеси при разных температурах можно получить из симуляций молекулярной динамики этих систем.

Используя известный вычислительный пакет громакс, возможно вычислить среднеквадратичное смещение, и по этой формуле (Формула), оценить значение коэффициента диффузии

Вязкость

Для вычисления вязкости был использован прибор…

, чтобы получить достоверные результаты и провести аппроксимацию зависимости вязскости от температуры, использовалась установка подобная этой, где с помощью видеокамеры считывались данные о температуре и вязкостях. После распознавания полученных изображений для каждого состава получается кривая. После отбраковки выбрососв (верхний график) получаем (нижний график)

Имея оценочные значения коэффициентов диффузии для конкретных температур и зависимость вязкостей от температуры мы можем получить оценку коэффициентов диффузии для чистых веществ при любой температуре

Итоги

Общие данные сведены в таблице