

Теория и моделирование коллапса полиэлектролитной звезды

Рудь Олег Владимирович

Аспирант

Институт высокомолекулярных соединений РАН, физический отдел

Настоящая работа посвящена модернизации ранее разработанной и апробированной установки, позволяющей проводить комплексные измерения теплоемкости, адиабатического термического коэффициента давления, а также коэффициента теплового расширения [1,2,3]. Для увеличения точности полностью изменен один из важных узлов установки – генератор периодической составляющей давления. Новая конструкция узла модуляции давления позволяет создавать колебания давления синусоидальной формы в измерительной ячейке. Кроме того, заново собрана вся система гидравлики. На старой установке узел модуляции давления создавал колебания давления в системе со значительным содержанием гармоник, что приводило к трудностям в компенсации температурных откликов и снижало точность измерений. На первом этапе модернизации установки предполагается запуск и настройка той её части, которая отвечает за адиабатический термический коэффициент давления (а.т.к.д.). Автономные испытания генератора периодического давления показали, что побочные гармоники составляют 5% от основного тона. В ячейку установлены алюмель-хромелевые термодпары. Для измерения температурного отклика используется новый нановольтметр SR810. Кроме того, в установке использован датчик давления Mediamate-1000 американской фирмы Honeywell. В порядке тестирования установки предполагается использовать в качестве образца дистиллированную воду, поскольку интерес представляет поведение а.т.к.д. в области температур 20-80 °С, где значительные изменения претерпевает коэффициент теплового расширения воды.

Литература

1. Благодравов Л.А., Карчевский О.О., Иванников П.В., Клепиков А.С. Применение двойной модуляции при измерении коэффициента теплового расширения жидкостей. //Вестник Московского университета. Серия 3.Физика. Астрономия.(2003)№3.17-23.

2. Благодравов Л.А., Модхен Ф. Измерение адиабатического термического коэффициента давления в периодическом режиме //Приборы и техника эксперимента. 1991. №4.С.167.

3. Благодравов Л.А., Карчевский О.О., Иванников П.В., Соболева А.В. Опыт применения двойной модуляции в измерении коэффициента теплового расширения проводящих жидкостей. //Вестник МГУ. Серия 3. Физика. Астрономия. 2008. №1. С 50-55.

Визуализация течения после инициирования импульсного разряда теневым и теневым фоновым методом.**Цзинь Цзинь***Аспирант**Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет,
Москва, Россия**E-mail: jinjin32050201@yahoo.com.cn*

ТФМ (Теневой Фоновый Метод) или BOS (Background Oriented Schlieren) -- метод опирается на явление рефракции и современные возможности цифровой обработки изображений[1]. Метод был предложен Meier в 1999. ТФМ метод позволяет не только качественно, но и количественно проанализировать изображения течений газа и жидкости, измерить поля плотности в потоке. За последние несколько лет техника ТФМ использовалась в различных экспериментах – теплофизических экспериментах, экспериментах со сверхзвуковыми течениями в аэродинамических трубах, со свободными реактивными струями, вихрям на периферии лопаток вертолета и.т.д. Принцип техники ТФМ базируется в измерении величины отклонения света, проходящего через фазовый объект. С помощью эмпирического закона Гладстона (Gladstone-Dale), поле плотности можно получить через изменения показателя преломления n .

Эксперименты проводились в ударной трубе с разрядной камерой [2]. В камере реализуется наносекундный поверхностный газовый разряд с предионизацией ультрафиолетовым свечением двух плазменных электродов (системы параллельных каналов). Верхняя и нижняя стенки разрядной камеры представляют собой подложки для развития поверхностного разряда плазменных электродов, боковые выполнены из кварцевого стекла, что позволяет наблюдать за разрядными и газодинамическими процессами в камере с использованием специального оборудования. Длина разрядной камеры составляет 100 мм. Ширина разрядной камеры или расстояние между кварцевыми стеклами составляет 48 мм. Высота разрядной камеры или расстояние между плазменными листами составляет 24 мм. Разрядное напряжение может изменяться в пределах от 15 до 30 кВ, максимальный ток зарядки

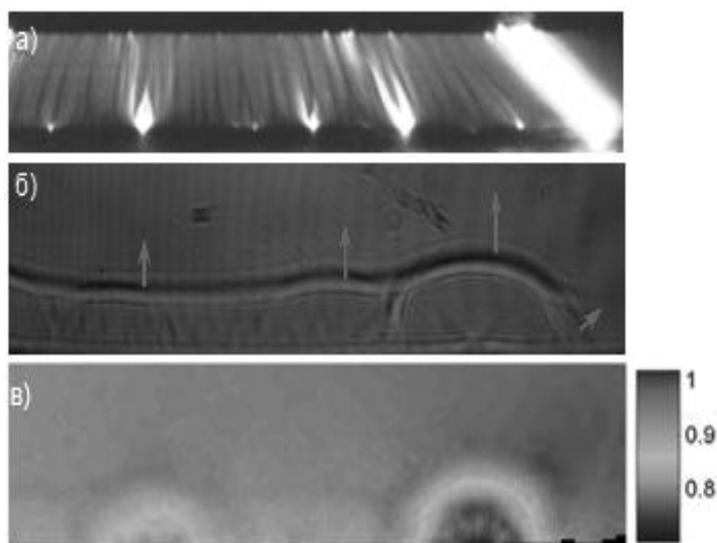


Рис1. а) изображение разряда в невозмущенном газе; б) теневое изображение течения 7 мкс после разряда (начальная плотность 0,12 кг/м³) . Стрелки показывают направлении ударной волны из нижнего плазменного листа.

рабочей ёмкости составляет 10 мА, инициирование запускающего сигнала происходит при подаче импульса положительной полярности длительностью $5 \div 10$ мкс на блок запуска.

На рис1, в представлены изображения ударной волны от плазменного листа, полученные для близких моментов времени.

Видно, что ударная волна плоской, местами цилиндрической формы движется вверх. Данные изображения были получены в разных опытах. Сравнить результаты двух методов сложно, хотя повторяемость удовлетворительная и форма разных ударных волн похожа. Была собрана оптическая схема, позволяющая применять одновременно теневой и ТФМ метод на основе одного импульса лазера. Это позволило измерить параметры одного течения двумя методами в один и тот же момент времени с экспозицией 6 нс.

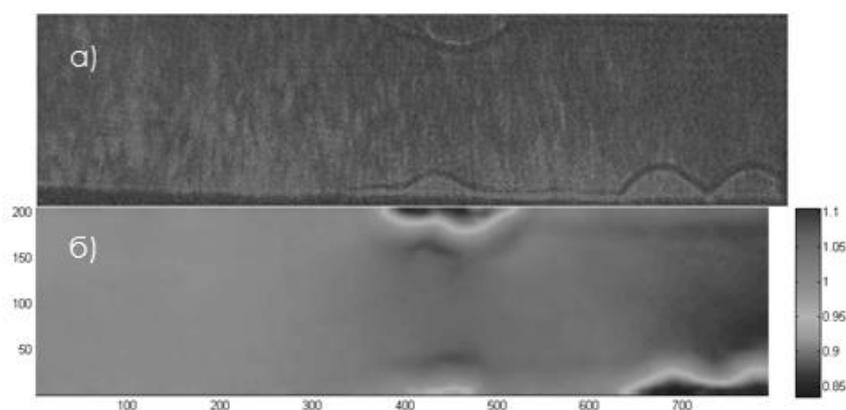


Рис2. а) теневое изображение разряда в невозмущенном газе; б) ТФМ изображение.

На Рис.2 - изображения течения с ударными волнами от плазменных листов через 6,5 мкс после разряда, полученные с помощью этой схемы. Начальное давление 70 Торр, напряжение на плазменных листах 25кВ. Изображения дополняют друг друга. Теневые снимки дают положение и форму фронта; ТФМ дает поле смещений и плотности. За фронтом ударной волны регистрируется градиент плотности.

Литература

Программа обработки ТФМ изображений создана к.ф.-м.н. Винниченко Н.А.

1. Meier, G.E.A. "Computerized background-oriented schlieren." // Experiments in Fluids 33, 2002.
2. Знаменская И.А., Латфуллин Д.Ф., Мурсенкова И.В. Исследование поверхностных разрядов (плазменных листов) в ударной трубе. // Материалы Всероссийской научной конференции по физике низкотемпературной плазмы

Исследование кинетики роста грани {100} кристалла хлорида калия

Д.В. Богдашкина¹, Д.А. Воронцов^{1,2}, Е.В. Петрова¹

1 – Московский государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Физический факультет, 2 — Нижегородский государственный университет,

dashabogd@mail.ru

В работе [1] было показано, что при отклонении состава раствора от стехиометрического, скорость движения ступени косселевского кристалла зависит от пересыщения линейно, а некосселевского – соответственно, нелинейно. Поэтому данные о зависимости нормальной скорости роста и скорости движения ступеней на гранях кристаллов хлорида калия KCl от пересыщения могут дать информацию о механизме роста ионных кристаллов. Хорошо известный хлорид калия был выбран как модельный объект.

Методами атомно-силовой микроскопии (АСМ) и лазерной интерферометрии была исследована кинетика роста граней {100} кристаллов KCl в зависимости от пересыщения раствора.

Измерения на интерферометре Майкельсона в проточной кювете показали, что рост граней {100} кристаллов KCl происходит по спирально-дислокационному механизму. Даже при малом пересыщении около $1,1 \cdot 10^{-3}$ часто наблюдалось разбиение грани {100} на отдельные растущие блоки, что, по-видимому, частично связано с действием присутствующих в исходных реактивах микропримесей. Дислокационные центры роста располагались преимущественно на ребрах таких блоков, и происходила частая смена ведущего центра роста. При последующем повышении пересыщения раствора наблюдалось нарушение гранного роста и появление образований, характерных для скелетных форм роста кристаллов.

Методом АСМ получены изображения ($12 \times 12 \text{ мкм}^2$) ограниченных ямок травления двух типов: с плоским дном и с дислокационным источником растворения. Высота элементарных ступеней, измеренная по АСМ-снимкам, составляет 0,68 нм, что близко к значению параметра элементарной решетки. Получено изображение поверхности грани (100) с разрешением, позволяющим различить отдельные элементарные ячейки. Метод АСМ использовался для изучения морфологии поверхности граней кристаллов KCl. Для исследования кинетики роста этот метод оказался непригоден из-за большой скорости движения ступеней (высокого кинетического коэффициента ступеней в водном растворе) и относительно медленной скорости сканирования.

Получены данные о влиянии ионов свинца Pb^{2+} на растворимость хлорида калия и морфологию поверхности кристаллов, выращенных из раствора хлорида калия с добавкой малых количеств хлорида свинца. Опыты проводились в растворах с различным (от 0,0068 до 0,060 г/л) содержанием PbCl_2 . Добавление ионов свинца улучшает регенерацию граней и уменьшает скорость роста, а также заметно уменьшает растворимость хлорида калия в воде.

Литература

[1] L. N. Rashkovich, E. V. Petrova, T. G. Chernevich, O. A. Shustin and A. A. Chernov. Non-Kossel Crystals: Calcium and Magnesium Oxalates. Crystallography reports, 2005, vol.50, Supplement 1, p.S78-S81.

Исследование локальной подвижности бензольных колец в полисульфоне и поликарбонате

Шаймухаметова Эльвира Рамилевна

Аспирант

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт Физики, Казань Россия,

E-mail: elvira-shai@rambler.ru

Процессы разделения жидких и газовых смесей играют важную роль во многих отраслях промышленности и в защите окружающей среды. Большой интерес к мембранному разделению вызывает необходимость исследования локальной динамики в макромолекулах, распределения свободного объёма полимера по размерам. Изучение взаимосвязи структуры и свойств является ключевым моментом при создании новых полимерных материалов. Исследуемые в настоящей работе полисульфон (ПСФ) и поликарбонат (ПК) относят к пористым полимерам, применяемым в мембранном ультрафильтрационном разделении смесей веществ [2].

Ультрафильтрация – это мембранный процесс, по своей природе занимающий промежуточное положение между обратным осмосом и микрофильтрацией. Ультрафильтрационные мембраны относятся к пористым мембранам, и в них задержка частиц определяется главным образом их размером и формой в соответствии с размерами пор мембраны. В мембранах для ультрафильтрации существуют фиксированные поры, размеры которых можно определять различными методами. В таком случае размеры пор и распределение пор по размерам будут определять, какие частицы или молекулы будут задерживаться мембраной, а какие проходить через неё. Одной из наиболее распространённых характеристик мелкомасштабной подвижности в полимерах являются температуры релаксационных переходов, проявляющихся ниже температуры стеклования (вторичные релаксационные переходы). Эти переходы соответствуют «размораживанию» степеней свободы барьеров внутреннего вращения боковых групп и других элементов полимерной цепи.

ИК-спектроскопическим методом конформационных зондов [1] удаётся определить природу конформационных переходов в полимерной матрице и оценить объёмы релаксаторов, т.е. атомных групп, обеспечивающих образование в полимере подвижных элементов свободного объёма. В настоящей работе методом конформационных зондов изучена локальная молекулярная подвижность ПСФ и ПК. Как видно из структурных формул (рис.1) , локальная конформационная подвижность в макромолекулах полимеров может определяться крутильными колебаниями бензольных колец вокруг связей основной цепи аналогично вращению бензольных и фталимидных колец в полиэфиримидах [4].

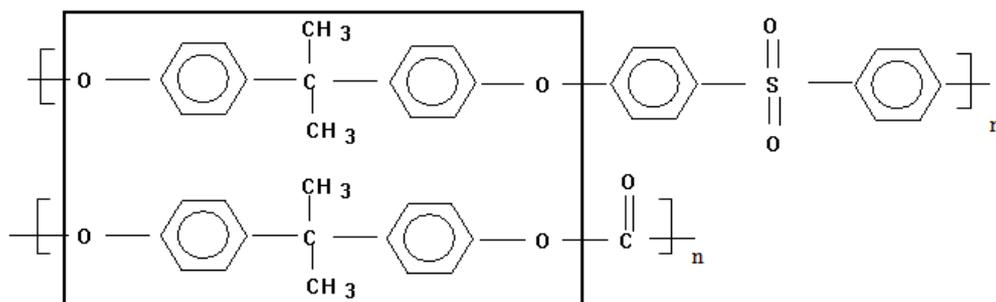


Рис. 1. Структурные формулы поликарбоната и полисульфона

Для исследуемых полимеров были получены температурные зависимости логарифма отношения интенсивностей конформационно-чувствительных полос различных зондов (ДФЭ, ДБЭ, ТХЭ, ТБЭ, ДФЭ), по которым определялась температура релаксационного перехода в полимере, то есть замораживания локальной подвижности. В качестве примера полученных зависимостей приведем рис.2.

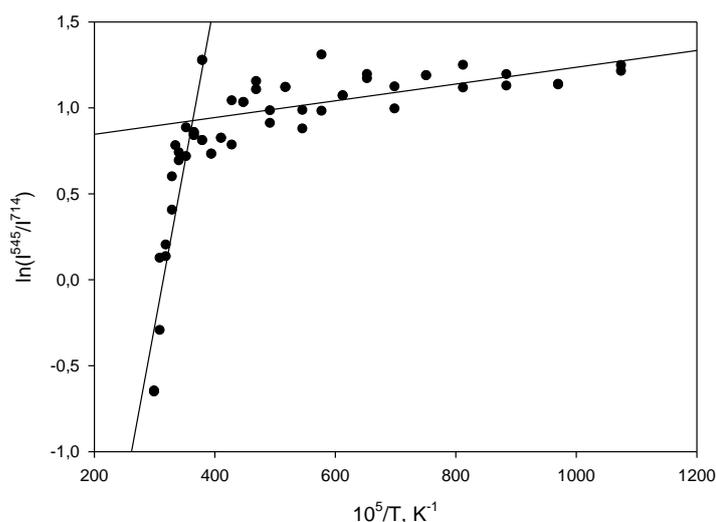


Рис. 2. Зависимость логарифма отношения интенсивностей конформационно-чувствительных полос поглощения зонда в полимере от обратной температуры для системы ТХЭ в ПСФ

Согласно структурной формуле поликарбоната в этом полимере должен присутствовать только один тип локальной подвижности, связанный с крутильными колебаниями бензольных колец, присоединенных с одной стороны к атому кислорода, а с другой стороны к группе $C(CH_3)_2$. Следовательно, вторичный релаксационный переход обусловлен замораживанием этой подвижности. Полученные нами методом конформационных зондов температуры замораживания конформационных переходов находятся в интервале температур 240-260 К.

В ПСФ, согласно его структурной формуле, должны наблюдаться два типа конформационной подвижности: вращение бензольного кольца вокруг связей С–О и С–С(CH₃)₂ аналогично релаксационному переходу в ПК и вращение бензольного кольца вокруг связей С–О и С–SO₂. Согласно нашим исследованиям, в ПСФ происходит замораживание вращения некоторого фрагмента при средней температуре, равной 255 К, которое можно отнести к тому же типу локальной подвижности, что и в поликарбонате. Кроме того, обнаружен еще один вторичный релаксационный переход вблизи температуры 195 К, который может быть отнесен к вращению бензольного кольца, связанного с атомом кислорода и группой SO₂. Следует отметить, что в пользу такого отнесения релаксационных переходов в полисульфоне указывает тот факт, что длина химической связи С_{аром}–S больше длины связи С_{аром}–С_{алиф} [3], и, следовательно, подвижность бензольных колец вокруг С_{аром}–S менее затруднена и возможна до более низкой температуры по сравнению с подвижность бензольных колец первого типа.

Литература

1. Камалова Д.И., Ремизов А.Б., Салахов М.Х. Конформационные зонды в изучении локальной подвижности полимеров. М.: Физматкнига, 2008.
2. Мулдер М. Введение в мембранную технологию. Пер. с англ. М.:Мир, 1999.
3. Справочник химика. М.:Мир, 1976. 541 с.
4. Pixton M.R., Paul D.K. Relationships between structure and transport properties for polymers with aromatic backbones. // Polymeric gas separation membranes. Boca Raton: CRC Press, 1994. P.83.

Конденсация пара в параллельных трубках, охлаждаемых воздухом**Осипова Елена Александровна**

студент

Калужский государственный университет имени К.Э. Циолковского, физико-математический факультет, Калуга, Россия.

E-mail: lenka.osipova@mail.ru

Конденсация водяного пара в трубках рассматривалась в работах Кружилина Г.Н., Миропольского З.Л., Риферта В.Г. и др. [1,3]. Во всех случаях эксперименты проводились на одиночных трубках, однако, ряд экспериментов [2], выявил существенное взаимовлияние параллельных каналов при конденсации пара, прежде всего, на устойчивость процессов. В частности, при рассмотрении процесса конденсации водяного пара в параллельных каналах воздушно конденсационной установки при неравномерном теплосъеме, было показано, что первая по ходу охлаждающего воздуха трубка работает недостаточно эффективно.

Цель работы - исследование конденсации водяного пара в нескольких (от 2 до 4) параллельных каналах с измерением температуры стенки труб и воздуха по высоте труб.

Для исследования была спроектирована установка, которая позволяет выявить эффективность работы параллельных каналов при конденсации в них водяного пара и неравномерном теплосъеме. Это позволяет подтвердить наличие описанного явления.

Экспериментальная установка работает следующим образом: В верхнюю крышку рабочего участка подается насыщенный пар из парогенератора. Пар распределяется по четырем теплообменным трубкам. Всего в теплообменнике установлено семь труб, но первые три заглушены. Воздух поступает через скругленный входной участок в щель между боковыми стенками и натекает на трубки. Первые три трубки (заглушенные) формируют поток воздуха таким образом, чтобы исключить влияние входного устройства на интенсивность теплообмена. Последующие трубки охлаждаются воздухом, конденсат стекает в нижнюю крышку, которая разделена на отсеки, соответствующие теплообменным трубкам. К каждому отсеку присоединяется мерная емкость для сборки конденсата.

Охлаждающий воздух из помещения проходит через рабочий участок (рис.1), нагревается и отсасывается вентилятором. Небольшое разрежение в паровой полости создается водоструйным эжектором, присоединенным к насосу и баку.

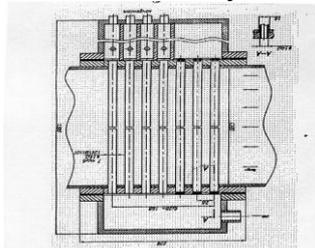


рис.1. Экспериментальная установка: рабочий участок

Изменяя расход воздуха, меняли распределение потоков пара, нагрев воздуха, коэффициент теплоотдачи, мощность парогенератора.

В работе проводились следующие измерения:

- температура воздуха на входе и выходе из модели;
- количество сконденсировавшегося пара (объемным способом);
- температура стенки трубы на теплообменнике.

Расход охлаждающего воздуха $G_{возд}$ предлагается определять по тепловому балансу (1).

$$G_n r = G_{возд} C_p \Delta t \quad (1)$$

где r -теплота фазового перехода (для пара 2250 КДж/кг), C_p - теплоемкость (1 кДж/кг К), Δt - нагрев (2), °С, G -массовый расход, кг/с (измеряется в эксперименте).

$$\Delta t = \bar{t} - t_{ex} \quad (2)$$

где \bar{t} - средняя температура на выходе (по длине трубки), t_{ex} - температура воздуха на входе, °С; (измеряется в эксперименте).

На основе экспериментальных данных, был произведен расчет по тепловому балансу расхода воздуха $G_{возд}$. Так же получена следующая графическая интерпретация (рис.2). При проведении эксперимента мощность парогенератора принимала соответственно значения 17, 13, 9, 5, 3 кВт, при этом перепад давления составлял 65 мм.вд.ст, давление – 746,5 мм.рт.ст.

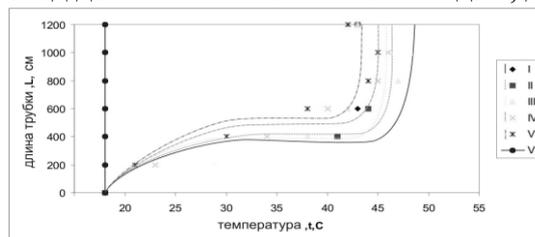


рис.2 Распределение температуры воздуха по высоте трубки: линия I-соответствует расходу воздуха 0,0068 кг/с, II-0,0060 кг/с, III-0,0051 кг/с, IV-0,0041 кг/с, V-0,0038 кг/с, линия VI-температуре на вход.

При большем расходе пара (и расходе воздуха) нагрев в первой части трубки (0-200 см) наибольший. Максимум нагрева приходится на участок трубы в точке 800 см.

В силу того, что конденсация пара в первом по ходу воздуха канале происходит до конца не по всей длине трубки, то есть в нижней части воздух не нагревается и подходит ко второму ряду относительно холодным, увеличивается расход пара во втором ряду. Что подтверждается графически.

Литература

1. Бойко Л.Д., Кружилин Г.Н. Теплоотдача при конденсации пара в трубах – Изв. АН СССР. Энергетика и транспорт, 1966, №5 с. 113-123.
2. Мильман О.О., Федоров В.А. Воздушно-конденсационные установки. – М.: Издательство МЭИ, 2002. – 208 с.
3. Риферт В.Г. Конденсация пара внутри горизонтальных труб – Инж.-физ. Журнал, 1983, т.44, №5, с. 1017-1029.

Структурные особенности жидкой воды при изменении внешнего давления

Зарипов Р.Р.

Аспирант

Татарский государственный гуманитарно-педагогический университет,

Физико-математический факультет, Казань, Россия

E-mail: zaripov-rr@mail.ru

Вода – одно из самых распространенных на земле соединений, история исследования которой насчитывает уже несколько столетий. Тем не менее, достаточно полной теории, способной объяснить интересные свойства этого вещества, до сих пор не построено.

В настоящее время одним из эффективных методов исследования конденсированного состояния вещества является компьютерное моделирование. В данной работе приводятся результаты исследования структурных особенностей жидкой воды при температуре $T = 298\text{K}$ и $T = 277\text{K}$, и значениях внешнего давления от 1 до 10000 атмосфер, выполненного численно с помощью компьютерного моделирования молекулярной динамики.

Исследуемая система состояла из $N = 4000$ молекул воды, расположенных в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Взаимодействие частиц в системе осуществлялось на основе пятиточечного модельного потенциала TIP5P [1]. Для численного интегрирования уравнений движения частиц в системе был использован алгоритм Бимона [2] с временным шагом 10^{-15} с. Все моделирование было проведено в NpT-ансамбле с термостатом и баростатом Берендсена [3].

Структурные особенности исследуемой системы были проанализированы на основе параметра тетраэдричности τ [4]. Для атома кислорода данной молекулы воды находят четыре ближайших атома кислорода других молекул, и рассчитывают тетраэдричность τ по формуле:

$$\tau = \sum_{i=1}^5 \sum_{j=i+1}^6 (l_i - l_j)^2 / (15 \langle l \rangle^2),$$

где l_i и l_j – длина ребер тетраэдра, в вершинах которого находятся атомы кислорода четырех молекул, ближайших к данной молекуле воды; $\langle l \rangle^2$ – средняя длина этих ребер. Величина τ характеризует степень отклонения окружения молекулы от регулярного тетраэдрического. Если $\tau = 0$, то тетраэдр правильный, как в идеальной структуре гексагонального льда. Чем больше значение τ , тем менее регулярно окружение данной молекулы.

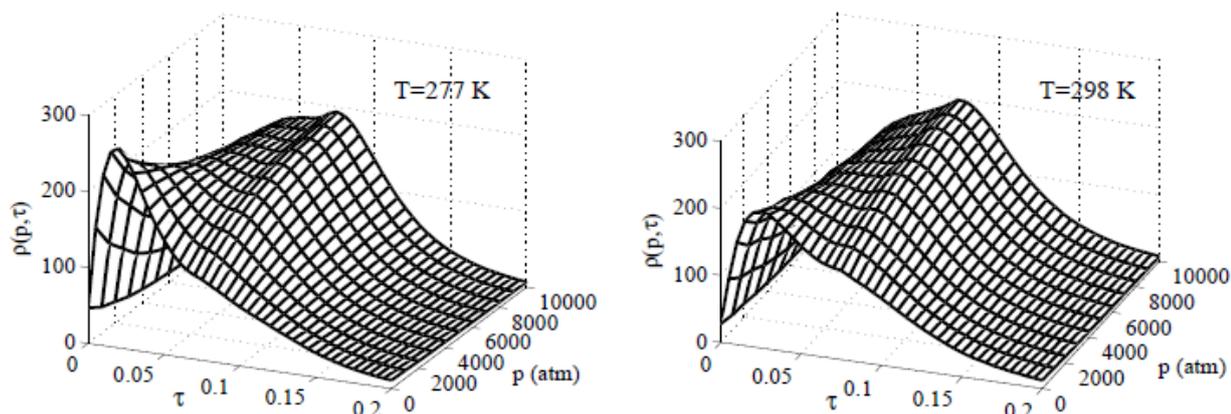


Рис.1. Распределение молекул по значениям параметра тетраэдричности τ для всех исследуемых термодинамических состояний системы.

Другим параметром, с помощью которого так же можно охарактеризовать структуру воды, является параметра тетраэдрального ориентационного порядка [5]

$$Q_k \equiv 1 - \frac{3}{8} \sum_i^3 \sum_{j=i+1}^4 \left[\cos \psi_{ikj} + \frac{1}{3} \right]^2,$$

где ψ_{ikj} - это угол между связями, образованными молекулой k с молекулами i и j . Идеальная структура гексагонального льда характеризуется значением $Q = 1$. Чем меньше значение параметра Q для молекулы, тем меньше ее ближайшее окружение соответствует структуре правильного тетраэдра. Графики распределения молекул по значениям параметров τ и Q для всех исследуемых термодинамических состояний системы представлены на рис.1 и 2.

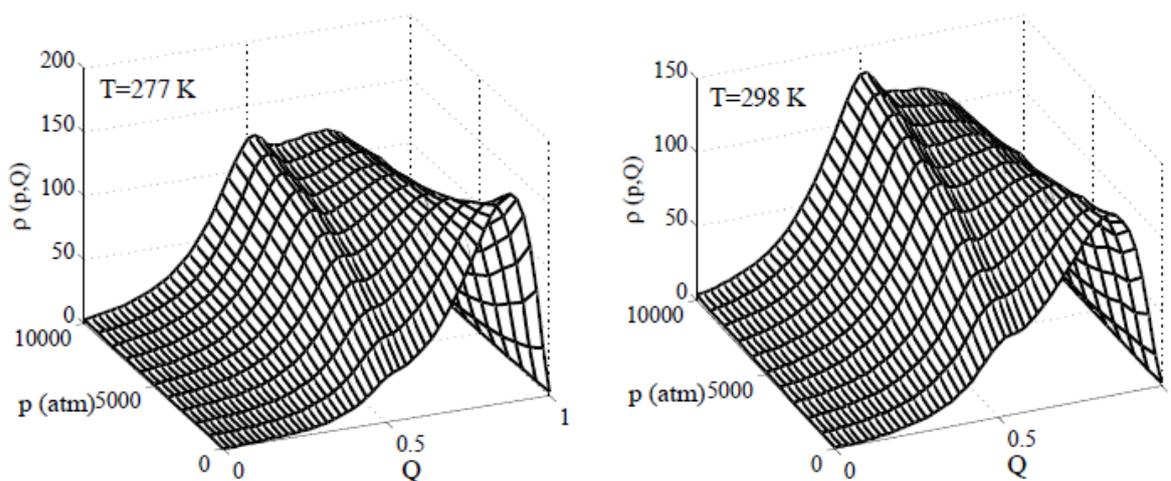


Рис.2. Распределение молекул по значениям параметра тетраэдрального ориентационного порядка Q .

Полученные результаты позволяют сделать вывод, что наиболее вероятной конфигурацией расположения молекул в исследуемой модели, при нормальных условиях, является тетраэдр со значениями $\tau \approx 0,05$ и $Q \approx 0,8$. Однако при повышении внешнего давления, на графике распределения молекул по значениям этих параметров возникает новый пик - наиболее вероятное значение параметров τ и Q скачкообразно смещается в область меньшего порядка.

Работа выполнена при финансовой поддержке фондов РФФИ (грант № 09-02-91053-НЦНИ_а, № 08-02-00123-а).

Литература

1. Mahoney M.W., Jorgensen W.L. A five-site model for liquid water and the reproduction of the density anomaly by rigid, nonpolarizable potential functions // J. Chem. Phys., 2000, Vol. 112, №20, p.8910-8922.
2. Beeman D. Some Multistep Methods for Use in Molecular Dynamics Calculations // J.Comp.Phys., 1976, Vol.20, №2, p.130-139.
3. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., et.al. Molecular Dynamics with Coupling to an External Bath // J. Chem. Phys., 1984, Vol. 81, p.3684–3690.
4. Medvedev N.N., Naberukhin Yu.I. Shape of the Delaunay simplices in dense random packings of hard and soft spheres // Non-Cryst. Solids, 1987, v.94, p. 402-406.
5. Errington J.R., Debenedetti P.G. Relationship between structural order and the anomalies of liquid water, Nature, 2001, № 409, p. 318-321.

Динамика дрейфа пузырей в турбулентном потоке, дрейф тела во вращающихся жидкостях.

Шатрова Евгения Фотеевна

Аспирантка

Пермский государственный научно-исследовательский университет,

физический факультет, Пермь, Россия

E-mail: zhenya.shatrova@gmail.com

Последние десятилетия отмечены резким повышением интереса физиков к проблемам взаимосвязи теории нелинейных диссипативных структур и турбулентности [4]. Исследование процессов, протекающих в открытых системах при больших отклонениях от равновесия, показало, что в таких системах могут возникать сложные хаотические режимы, несмотря на детерминированные начальные и граничные условия [2,5]. В работе экспериментально и теоретически рассматривается одна из подобных задач - классическая задача Стокса по обтеканию шаров вязкими жидкостями в далёких закритических областях [3,1]. Представляют несомненный интерес в этом ряду слабо изученные вопросы влияния отрывающихся кармановских вихрей на свободно дрейфующие лёгкие тела в турбулентных потоках.

Анализ выполненных экспериментов и расчётов позволяет сделать выводы: А) Несмотря на большие надкритичности, при которых в объёме окружающей пузырь жидкости должен был реализоваться физический хаос, в рассматриваемой системе в результате взаимодействия возникающих вихрей Кармана сформировалась упорядоченная временная диссипативная структура с выделенной частотой колебаний. Б) Определённая по результатам измерений функция распределения позволяет предсказывать величину отклонения пузыря в бок от прямой траектории как функцию пройденного пути. В) С помощью методик расчёта Ляпунова, Колмогорова и Грассбергера и Прокачиа основных параметров процесса по экспериментальным рядам данных установлено, что фазовые траектории пузыря имеют динамическое происхождение и располагаются на простом аттракторе: узле или фокусе.

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (07-01-96040), а так же при частичной финансовой поддержке из средств Гранта RUX0-009-PE-06 Американского Фонда Гражданских исследований и Развития (АФГИР) (грант №10-17-н-17и).

Литература

1. Ван Дайк Ван Дайк М. Методы возмущений в механике жидкости. М.: Мир, 1967. 301 с.
2. Кузнецов С.П. Динамический хаос. М.: Физматлит. 2001. 286 с.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е.М Теоретическая физика. Т. VI. Гидродинамика. Изд 3-е, перер. М.: Наука, 1986. 736 с.
4. Рабинович М.И., Сущик М.М. Регулярная и хаотическая динамика структур в течениях жидкости//УФН. 1990. Т.160, №1. С.1-64.
5. Скоков В.Н., Селезнёв В.В. Введение в физику неравновесных процессов. Екатеринбург. УГТИ – УПИ. 2008. 232 с.

Слова благодарности

Автор выражает благодарность профессору, д.ф.-м.н. Братухину Юрию Клавдиевичу за интересную задачу.

Теория и моделирование коллапса полиэлектролитной звезды

Олег Владимирович Рудь

Аспирант

Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-петербург, Россия

E-mail: helvrud@gmail.com

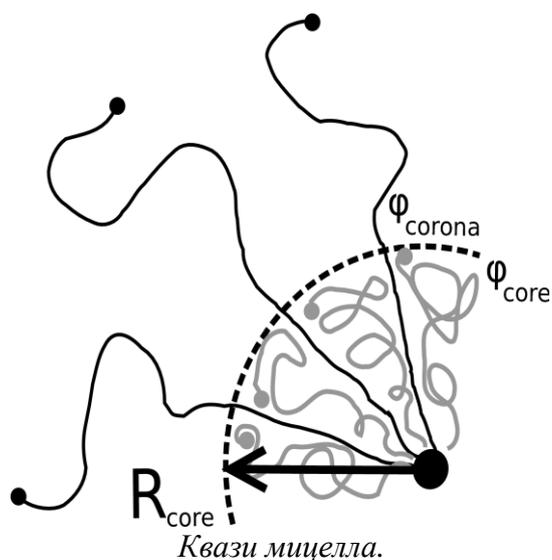
В работе рассмотрен коллапс гидрофобной полиэлектролитной звезды. Исследование проводилось на основе теории самосогласованного поля и численным методом Схойтенса-Флира (van Male, 2001; Fleer, 1993). Звезда состоит из нескольких полиэлектролитных цепей, каждая из которых в свою очередь состоит из одинаковых мономеров. Эти мономеры сами по себе гидрофобны и обладают возможностью ионизоваться. Лучи звезды могут быть, например, поликислотами, каждый мономер которых содержит боковой гидрофобный привесок и может быть в зависимости от локального окружения либо нейтральным, либо отрицательно заряженным.

Целью работы было изучение игры между двумя силами влияющими на конформацию полиэлектролита в растворе. Это, во-первых, — гидрофобность полимера и, во-вторых, — электростатическое взаимодействие между зарядами полиэлектролита и растворенными ионами. Первая из них ведет к слипанию мономеров и поджатию лучей (к коллапсу), а вторая — наоборот ведет к набуханию полимера посредством осмотического давления контр-ионов во внутренней области полимерного клубка. Осмотическое давление, в свою очередь, обусловлено притяжением между заряженными группами полимера и противоположно заряженными низкомолекулярными ионами.

Ситуация усложняется в гетерогенных системах, таких как, например, полиэлектролитные щетки и звезды. Такие параметры как рН раствора, ионная сила становятся локальными и связанными с локальной концентрацией мономеров звезды. Локальность этих параметров ведет к микрофазовому расслоению в звезде.

В этой работе показано, что переход от набухшего состояния звезды к коллапсированному идет минуя промежуточное состояние, в котором наблюдается микрофазовое расслоение вещества звезды на две области: внутреннюю представляющую собой плотное и слабо заряженное ядро и внешнюю значительно менее плотную и сильно заряженную корону. Звезду находящуюся в таком состоянии мы называем квазимицеллой (см. рисунок).

На основании численного расчета и простой теории, выполненных в приближении среднего поля, была предложена модель перехода в которой квазимицелла организована следующим образом. Каждая ветвь звезды может находиться либо в сколлапсированной фазе, либо в набухшей и участвовать соответственно в формировании либо плотного нерастворимого ядра, либо растворимой короны. Количество ветвей, попавших в ядро зависит от свойств раствора. Таким образом можно, варьируя такие параметры как



гидрофобность звезды и концентрация соли можно контролировать относительные размеры ядра и короны.

Достаточно большая корона может удерживать ядро растворенным (или вернее сказать — взвешенным). Эта возможность открывает для данной системы перспективы ее использования для решения проблемы «транспорта лекарств». Если лекарство растворимо в полимере и не растворимо в воде, то оно может быть доставлено внутри ядра звезды в определенную область организма где оно будет выпущено на свободу посредством либо разрушения звезды, либо перехода звезды в набухшее состояние.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю д. ф.-м. н., профессору Татьяне Максимовне Бириштейн, а также к. ф.-м. н., доценту Меркурьевой Анне Александровне.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 08-03-00336-а).

Литература:

1. van Male, J.; Leermakers, F. A. M. “sfbox”, 2001 A Computer Program.
2. Fleer, G. J.; Cohen Stuart, M. A.; Scheutjens, J. M. H. M.; Cosgrove, T.; Vincent, B. Polymers at Interfaces; Chapman & Hall: London, 1993.

Изучение критической адсорбции в бинарных системах¹ Дробышевский И.А., ² Куроедов Н.А., Габышев А.Н.,¹ студент, ² студент, ³ аспирант

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова,

Физический факультет, Москва, Россия.

E-mail: ¹ilyadr@mail.ru, ²kol2057@mail.ru

Настоящая работа посвящена экспериментальному изучению с помощью рефрактометрии критической адсорбции, которая представляет собой поверхностный фазовый переход, в бинарных жидких системах.

Картину влияния поверхности на фазовый переход в двухкомпонентных системах необходимо дополнить рассмотрением адсорбции компонентов из гомогенной смеси критического состава. Установлено, что в узком интервале температур в окрестности критической температуры - T_c ($T > T_c$) наблюдается аномальный рост адсорбции одного из компонентов смеси на поверхности стенки [1,2]. Это явление называют критической адсорбцией. Согласно теории, адсорбционный слой состоит в основном из компонента с более низким поверхностным натяжением, т.к. система уменьшает свою свободную энергию.

Постановка задачи и цель работы:

- Исследование возможности получения информации о критической адсорбции на границе раздела жидкость-пар бинарной жидкой смеси методом рефрактометрии.
- Проверка существования явления критической адсорбции в указанных бинарных системах, установление зависимости возникновения критической адсорбции от температурного режима (при нагревании и охлаждении).

В качестве измеряемого параметра был выбран показатель преломления (ПП) сосуществующих фаз и мениска на границе жидкость-пар. Измерения производились в трех бинарных системах перфтордекалин-гептан (ПФД-Г), искусный ангидрид-пентан и метанол-гептан в интервале температур выше и ниже критической точки. Выбранные смеси имеют следующие различия: система ПФД-Г состоит из неполярных компонент, ПФД имеет большую плотность, низкий ПП, низкое значение поверхностного натяжения (см. Табл. 1).

Таблица 1

T=20°C	ПФД	Гептан	УА	Пентан	Метанол
ρ , г/см ³	1,945	0,683	1,081	0,626	0,7915

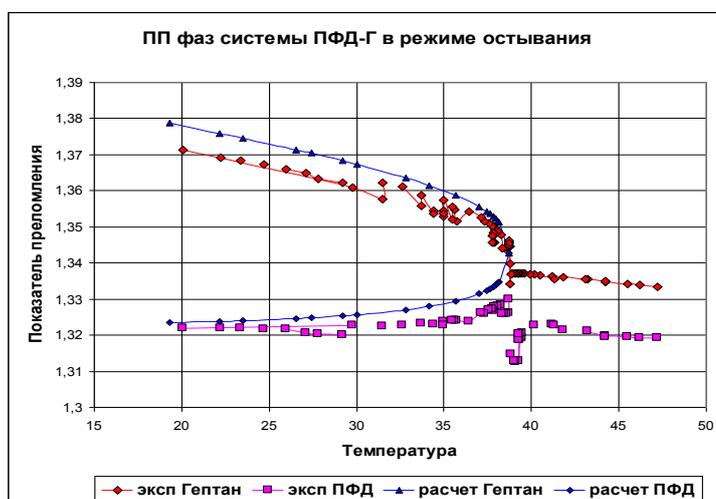
δ, дин/см	20,29	10	32,65	16,09	22,55
N	1,3104	1,3876	1,3904	1,3574	1,3286

В системе УА-П уксусный ангидрид – полярная жидкость, пентан – неполярный компонент с более низкими ПП и поверхностным натяжением, аналогичная ситуация наблюдается и в системе метанол-гептан, в которой метанол является полярным компонентом. Следовательно, в системе УА-П поверхностный слой должен насыщаться из верхней фазы, тогда как в системе ПФД-Г вещество должно поступать из нижней фазы, следовательно, этот процесс связан с возможными диффузионным или конвективным механизмами образования адсорбционного слоя.

Методика измерения и образцы.

Система измерения ПП рефрактометра Пульфриха ИРФ-23 была изменена в соответствии с потребностями эксперимента. Было произведено одновременное измерение ПП при фиксированной температуре в двух объемных и поверхностной фазах бинарной системы. Падающий свет ($\lambda=6328\text{\AA}$) проходит в веществе вдоль вертикальной стенки кюветы, по другую сторону которой расположена измерительная призма, находящаяся в оптическом контакте со стенкой кюветы. Предварительно с помощью данной схемы были измерены ПП чистых веществ, и полученные данные совпали с табличными значениями в пределах погрешности.

Для исследования использовались цилиндрические кюветы с плоскопараллельными окнами. Образцы критической концентрации изготавливались точным взвешиванием с последующим обезпыливанием методом многократной перегонки. На рисунке показаны результаты измерения ПП в системе ПФД-Г.



В нашей работе было показано:

- что с помощью метода рефрактометрии возможно наблюдать ПП поверхностного слоя в бинарных системах, следовательно изучать критическую адсорбцию в жидких бинарных системах.
- Для двух систем (ПФД-Г и УА-П) были измерены ПП на границе жидкость-пар и зафиксировано наличие критической адсорбции. Установлено, что в системе ПФД-Г наблюдается отчетливое упорядочение в поверхностном слое в узком интервале температур выше критической точки. Для системы УА-П явного адсорбционного слоя, содержащего компонент с более низким поверхностным натяжением, не обнаружено. В системе М-Г есть признаки наличия двухфазного поверхностного слоя. Получена особенность в поведении кривой сосуществования вблизи критической точки.

Список литературы.

1. A J Bray and M A Moore// J. Phys. A: Math. Gen.1977 V.10.№11. P.1927
2. Долинный А.И., Огарев В.А.// Успехи Химии 1988г. Т. LVII №11 с.1769
3. M.R. Moldover and J.W. Schmidt// Physica 12D. Gen 1984. P.351

Формирование пространственно-разветвленных структур при золь-гель переходе в коллоидном растворе**С.О. Забегаяев**

Аспирант

Казанский (Приволжский) федеральный университет, физический факультет, Казань

E-mail: szabegaev@yandex.ru

В работе выполнено моделирование молекулярной динамики коллоидного раствора, частицы которого взаимодействуют через потенциал ДЛВО (Дерягин-Ландау-Вервей-Овербек). Вычисляются и анализируются зависимость радиуса гирации от размера кластеров и распределение кластеров по размеру при различных значениях температуры и объемной плотности. С использованием фрактального формализма исследовано изменение структурных свойств кластеров при быстром охлаждении. Полученные структуры при золь-гель переходе хорошо согласуются с наблюдениями конфокальной микроскопии.

Компьютерное моделирование молекулярной динамики выполнено для бинарной микстуры коллоидного геля (50% частиц i -типа и 50% частиц j -типа). Исследуемая система состояла из $N = 10976$ частиц, распложенных в кубической ячейке с периодически граничными условиями. Взаимодействие частиц осуществлялось с помощью Дерягина-Ландау-Вервей-Овербека (ДЛВО) потенциала, где наряду с силами Ван-дер-Ваальса частицы испытывают дальнедействующее электростатическое отталкивание [1,2]:

$$V_{AB} = \varepsilon \left[C_1 \left(\frac{\sigma_{AB}}{r} \right)^{36} - C_2 \left(\frac{\sigma_{AB}}{r} \right)^6 + C_3 \frac{e^{-r/\xi}}{r/\xi} \right]. \quad (1)$$

Здесь $C_1 = 3.56$, $C_2 = 7.67$, $C_3 = 36.79$, $\xi = 0.49$ и $\sigma_{AB} = (\sigma_A + \sigma_B)/2$ [3-5]. При выполнении расчетов мы пренебрегаем взаимодействиями частиц на расстояниях, превышающих $r_c = 3.5\sigma_i$. Для интегрирования уравнения движения частиц был использован алгоритм Верле в скоростной форме [6] с временным шагом $\Delta\tau = 0.01\tau_0$ ($\tau_0 = \sqrt{m\sigma_i^2/\varepsilon}$, где m – масса частицы) в каноническом ансамбле (с термостатом Нозе-Гувера) [7]. Система рассматривалась при различных температурах в диапазоне от $T = 0.4\varepsilon/k_B$ до $T = 0.05\varepsilon/k_B$ и при объемной плотности $\varphi = \pi\sigma^3 N/6L^3 = 0.13$.

Расчеты выполнялись для временного интервала в $1.1 \cdot 10^7$ временных шагов $\Delta\tau$. При этом 10^5 шагов было выполнено для приведения системы в состояние термодинамического равновесия и 10^6 временных шагов было использовано для вычисления временных корреляционных функций.

Обнаружение кластеров в исследуемой системе осуществлялось на основе критерия Стиллинджера [8], в соответствии с которым две частицы принадлежат одному кластеру, если расстояние между ними $r \leq 1.4\sigma_A$.

Исследованы особенности поведения коллоидной системы вблизи порога перколяции, а также найдены критические термодинамические параметры, при которых впервые появляется перколяционный кластер. Обнаружено, что фрактальная размерность, а следовательно, и структура кластеров при быстром охлаждении претерпевают изменения. Причем при температурах, близких к перколяционному переходу, в зависимостях радиуса гирации от размера кластера можно выделить три различных участка. На первом участке, в области малых размеров частиц, происходит уменьшение значения фрактальной размерности D_β , обусловленное формированием структур с ярко выраженной анизотропией формы. На втором

участке, в области $10 \leq S < 10^2$, где S размер кластера, отчетливо прослеживается влияние начальных параметров дисперсной фазы на структуру уже сформировавшихся агрегатов. И, на третьем участке, в области $S > 10^2$, кластерные структуры – полидисперсны как по размеру, так и по форме.

Кроме этого, при анализе набора локально устойчивых конфигураций установлено, что спирали Бернала являются характерным, но не единственно возможным примером цепочечной структуры: при увеличении размера кластера энтропийно выгодным оказывается “сшивание” отдельных цепочек в разветвляющиеся структуры. В пределе ячейки моделирования они формирует единственный макроскопический кластер геля. Таким образом, пространственно-разветвленные структуры можно рассматривать как предельный результат направленной кластер-кластерной агрегации при быстром охлаждении системы.

Работа поддержана фондами РФФИ (грант № 92-02-91053-НЦНИ-а, № 08-02-00123-а).

Литература

1. Дерягин Б.В., Ландау Л.Д. // ЖЭТФ. 1945. Т. 15. Вып. 11. С. 663.
2. Israelachvili J. N. Intermolecular and Surface Forces. London: Academic Press, 1985. P. 296.
3. Coniglio A., De Arcangelis L., Del Gado E., Fierro A., Sator N. // J. Phys.: Condens. Matter. 2004. Vol. 16. №. 42. P. 4831.
4. De Candia A., Del Gado E., Fierro A., Sator N., Coniglio A. // Physica A. 2005. Vol. 358. P. 239.
5. De Candia A., Del Gado E., Fierro A., Sator N., Tarzia M., Coniglio A. // Phys. Rev. E. 2006. Vol. 74. P. 010403.
6. Söderström O., Dahlborg U., Davidovič M. // Phys. Rev. A. 1983. Vol. 27. P. 470.
7. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press, 2002. P. 408.
8. Stillinger F.H., Weber T.A. // Phys. Rev. B. 1985. Vol. 31. P. 5262.

позволял контролировать наличие стекающей пленки жидкости на ней. Отбор №1 располагался против блока С, но на 670 мм ниже отбора №2 и позволял определять наличие вторичного срыва влаги в паровое пространство.

Для определения влажности пара использовался метод дросселирования из двухфазной области в область перегретого пара.

В ходе испытаний были получены влажности отсепарированного пара СПП-500-1. На рис.2 в качестве примера представлены результаты для СПП-74. Анализ полученных данных показывает, что распределение влаги по периметру аппарата во всех четырёх СПП носит равномерный характер, величина влажности колеблется в интервале (0,4...0,6) %. Значения влажности у блока С (отборы №1, №2) показали также равномерное распределение влажности по высоте парового пространства. Отбор №6, расположенный вблизи стенки, не показал повышенной влажности, что свидетельствует об отсутствии стекающей жидкости. По результатам испытаний среднее значение влажности по всем четырём СПП составило ~0,5 % и близко к проектному.

Измерения температур в ПК. Пароперегреватель СПП-500-1 содержит две ступени перегрева. Теплообменная поверхность выполнена жесткотрубных теплообменников – модулей. I ступень расположена в периферийной части поперечного сечения аппарата. Греющий пар (ГП) от двух входных камер по трубам раздается по модулям и конденсируется в межтрубном пространстве последних. В силу особенностей трассировки труб разводки от входных камер к модулям, расположенных по периметру аппарата, их длина различается в несколько раз. В результате расходы ГП в разных группах модулей различны. Часть перегревательных блоков подтоплена. Это приводит к исключению части поверхности из теплообмена, что вызывает разверку температур по периметру ПК. Колебания уровня конденсата способствуют повреждению модулей и труб разводки I ступени, что и наблюдается в действительности.

Для оценки работы СБ и модулей I ступени по периметру корпуса ПК были установлены термометры сопротивления с длиной защитной гильзы 400 мм. В корпусе СПП-71, СПП-73 вваривалось по 4 бобышки; в СПП-72, СПП-74 – по 5 бобышек.

На рис.3 приведены результаты измерения температур в ПК для СПП-74. Неравномерность перегрева пара по модулям, связанная с различной длиной линий подвода ГП, устранима методом

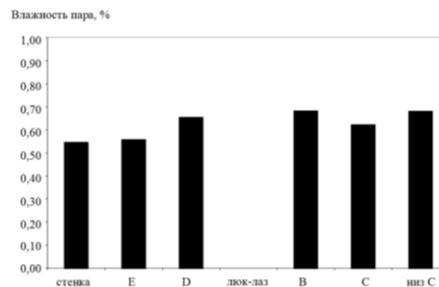


Рис.2. Результаты определения влажности для СПП-74

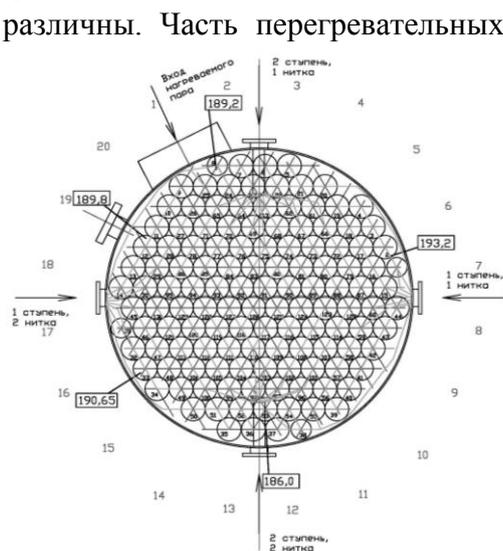


Рис.3. Температура нагреваемого пара в ПК СПП-74: значения указаны в прямоугольных рамках, °С

шайбования труб разводки.

Измерения проводились на IV блоке ЛАЭС группой специалистов НПО ЦКТИ (М.А. Готовский, М.Я. Беленький, М.А. Блинов), ЛАЭС (Г.А. Кайсин) с участием автора.

Выводы.

1. Разработанная система определения влажности отсепарированного пара по периметру парового пространства и замер температурных полей в ПК обеспечили возможность выполнения детального анализа исследуемых процессов.
2. Результаты определения влажности свидетельствуют, что благодаря проведенной модернизации путем замены СБ старой конструкции на блоки с жалюзийными пакетами "Powervane" и изменения схемы входа пара в СБ удалось устранить неравномерность распределения влажности по периметру и высоте парового пространства за СБ и довести её значения до величин, близких к проектным.
3. Не обнаружено влияния на величину влажности особенностей СБ: «продуваемые» блоки, блоки со срезанными гидрозатворами и блоки, снабженные гидрозатворами.
4. Обобщение результатов замеров температуры в ПК показало, что аппроксимирующие кривые носят бимодальный характер. Такая форма кривых обусловлена тем, что для групп модулей с более длинными линиями подвода расход ГП оказывается меньше, чем для коротких, и часть поверхности оказывается выключенной из теплообмена.
5. Результаты расчетов показывают, что дальнейшее повышение температуры нагреваемого пара обеспечит шайбование труб подвода ГП, которое приведет к выравниванию распределения ГП. Предполагается, что эта же мера уменьшит повреждаемость перегревателей модулей и труб разводки.

Литература

1. Гредасов П.О. Модернизация сепараторов-пароперегревателей СПП-500-1 турбоустановок Ленинградской АЭС/Международн. молодежн. научн. конференция «Полярное сияние», сборник тезисов докладов.—М: МИФИ, 2009.—С.63—66.