Эта часть работы выложена в ознакомительных целях. Если вы хотите получить работу полностью, то приобретите ее воспользовавшись формой заказа на странице с готовой работой:
https://stuservis.ru/diplomnaya-rabota/192377

Тип работы: Дипломная работа

Предмет: Физика

Оглавление
Введение 3
1 Математическая модель 5
1.1 Обзор литературы 5
1.2 Уравнение ланжевеновской динамики наночастиц 10
2 Численное моделирование задачи о диффузии наночастиц в жидкости 16
1.1 Постановка задачи 16
2.2 Концентрационный профиль и коэффициент диффузии наночастиц 20
Заключение 24
Список литературы 25

Суспензии, содержащие макроскопические частицы, были впервые синтезированы в 30-х годах прошлого века [1-2]. Частицы, в данном случае представляли собой твердую дисперсную фазу, а жидкость – дисперсную среду. Средний размер частиц составляет порядка 10 нм в диаметре. В качестве жидкости используется вода или органические жидкости [3]. Броуновское тепловое движение поддерживает взвешенные частицы, не давая им осесть под влиянием гравитационного поля, а в случаем магнитных частиц – неоднородного магнитного поля. Специальный слой молекулярного покрытия из поверхностно-активных веществ (ПАВ) предохраняет частиц от слипания друг с другом. Концентрация частиц составляет ~ 1023.
Основными типами взаимодействия между частиц являются следующие взаимодействия: Ван-дер-Ваальсовы, стерические, гидродинамические и магнитодипольные, в случае магнитных частиц. Роль Ван-дер-Ваальсова взаимодействия существенна на малых расстояниях между поверхностями частиц. Поэтому, нестабилизированные коллоидные частицы при плотном контакте коагулируют, образуя крупные кластеры. Защитные оболочки из ПАВ действую подобно амортизаторам, создавая дополнительный потенциальный барьер, препятствующий сближению частиц на расстояние, достаточное для необратимой коагуляции. В этом и состоит механизм стерического отталкивания. Разумеется, даже в этом случае между частицами сохраняется слабое изотропное притяжение между частицами, которое возрастает с увеличением размеров частиц. Запишем простейший вариант учета стерического взаимодействия – парного потенциала твердых сфер:

(1.1)

где - расстояние между частицами.
Гидродинамические взаимодействия обусловлены возмущением вязкой несущей среды коллоидной частицей при движении в этой среде, которое, в свою очередь, влияет на движение соседних частиц. Точный учет гидродинамического взаимодействия является сложной задачей как для теоретического, так и для численного исследования. Данные взаимодействия важно учитывать при изучении кинетики частиц и поведения суспензии при нестационарных внешних воздействиях, но при изучении равновесных систем ими можно пренебречь [4].
Для магнитных частиц, которые можно представить однородно намагниченными сферическим частицами, магнитодипольное взаимодействие между ними описывается парным потенциалом:

(1.2)

Для количественной характеристики интенсивности магнитодипольных взаимодействий введем безразмерный параметр взаимодействий

(1.3)

где - гидродинамический диаметр частицы; - диаметр магнитного ядра; - ширина твердого немагнитного слоя порядка кристаллической решетки частицы; - длина молекулы ПАВ (нм). Физический смысл параметра (1.3) заключается в соотношении магнитодипольной энергии взаимодействия пары частиц к энергии броуновского теплового движения.

Простейшая модель, в рамках которой проявляются все указанные взаимодействия – модель твердых дипольных сфер [5]. Полная энергия взаимодействия между каждой парой частиц описывается потенциалом (1.1), а для магнитных частиц – суммой потенциалов (1.1) и (1.2) [6-7].

Важно отметить, что количественное сопоставление результатов теоретических и численных исследований модели твердых дипольных сфер с экспериментами осложнено такими явлениями, как объемного сжатия жидкой матрицы и возрастания намагниченности насыщения материала частицы при понижении температуры , поскольку является функцией .

Присутствие силовых полей вызывает направленный дрейф коллоидных частиц в жидкости. Основным механизмом дрейфа для немагнитных частиц является седиментация – осаждение частиц в гравитационном поле, а для магнитных частиц – магнитофорез, или движение частиц в направлении градиента магнитного поля. Процессом, препятствующему дрейфу частиц в отсутствии конвективных потоков является гравитационная броуновская диффузия, стремящаяся выровнять концентрацию частиц. Процессы массопереноса в вязкой жидкости являются довольно медленными. В зависимости от величины внешних полей и размеров частиц, распределение частиц может сохраняться от нескольких дней до нескольких месяцев [8]. Но стечением времени распределение становится неоднородным. Например, дрейф частиц под влиянием сильных градиентных полей приводит к нелинейному изменению и перепаду давления с течением времени [9-11].

Установление точного распределение частиц в некотором объеме жидкости в некоторый момент времени решения краевой задачи, включающей уравнения массопереноса дисперсной фазы, учитывающей основные механизмы переноса частиц [12-15]. В большинстве работ решение поставленной краевой задачи реализуется в приближении разбавленных растворов [16]. В этом случае задача существенно упрощается и стационарное решение уравнения массопереноса может быть получено аналитически [17-18]. Но в области высоких и умеренных концентраций частиц роль межчастичных взаимодействий становится существенной и ей нельзя пренебрегать [14].

Список литературы

1. Кузнецов А.А. Процессы массопереноса и структурообразования в суспензии магнитных наночастиц: дисс…на соиск. степени канд. ф.-м. н.: 01.02.05 / Кузнецов Андрей Аркадьевич, Пермь, 2016. – С. 11-44.
2. Bitter F. On in homogeneities in the magnetization of ferromagnetic materials // Physical review. — 1931. — Vol. 38, no. 10. - P. 1903. 3. Rosensweig R.E. Ferrohydrodynamics / R.E. Rosensweig. - New York : Cambridge University Press. - 1985. – C. 25.
4. Hydrodynamic Interactions in Colloidal Ferrofluids: A Lattice Boltzmann Study / E. Kim [et al.] // The Journal of Physical Chemistry B. - 2008. - Vol. 113, № 12. - P. 3681–3693.
5. Elmova E. A., Ivanov A. O., Camp P. J. Thermodynamics of dipolar hard spheres with low-to-intermediate coupling constants // Physical Review E. - 2012. - Vol. 86, № 2. - P. 021126.
6. Cebers A. O. Thermodynamic stability of magnetofluids // Magnetohydro-dynamics. - 1982. - Vol. 18. - P. 137–142.
7. Морозов К.И. Термодинамика магнитных жидкостей // Известия АН СССР, сер. физ. - 1987. - Т. 5 1 , № 6. - С . 1073-1080.
8. Шлиомис М. И. Магнитные жидкости // Успехи физических наук. - 1974. - Т. 112, № 3. - С. 427—458.
9. Taketomi S. Motion of ferrite particles under a high gradient magnetic field in a magnetic fluid shaft seal // Japanese Journal of Applied Physics. - 1980. - Vol. 19, № 10. - P. 1929.
10. Krakov M. S., Nikiforov I. V. Influence of the shaft rotation on the stability of magnetic fluid shaft seal characteristics // Magnetohydrodynamics. - 2008. - Vol. 44, № 4. - P. 401-408.
11. Krakov M. S., Nikiforov I. V. Effect of diffusion of magnetic particles on the parameters of the magnetic fluid seal: A numerical simulation // Magnetohydrodynamics. - 2014. - Vol. 50, № 1. - P. 35–43.
12. Blums, E.Y. - Magnetic fluids / E.Y. Blums, A.O. Cebers, M.M. Maiorov. - Berlin: Walter de Gruyter. - 1997. - 416 p.
13. Influence of Brownian diffusion on statics of magnetic fluid / V.G. Bashtovoi [et al.] // Magnetohydrodynamics. - 2007. - Vol. 43. - P. 17–26.

14. Pshenichnikov A.F., Elfimova E.A., Ivanov A.O. Magnetophoresis, sedimentation, and diffusion of particles in concentrated magnetic fluids // The Journal of Chemical Physics. - 2011. - Vol. 134, № 18. - P. 184508.
15. Pshenichnikov A. F.,Ivanov A. S.Magnetophoresis of particles and aggregates in concentrated magnetic fluids // Physical Review E. - 2012. - Vol. 86, № 5. - P. 051401.
16. The effect of magnetophoresis and Brownian diffusion on the levitation ofbodies in a magnetic fluid / V. Bashtovoi [et al.] // Magnetohydrodynamics. - 2008. - Vol. 44. - P. 121–126.
17. Ivanov A.S., Pshenichnikov A.F. Magnetophoresis and diffusion of col-loidal particles in a thin layer of magnetic fluids // Journal of Magnetismand Magnetic Materials. - 2010. - Vol. 322, № 17. - P. 2575–2580.
18. Ivanov A.S., Pshenichnikov A.F. Dynamics of magnetophoresis in delute magnetic fluids //Magnetohydrodynamics. - 2010. - T.46, № 2. - C.125-136.
19. Batchelor G. K. Brownian diffusion of particles with hydrodynamic interaction // Journal of Fluid Mechanics. - 1976. - Vol. 74, № 01. - P. 1–29.
20. Batchelor G. K. Sedimentation in a dilute dispersion of spheres // Journal of fluid mechanics. - 1972. - Vol. 52, № 02. - P. 245–268.
21. Batchelor G. K. Sedimentation in a dilute polydisperse system of interacting spheres. Part 1. General theory // Journal of Fluid Mechanics. - 1982. - Vol. 119. - P. 379–408.
22. Sedimentation of interacting nanoparticles / A. MeZulis [et al.] // Magnetohydrodynamics. - 2013. - Vol. 49, № 3/4. - P. 416–420.
23. Biben T., Hansen J.P. Sedimentation equilibrium in concentrated charge-stabilized colloidal suspensions // Journal of Physics: Condensed Matter. - 1994. - Vol. 6, 23A. - A345.
24. Biesheuvel P.M., Lyklema J. Sedimentation–diffusion equilibrium of binary mixtures of charged colloids including volume effects // Journal of Physics: Condensed Matter. - 2005. - Vol. 17, № 41. - P. 6337.
25. Buevich Y.A., Zubarev A.Y., Ivanov A.O. Brownian diffusion in concentrated ferrocolloids // Magnetohydrodynamics. - 1989. - Vol. 25, № 2. - P. 172–176.
26. Иванов А.О. Фазовое расслоение магнитных жидкостей: дис....д-ра физ.-мат.наук: 01.04.14 / А.О. Иванов, Екатеринбург,1998. – 295 с.
27. Forced Rayleigh experiment in a magnetic fluid / J.C. Bacri [et al.] // Physical review letters. — 1995. — Vol. 74, № 25. — P. 5032.
28. Transient grating in a ferrofluid under magnetic field: Effect of magneticinteractions on the diffusion coefficient of translation / J.C. Bacri [et al.] // Physical Review E. — 1995. — Vol. 52, № 4. — P. 3936.
29. Sedimentation equilibria in polydisperse ferrofluids: critical comparisonsbetween experiment, theory, and computer simulation / E. A. Elfimova [etal.] // Soft matter. — 2016. — Vol. 12, № 18. — P. 4103–4112.
30. Alle, M.P. Computer simulation of liquids / M.P. Alle, D.J. Tildesley. — Oxford : Clarendon Press. - 1987. – P. 50.
31. Wang Z., Holm C., Müller H.W. Molecular dynamics study on the equilibrium magnetization properties and structure of ferrofluids // Physical Review E. — 2002. — Vol. 66, № 2. — P. 021405.
32. Parisi G. Statistical field theory / G. Parisi. — Reading, MA: Addison-Wesley. - 1988. – P. 101.
33. Particle dynamics modeling methods for colloid suspensions / D. S. Bolin-tineanu [et al.] // Computational Particle Mechanics. — 2014. — Vol. 1, № 3. — P. 321–356.
34. Brady J. F.,Bossis G.Stokesian dynamics // Annual review of fluid mechanics. — 1988. — Vol. 20. — P. 111–157.
35. Grønbech-Jensen N., Farago O. A simple and effective Verlet-type algorithm for simulating Langevin dynamics // Mol. Phys. — 2013. — T.111, № 8. —C. 983—991.
36. Grønbech-Jensen N., Hayre N.R., Farago O. Application of the G-JF discrete-time thermostat for fast and accurate molecular simulations // Comput. Phys. Commun. — 2014. — T.185, № 2. — C.524—527.
37. Structural-acoustic analysis of a nanodispersed magnetic fluid / V. M. Polunin [et al.] // Russian Physics Journal. — 2011. — Vol. 54, № 1. —P. 9–15.
38. Nyland L., Harris M., Prins J. Fast n-body simulation with cuda // GPUgems. — 2007. — T.3, № 1. — C.677—696.
39. Klapp S. H. L., Schoen M. Spontaneous orientational order in confined dipolar fluid films // The Journal of Chemical Physics. — 2002. — Vol.117, № 17. — P. 8050–8062.
40. Snook I. K., Henderson D. Monte Carlo study of a hard-sphere fluid neara hard wall // The Journal of Chemical Physics. — 1978. — Vol. 68, № 5. — P. 2134–2139.
41. Russel W.B. The dynamics of colloidal systems / W.B. Russel. - Madison: University of Wisconsin Press. - 1987. — 119 p.
42. Reed C.C., Anderson J.L. Hindered settling of a suspension at low Reynolds number // AIChE Journal. — 1980. — Vol. 26, № 5. — P. 816–827.
43. Ladd A.J.C. Hydrodynamic transport coefficients of random dispersionsof hard spheres // The Journal of Chemical

Physics. — 1990. — Vol. 93, № 5. — P. 3484–3494.
44. Pshenichnikov A.F., Burkova E.N. Effect of demagnetizing fields on par-ticle spatial distribution in magnetic fluids // Magnetohydrodynamics. — 2012. — Vol. 48, № 3. — P. 503–514.
45. Пшеничников А.Ф., Буркова Е.Н. О силах, действующих на постоян-ный магнит, помещенный в прямоугольную полость с магнитной жидкостью //Вычислительная Механика Сплошных Сред. — 2014. — Т.7, № 1. — С. 5—14.
46. Carnahan N. F., Starling K. E. Equation of state for nonattracting rigidspheres // The Journal of Chemical Physics. — 1969. — Vol. 51, № 2. —P. 635–636.
47. Wolde P.R. ten, Oxtoby D.W., Frenkel D. Chain formation in homogeneous gas–liquid nucleation of polar fluids // The Journal of chemicalphysics. — 1999. — Vol. 111, № 10. — Pp. 4762–4773.
48. Van Workum K., Douglas J. F. Equilibrium polymerization in the Stock-mayer fluid as a model of supermolecular self-organization // Physical Review E. — 2005. — Vol. 71, № 3. — P. 031502.
49. Розенбаум В.М., Огенко В.М., Чуйко А.А. Колебательные и ориентационные состояния поверхностных групп атомов // Успехи физических наук. — 1991. — Т.161, № 10. — С.79—119.
50. Магнитное упорядочение в магнитной жидкости с квази твердыми агрегатами / Ю.И. Диканский [идр.] // Магнитнаягидродинамика. — 1997. —Т.33, № 2. — С.243.
51. О возможности магнитного упорядочения в коллоидных системах одно¬доменных частиц /Ю.И. Диканский [и др.]// Журнал технической физики.—2012. — Т.82, № 5.— С.135—139.
52. Буркова Е.Н. Пространственная сегрегация частиц в концентрированной магнитной жидкости: численное моделирование: дис....канд. физ.-мат. наук: 01.02.05 / Е.Н. Буркова. - Пермь, 2014. — 110с.
53. SciPy: Open source scientific tools for Python / E. Jones, T. Oliphant, P. Peterson, [et al.]. — 2001 [Электронный ресурс]. - URL: http ://www.scipy.org (дата обращения 10.06.2021).
54. Камилов И.К., Муртазаев А.К., Алиев Х.К. Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло //Успехи физических наук. — 1999. — Т.169, № 7. — С.773—795.
55. Bartke J. Computer Simulation of the Stockmayer Fluid: PhD thesis / Bartke J Jörg. — Wuppertal: Bergische Universität Wuppertal. - 2008. – С.45.
55. Пшеничников А.Ф., Кузнецов А.А. Самоорганизация в квазиодномер-ной системе твёрдых дипольных сфер //Вестник Пермского Университета. Серия: Физика. — 2014. — Т.26, № 1. — С.21—31.
56. Кузнецов А.А., Пшеничников А.Ф. Самоорганизация в квазиодномер-ных системах твёрдых дипольных сфер //Сборник научных трудов IV Всероссийской научной конференции «Физико-химические и прикладные проблемы магнитных дисперсных наносистем» (Ставрополь, 2013). —Ставрополь, 2013. — С.151—156.
57. Кузнецов А.А., Пшеничников А.Ф. Численное моделирование ансамбля твердых дипольных сфер: начальная восприимчивость и ориентационное упорядочение диполей //Сборник научных трудов V Всероссийской на¬учной конференции «Физико-химические и прикладные проблемы маг¬нитных дисперсных наносистем» (Ставрополь, 2015). — Ставрополь, 2015. — С. 169—175.

Эта часть работы выложена в ознакомительных целях. Если вы хотите получить работу полностью, то приобретите ее воспользовавшись формой заказа на странице с готовой работой:
https://stuservis.ru/diplomnaya-rabota/192377