

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОЦІНКА СТРУКТУРНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОРИСТИХ МАТЕРІАЛІВ У ВІРТУАЛЬНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Калюжний О.Б., к.т.н., доц.
Державний біотехнологічний університет
м. Харків, Україна, albokal@btu.kharkov.ua
Платков В.Я., д.ф.-м.н., проф.
Східноукраїнський національний університет
ім. Володимира Даля, м. Київ, Україна

Анотація: Структуру та проникливість пористих матеріалів досліджували з використанням комп'ютерного моделювання в діапазоні пористості від 0 до 99%. Виявлено, що різке збільшення проникливості спостерігається в інтервалі пористості 55–65%, а також показано, що проникливість є ізотропною в усьому діапазоні пористості, що має значення для класифікації матеріалів за їх проникливістю: від низької (0–5%), помірної (5–50%), високої (50–95%) до сверхпористих (95–100%).

Ключові слова: пористий фторопласт-4, проникливість, комп'ютерне моделювання.

Розвиток українського сільського господарства передбачає широке використання стійких до агресивного середовища матеріалів, включаючи пористі полімери. Важливим напрямком у полімерному матеріалознавстві є розробка та вивчення пористих матеріалів на основі політетрафторетилену (PTFE). Високопористі матеріали виготовляються шляхом попередньої підготовки суміші диспергованих пороутворювачів та порошку полімера, за якою слідує таблетування, термообробка та вилуговування пороутворювача. Властивості пористого матеріалу формуються його пористою структурою, яка визначається розмірами та формою частинок пороутворювача, а також розміром та якістю міжчастинкових контактів матеріалу-основи, що в свою чергу залежить від пористості матеріалу (П) [1]. Для отримання пористого матеріалу важливо враховувати, що отриманий матеріал повинен мати високу проникність (Р) та достатню міцність. Проте проникність матеріалу збільшується зі зростанням його пористості, тоді як збільшення пористості знижує міцність матеріалу. Отже, вибір оптимальної пористості матеріалу разом з дисперсністю пороутворювача є важливим аспектом у створенні пористого матеріалу. При вивченні структури пористих матеріалів використовують як методи комп'ютерного моделювання [2], так і експериментальний підхід [1]. Проте для отримання даних про структуру таких матеріалів в широкому діапазоні значень пористості перспективним є метод графічного комп'ютерного моделювання з відтворенням всіх особливостей структурного стану пористого матеріалу та його порової структури.

На рис. 1 представлена програма графічного комп'ютерного моделювання порових структур, що формуються за допомогою пороутворювача. Моделювання пористого матеріалу виконується за таким алгоритмом: пороутворювач моделюється частинками, форма яких може бути квадратною або круглою, при цьому квадратні частинки можуть бути випадково орієнтовані в просторі. Програма на основі заданого розподілу частинок пороутворювача за

розміщення частинок всіх груп утворена порова структура виводиться у полі моделювання. Важливою характеристикою порової структури є зв'язана пористість, тобто сукупність порових каналів, пов'язаних між собою і з однією з бічних граней матеріалу. Програма дозволяє визначити проникність матеріалу, тобто співвідношення зв'язаної пористості до загальної пористості матеріалу. Для отримання усереднених даних про модельну структуру та її параметри, а також максимальних і середньоквадратичних відхилень цих параметрів при фіксованій пористості, програма передбачає режим набору статистичних даних шляхом багаторазового повторення машинного експерименту та його обробки при заданій пористості (діалогове вікно «статистика-1»).

Програма передбачає можливість отримання цих даних не лише для одного значення пористості, а й для багатьох значень у наперед заданому інтервалі її змін (діалогове вікно «статистика-2»). Програма автоматично створює зображення моделювання структур, аналізує їх, отримує зазначений набір параметрів структури у вигляді табличних даних і, в кінцевому підсумку, наводить графік залежності проникності від пористості $P=f(\Pi)$. На основі характеру залежності $P=f(\Pi)$ можна ввести класифікацію пористих матеріалів [3]:

Низькопористі матеріали – матеріали з поверхневою проникністю, для яких прийнятий інтервал значень проникності від 0 до 5%. Така проникність відбувається в інтервалі значень пористості від 0 до ~ 55%.

Середньопористі матеріали – матеріали з глибинною проникністю, для яких прийнятий інтервал значень проникності від 5 до 50%. Діапазон пористості, що відповідає таким значенням проникності, складає приблизно від 55 до 59%. У цьому діапазоні пористості наскрізне протікання практично дорівнює 0.

Високопористі матеріали – матеріали з проникністю від 50 до 95%. При таких значеннях проникності у пористих матеріалів проникність стає наскрізне, тобто вони стають протікаючими. Діапазон пористості, що відповідає таким значенням проникності, складає від ~59 до 65%;

Понадпористі матеріали – матеріали з проникністю, близькою до 100%. Такі значення проникності реалізуються в діапазоні пористості від 65 до 99%.

Досліджено вплив розміру часток пороутворювача на залежність $P=f(\Pi)$. Встановлено, що зі збільшенням розміру часток пороутворювача залежність $P=f(\Pi)$ зміщується в бік великих значень Π , при цьому зазначене зміщення найбільш суттєве в області великих значень проникності.

Список літератури

1. Kalyuzhny A.B., Karpova T.L., Kalyuzhny B.G., Platkov V.Ya. Structure and functional properties of high-porosity material based on Fluoroplast-4. Functional Materials. - 1999. - Vol. 6, №2. - P. 305-309
2. R. Baravalle, L. Scandolo, C. Delrieux, C. Garc'ia Bauza, and E. Eisemann, "Realistic modeling of porous materials," Computer Animation and Virtual Worlds, 2016.
3. Kalyuzhny A.B., Platkov V.Ya. Structure of porous materials and their permeability: determination by computer-aided simulation. Functional Materials. – 2001. – Vol. 8, №1.– P. 90-93.