

Математическое моделирование дисперсных систем и мягкой материи



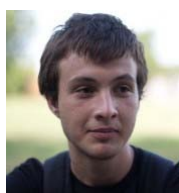
к.х.н. Алексей Вишняков

- Молекулярное и мезоскопическое моделирование сложных молекул
- Предсказание структуры и реологии ПАВ
- Адсорбция и адгезия на твердых поверхностях и в мягких системах
- Термодинамическая устойчивость коллоидов и тонких пленок
- Ведущий ряда коммерческих проектов для американских компаний



д. ф.-м. н. Николай Васильевич Бриллиантов

- Статистическое моделирование агломерации суспензий
- Реология структурированных жидкостей
- Моделирование потоков в гранулярных системах
- Предсказание структуры и механики полиэлектролитных гелей

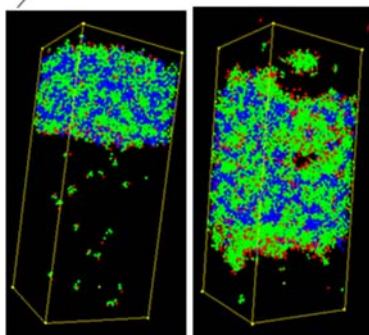
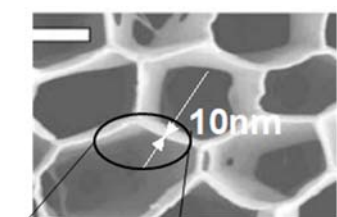


к.ф.-м.н. Сергей Матвеев

- высокопроизводительные расчеты, требующие решений больших систем частных дифференциальных и интегральных уравнений
- уравнения популяционного баланса для проблем кристаллизации в растворах коагуляции эмульсий
- значительный и успешный опыт работы по коммерческим контрактам, в частности по алгоритмам преобразования сигналов для Huawei

Налаженные связи с экспериментальными группами в области самосборки и поверхностной реологии в р-рах полимеров и ПАВ дют возможность для экспериментально-расчетных проектов.

Взаимодействие ПАВ с полимерным гелем (Rutgers Univ – ColgatePalmolive)



Целью проекта были расчеты взаимодействий ПАВ с пленками полуэлектролитных гелей на основе мезоскопических молекулярных моделей. В этих расчетах группы атомов заменяются квазичастицами с короткодействующими потенциалами. Для практического применения необходима простая и эффективная калибровка этих моделей, которые можно было бы передать заказчику. Мы разработали такую методику на основании термодинамических свойств стандартных растворов и проверили ее на широко известных, легко изменяемых и очень чувствительных к параметрам свойствах – СМС и АН. Применение моделей к абсорбции ПАВ пленками

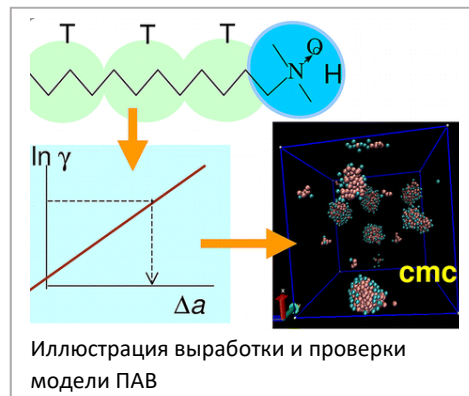


Иллюстрация выработки и проверки модели ПАВ

Карбопола выявило различия в поведении разных промышленных ПАВ в формуляциях моющих средств. Эта работа существенно развила методологию мезоскопического моделирования электролитных систем, которая опубликована (в отличие от результатов для конкретных гелей) и уже реплицирована несколькими большими компаниями. Для моделирования поведения гелей в целом мы применяем макроскопические континуальные модели, разработанные Н.В. Бриллиантовым. [Ссылки: [Vishnyakov et al J. Phys. Chem. Lett., 2013, 4 797](#) [Mao et al J. Phys. Chem. B, 2015, 119 11673](#)]

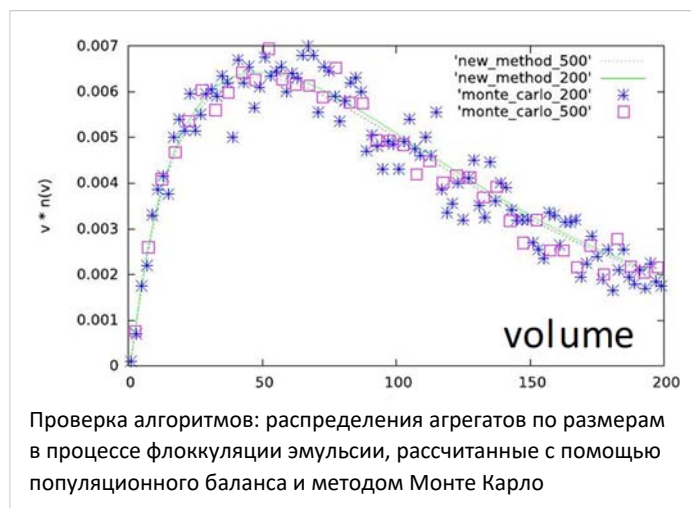
Теоретические основы хроматографии полимеров и наночастиц (Rutgers Univ – Dupont de Nemours)

Два совместных проекта, нацеленные на разработку и совершенствование промышленных методов анализа полимеров и наночастиц методами градиентной хроматографии. Особо трудная задача – разделение по химии или поверхности, то есть все аналиты одного типа (но разного размера) должны покидать колонку в одно время, давая один пик. Для этого предложены нанопористые колонки и колонки со стенками, покрытыми полимерными щетками. Адгезия аналитов определяет скорость

движения и зависит от размеров и химии полимеров и частиц. Промоделировав адгезию методами Монте-Карло и диссипативной динамики, мы предсказали возможность и условия критической точки адгезии – состава растворителя, при котором адгезия становится независимой от размера каждого типа анализита, и анализиты данного типа одновременно покидают колонку. Попутно мы разработали новые статистические методы расчета свободной энергии в полимерных системах. [Ссылки: [Santo et al Langmuir 2018, 34 1481–1496](#); [Rasmussen et al J.Chem.Phys. 2011 135, 214109](#)]

Универсальный солвер уравнений популяционного баланса для процессов агрегации в дисперсных системах

В этом проекте, поддержанном Российским Научным Фондом, были разработаны новые вычислительные подходы к решениям уравнений популяционного баланса и написан пакет высокоэффективных прикладных программ, позволяющий быстро и с высокой точностью их решать. Исторически, кинетические уравнения агрегации впервые были предложены для описания процессов роста коллоидных частиц в растворах и золях. Сейчас этот класс моделей применяется к динамике

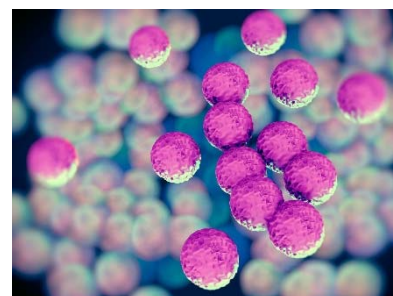


Проверка алгоритмов: распределения агрегатов по размерам в процессе флокуляции эмульсии, рассчитанные с помощью популяционного баланса и методом Монте Карло

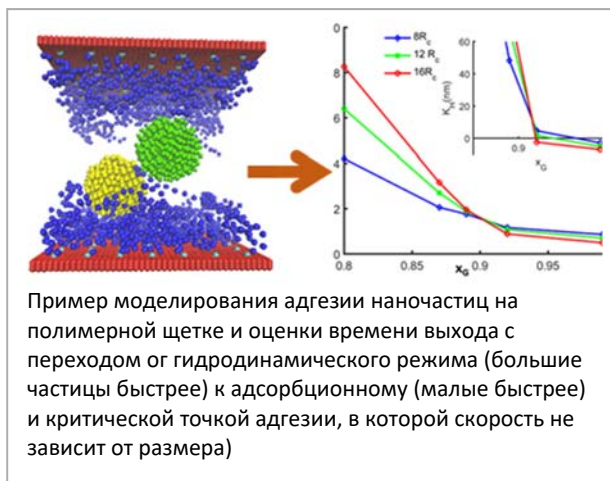
аэрозольных частиц, росту частиц в эмульсионных растворах, процессам флокуляции в фильтрационных установках. Такие вычисления в сложных многокомпонентных системах с разными типами коллоидных частиц весьма затратны, и разработанные при участии С.Матвеева и Н.В.Бриллиантова подходы позволяют применить их к динамике агрегации в косметических эмульсиях и суспензиях с учетом гидродинамических эффектов, в том числе в гелеобразных средах. Методология опубликована в наиболее престижном физическом журнале Physical Review Letters. Результаты также включались в перечень основных достижений ИВМ РАН в 2015 и 2017 годах. Эта фундаментальная работа

Динамическое и статистическое моделирование потоков в гранулярных средах

Гранулярные среды имеют важнейшее значение в процессе производства косметических средств. д.ф.-м.н. Н.В. Бриллиантов возглавлял ряд проектов по усовершенствованию моделирования гранулярных систем, как непосредственно моделируя частицы и силы между ними, так и с помощью континуальных моделей гранулярных потоков. На самом деле, косметическая пудра и частицы в на спутниках Сатурна ведут себя до изрядной степени сходно! [[Schmidt, Brilliantov et al Nature 2008 451 685](#)]. Важным компонентом межчастичных взаимодействий является силы трения и адсорбции.



Первые приводят к замедлению относительного движения частиц, вторые – к образованию агломератов. Агломерация за счет адгезии и разрушение агломератов под действием механических сил определяют распределение частиц по размерам, а следовательно, и механику сыпучих веществ. Моделируя агломерацию, мы можем предсказать зависимость свойств от внешних условий (прежде всего температуры и влажности), изменение качеств гранулированных продуктов в процессе хранения.



Пример моделирования адгезии наночастиц на полимерной щетке и оценки времени выхода с переходом от гидродинамического режима (большие частицы быстрее) к адсорбционному (малые быстрее) и критической точкой адгезии, в которой скорость не зависит от размера)