

Программное обеспечение для расчета поверхностных характеристик жидких сред

И.С. Линьков, Н.М. Антонова, А.И. Симонов

*Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им.
М.И. Платова, Новочеркасск*

Аннотация: Разработано программное обеспечение для оценки поверхностных характеристик жидкостей, растворов и суспензий в среде Microsoft Visual Studio. Модуль с дружественным интерфейсом не требует от пользователя специальных навыков и позволяет за время ~ 1 секунды произвести численный расчет энергетических характеристик жидкости: работы адгезии, когезии, энергии смачивания, коэффициента растекания и сцепления жидкого состава с контактной поверхностью. На примере тестовой жидкости - дистиллированная вода и исходной жидкой разделительной смазки серии Пента-100 продемонстрирован пример расчета смачивания жидкими средами стальной поверхности. Использование предлагаемого модуля позволяет произвести экспресс-оценку совместимости жидких составов с защищаемой поверхностью и представляет интерес для производителей лакокрасочных материалов при контроле качества продукции.

Ключевые слова: программа для ЭВМ, язык программирования C#, смачивание, поверхность, адгезия.

Введение

Термодинамические характеристики жидких сред – поверхностное натяжение и краевой угол смачивания являются макроскопическими проявлениями сложных взаимодействий на контактной границе «жидкость – твердое тело – газ». Они позволяют получить информацию о топологии и химии поверхностей, капиллярных силах [1]. Существует широкий спектр материалов и покрытий, формируемых из растворов, суспензий, функциональные свойства которых в значительной мере обусловлены характером взаимодействия исходных жидких сред с поверхностью. Поэтому значительная часть научных исследований в настоящее время посвящена прогнозированию прочностных свойств покрытий с заданным уровнем эксплуатационных характеристик, с использованием в качестве параметров оценки краевого угла смачивания [2, 3] и работы адгезии жидких составов к поверхности. Так, корреляция углов смачивания с адгезией рассматривается

в работе [4]. В исследовании [5] авторы предлагают прогнозировать дефектообразование в межвитковой изоляции по работе адгезии жидкого пропиточного состава к эмалированному проводу. Сравнение смачиваемости стеклопластика этиловым спиртом и керосином является ключевой позицией в расчете пористости поверхности в подходе, изложенном авторами в работе [6]. Смачивание, как основа гранулирования материалов рассмотрено в работе [7]. Параметрами в предлагаемом подходе служат поверхностное натяжение и адгезия жидких сред к поверхности стеклопластика. Оценка работы адгезии жидкости к поверхности, энергии смачивания, коэффициента растекания на основе величин поверхностного натяжения и краевого угла смачивания позволяет прогнозировать конечную адгезионную прочность формируемых защитных покрытий [8]. Анализ доступных литературных источников показал, что перечисленные параметры оценки поверхностных характеристик жидких составов востребованы довольно часто, но программное обеспечение для численных расчетов авторами работ практически не используется. Следует отметить, что отдельные характеристики - краевой угол смачивания, поверхностное натяжение, поверхностная энергия жидкостей автоматически рассчитываются при наличии у пользователей профессионального аналитического оборудования, например, приборов для измерения краевого угла или тензиометров. Однако стоимость такого оборудования довольно высока, а количество рассчитанных с помощью приборов характеристик недостаточно. С необходимостью уменьшить трудоемкость указанных расчетов авторы данной работы столкнулись при оценке энергетических характеристик жидких антиадгезивов [9].

Цель настоящей работы – разработка программного модуля, позволяющего рассчитать поверхностные характеристики жидких сред для оценки смачивания жидкими составами поверхностей.

Материалы и методы

Оценивали энергетические характеристики и краевой угол смачивания жидких сред к стальной поверхности (сталь 40Х). Использовали разделительную смазку серии Пента-100 и тестовую жидкость – дистиллированную воду. Смазку выбрали из следующих соображений: свойства и низкая дефектность формируемых из жидкого состава покрытий в значительной мере зависят от смачиваемости защищаемой поверхности. Поэтому предварительная оценка энергетических характеристик исходного раствора позволяет прогнозировать качество покрытий [6]. Раствор изготавливали в соответствии с рекомендациями производителя. Изображения сформированных из смазки покрытий получали с помощью микроскопа для металлографии ADFU300 Каменского технологического института (филиала) ЮРГПУ (НПИ) имени М. И. Платова. Краевой угол смачивания (θ) определяли методом «лежащей капли», с помощью разработанной ранее установки [8]. Поверхностное натяжение жидкостей оценивали ($\sigma_{\text{ж}}$) измеряли методом Дю – Нуи [10]. Измерения проводили при температуре (25 ± 1) °С. Рассчитывали работу адгезии $W_{\text{а}}$, энергию смачивания $W_{\text{э}}$, когезии $W_{\text{к}}$, коэффициент растекания S , относительную работу адгезии (сцепление). Расчет производили по формулам:

Работу адгезии рассчитывали по уравнению Дюпре – Юнга:

$$W_{\text{а}} = \sigma_{\text{ж}}(1 + \cos\theta) \quad (1)$$

Энергия смачивания или адгезионное напряжение:

$$W_{\text{э}} = \sigma_{\text{ж}} \times \cos\theta \quad (2)$$

Работа когезии:

$$W_{\text{к}} = 2\sigma_{\text{ж}} \quad (3)$$

Коэффициент растекания:

$$S = W_a - W_k = \sigma_{ж}(1 + \cos\theta) \quad (4)$$

Относительная величина работы адгезии жидкости:

$$Z = \frac{W_a}{W_k} \quad (5)$$

$$\cos\theta = \frac{(d/2)^2 - h^2}{(d/2)^2 + h^2} \quad (6)$$

здесь d и h - диаметр основания и высота капли [6].

Результаты и обсуждение

Для написания программы использован язык программирования C#.

Блок-схема разработанной программы приведена на рисунке 1.

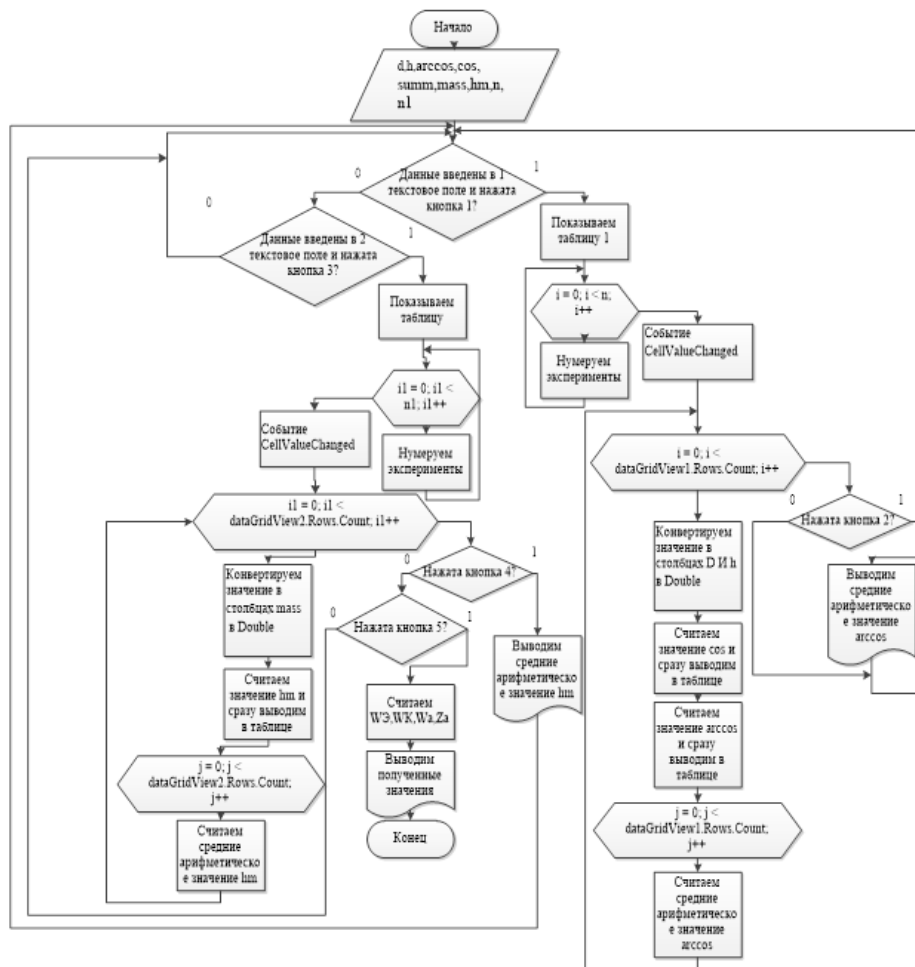
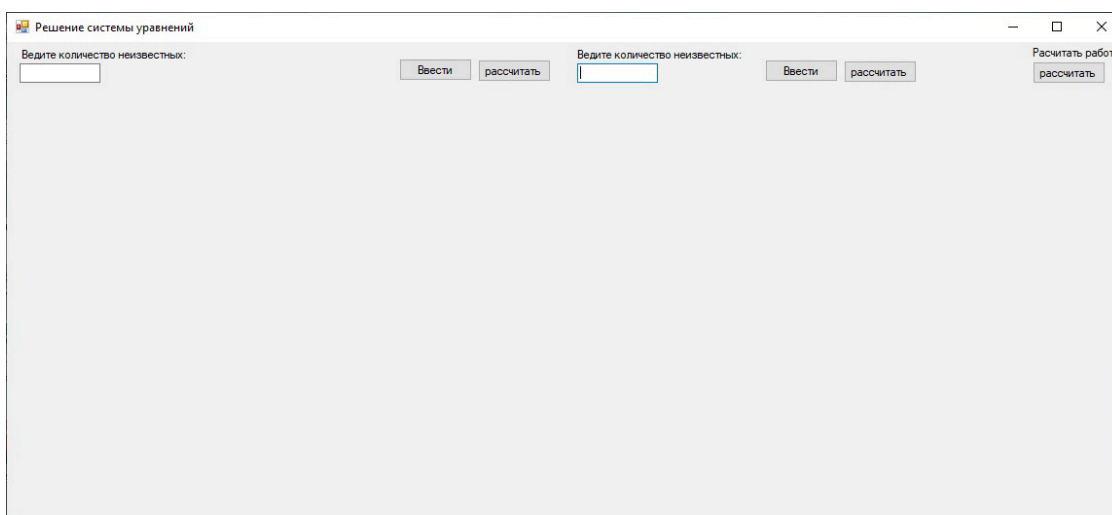
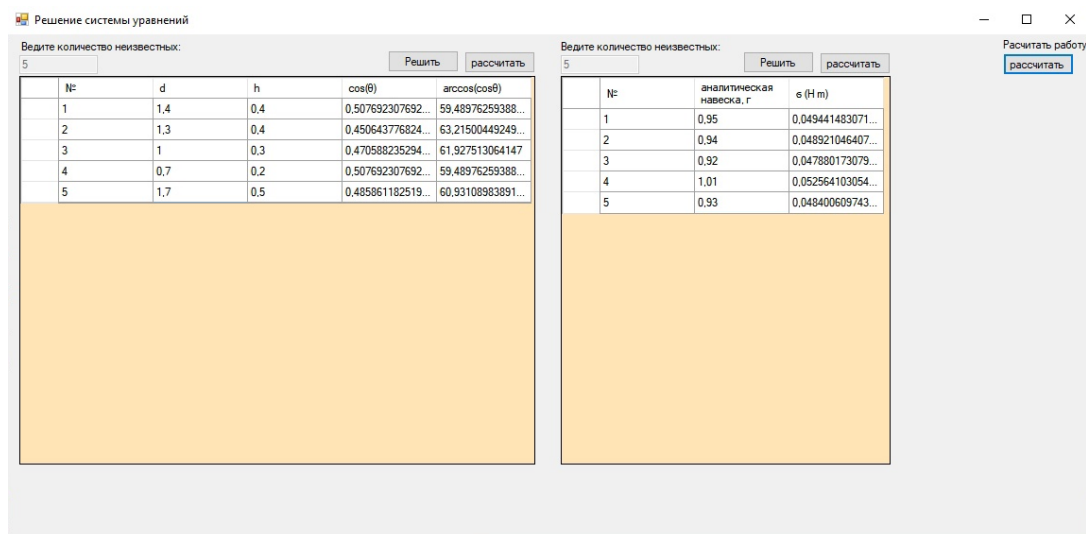


Рисунок 1. Блок-схема программы, разработанная для расчета энергетических характеристик жидких составов

Интерфейс программы состоит из следующих элементов: таблица, заголовок, кнопка, текстовое поле. Пример интерфейса показан на рисунке 2 а. При запуске программы в интерфейсе отсутствуют таблицы для ввода данных. Для отображения таблиц в текстовое поле вводится необходимое количество строк создаваемой таблицы. Затем следует нажать кнопку: «ввести». Пример созданной таблицы представлен на рисунке 2 б.



а



б

Рисунок 2. Стартовый интерфейс (а) и пример созданной таблицы (б), программы для расчета энергетических характеристик жидких составов

Для наблюдения результатов расчетов в реальном времени в элементе управления DataGridView используется событие CellValueChanged. Событие срабатывает, когда пользователь изменяет значение ячейки, после чего событие CellValueChanged запускает соответствующий обработчик. С помощью функции MessageBox, после нажатия кнопки «рассчитать» отображаются результаты численного расчета: работа адгезии W_a , энергия смачивания W_{Σ} , когезии W_k , коэффициент растекания S , сцепление. Пример расчета показан на рисунке 3 а.

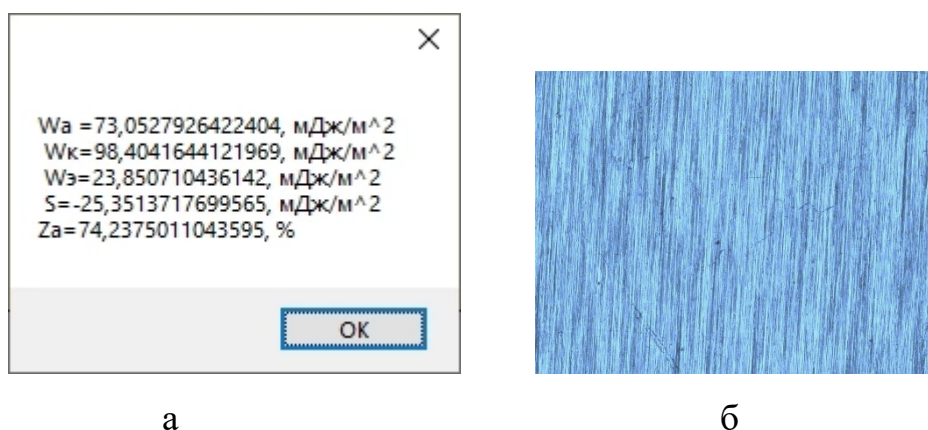


Рисунок 3. Состав Пента-100: пример расчета поверхностных характеристик с помощью разработанной программы - (а), изображение (x5) сформированного покрытия - (б)

В таблице 1 приведены результаты расчета смачивания жидкими средами поверхности стали 40Х.

Таблица 1.

Жидкая среда	$\theta, ^\circ$	$\sigma_{ж},$ МН/м	$W_a,$ мДж/м ²	$W_k,$ мДж/м ²	$W_{\Sigma},$ мДж/м ²	$S,$ мДж/м ²	$Z_a, \%$
--------------	------------------	-----------------------	------------------------------	------------------------------	-------------------------------------	----------------------------	-----------

Вода	75	72,1	90,8	144,2	18,7	-53,3	63
Смазка Пента-100	61	49,2	73,1	98,4	23,8	-25,4	74,2

Краевой угол смачивания водой стальной поверхности и поверхностное натяжение воды при температуре 25°C не противоречат справочным данным. Из таблицы видно, что смачивающая способность смазки Пента-100 выше, чем у воды. Относительно невысокое поверхностное натяжение раствора, краевой угол смачивания характеризуют стальную подложку относительно Пенты – 100 как поверхность, проявляющую гидрофильные свойства. Относительная работа адгезии раствора близка к единице (0,74), что обеспечивает возможность формирования бездефектного покрытия при соблюдении технологических режимов, рекомендованных производителем смазки. На рисунке 3 б приведено изображение покрытия, сформированного из исходного раствора состава Пента – 100. Результаты оптической микроскопии свидетельствуют, что поверхность покрытия морфологически сравнительно однородна, потеков, вздутий не наблюдается.

Заключение

В среде Microsoft Visual Studio разработано программное обеспечение для численных расчетов работы адгезии, когезии, энергии смачивания, коэффициента растекания и относительной работы адгезии жидких сред. Пример численного расчета поверхностных характеристик продемонстрирован на примере разделительной смазки серии Пента-100 и эталонной жидкости – дистиллированной воды.

Программное обеспечение может быть использовано для прогнозирования прочностных свойств покрытий с заданным уровнем эксплуатационных характеристик, формируемых из жидких сред – растворов, суспензий.

Литература

1. Zhao T., Jiang L. Contact angle measurement of natural materials //Colloids and Surfaces B: Biointerfaces. 2018. V. 161. pp. 324-330.
2. Wang S., Liu X., Zhang J., Xu P., Wei M., Liu G., Zhan X., Coyle T. W., Mostaghimi J. Tailoring the wetting behaviors and surface structures of yttrium oxide coatings deposited via different plasma spray processes //Journal of Materials Research and Technology. 2024. Vol. 29. pp. 1924-1936.
3. Sharifi N., Ettouil F. B., Moreau C., Dolatabadi A., Pugh M. Engineering surface texture and hierarchical morphology of suspension plasma sprayed TiO₂ coatings to control wetting behavior and superhydrophobic properties // Surface and Coatings Technology. 2017. Vol. 329. pp. 139-148.
4. Drelich J. W. Contact angles: From past mistakes to new developments through liquid-solid adhesion measurements //Advances in colloid and interface science. 2019. V. 267. pp. 1-14.
5. Леонов А.П., Сапуева А.С. Определение работы адгезии в системе межвитковой изоляции // Науковедение: интернет-журнал. Вып. 5 (16). 2013. С. 1-5.
6. Васильева Е.Д., Иванов А.Н., Стручков Н.Ф., Кычкин А.К. Сравнение смачиваемости стеклопластика этиловым спиртом и керосином для определения открытой пористости // Глобальная энергия. 2022. Т. 28, № 3. С. 53–64. DOI: doi.org/10.18721/JEST.28305.
7. Федотова О.А., Черепанова М.В., Потапов И.С., Пойлов В.З. Исследование смачиваемости пылевидного хлорида калия, содержащего примеси флотореагентов // Инженерный вестник Дона. 2013. № 1. URL: ivdon.ru/magazine/archive/n1y2013/1558.
8. Симонов А. И., Антонова Н. М. Устройство для определения краевого угла смачивания жидкостей на плоских поверхностях //



Инженерный вестник Дона. 2024. № 10. URL:
ivdon.ru/magazine/archive/n10y2024/9599.

9. Антонова Н. М., Линьков И. С., Хохлова А. Д., Симонов А. И. Оценка энергетических характеристик поверхности антиадгезивов для прогнозирования их функциональных свойств // Новые материалы и технологии: порошковая металлургия, композиционные материалы, защитные покрытия, сварка: Материалы 16-й Международной научно-технической конференции, Минск, 22–24 мая 2024 года. Минск: Республиканское унитарное предприятие "Издательский дом "Белорусская наука", 2024. С. 313-316. EDN RWIBES.

10. Фролов Ю. Г. Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы. М.: Химия, 1988. 464 с.

References

1. Zhao T., Jiang L. Contact angle measurement of natural materials. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*. 2018. V. 161. pp. 324-330.
2. Wang S. Liu X., Zhang J., Xu P., Wei M., Liu G., Zhan X., Coyle T. W., Mostaghimi J. *Journal of Materials Research and Technology*. 2024. Vol. 29. pp. 1924-1936.
3. Sharifi N., Ettouil F. B., Moreau C., Dolatabadi A., Pugh M. *Surface and Coatings Technology*. 2017. Vol. 329. pp. 139-148.
4. Drelich J. W. Contact angles: From past mistakes to new developments through liquid-solid adhesion measurements. *Advances in colloid and interface science*. 2019. V. 267. pp. 1-14.
5. Leonov A.P., Sapueva A.S. *Naukovedeniye: internet-zhurnal*. Vyp. 3 (16). 2013. pp. 1-5.



6. Vasilyeva E.D., Ivanov A.N., Struchkov N.F., Kychkin A.K. Globalnaya energiya. 2022. Т. 28, № 3. pp. 53–64. DOI: doi.org/10.18721/JEST.28305.

7. Fedotova O.A., Cherepanova M.V., Potapov I.S., Poilov V.Z. Inzhenernyj vestnik Dona. 2023. № 1. URL: ivdon.ru/magazine/archive/n1y2013/1558.

8. Simonov A. I., Antonova N. M. Inzhenernyj vestnik Dona. 2024. URL: ivdon.ru/magazine/archive/n10y2024/9599.

9. Antonova N. M., Linkov I. S., Khokhlova A. D., Simonov A. I. Novyye materialy i tekhnologii: poroshkovaya metallurgiya, kompozitsionnyye materialy, zashchitnyye pokrytiya, svarka: Materialy 16-y Mezhdunarodnoy nauchno-tekhnicheskoy konferentsii. Minsk. 22–24 maya 2024 goda. Minsk: Respublikanskoye unitarnoye predpriyatiye "Izdatelskiy dom "Belorusskaya nauka". 2024. pp. 313-316. EDN RWIBES.

10. Frolov Yu. G. Kurs kolloidnoy khimii. Poverkhnostnyye yavleniya i dispersnyye sistemy [A course in colloidal chemistry. Surface phenomena and dispersed systems]. M.: Chemistry, 1988. 464 p.

Дата поступления: 25.11.2024

Дата публикации: 2.01.2025