

Для проверки данного вопроса «обработанный» лист был предварительно высушен в течение 10 часов, а затем подвергнут обработке в медной ступке. Сушка зеленого листа была необходима для того, чтобы зеленая масса не влияла на результаты эксперимента.

Измельченный лист разбавили в 0,02 л. дистиллированной воды. Затем дополнительно процедили сквозь сито и провели визуальный осмотр. Невооруженным глазом было видно, что раствор приобрел более мутный вид, выдержка под солнечными лучами показала наличие слабого свечения. Однако это могло быть связано и с явлением рассеяния. Окончательный ответ был получен путем измерения спектров поглощения исследуемого раствора. Измерение спектров поглощения было проведено в диапазоне 350-700 нм. Полученный спектр представлен на рисунке 4. Из рисунка видно, что спектр состоит из полосы поглощения в области 420-430 нанометров. Сравнение с литературными данными подтвердило истинность полученных результатов.

Наблюдаемый результат подтвердил, наше предположение о возможности «вживления» наночастиц в клетки зеленых растений. Однако, судить об абсолютной верности данного метода без последующих исследований, с применением возможностей оптической либо электронной микроскопии и без тщательных измерений люминесцентного излучения на данный момент еще рано.

Заключение

На основе полученных результатов мы можем предварительно утверждать, что использованный в работе метод «обогащения» наночастицами серебра зеленых листьев, может быть применен при выполнении подобных работ. Наночастицы серебра «встраиваются» в расширившиеся поры клеток, об этом свидетельствует результат, полученный при измерений спектров поглощения.

Следующим этапом работ, которые планируются в дальнейшем, это исследование люминесцентных свойств зеленых листьев «обогащенных» наночастицами серебра различной размерности.

Литература:

1. T.A. Taton, C.A. Mirkin, R.L. Letsinger. *Science*, 289, 1757 (2000)
2. Y.C. Cao, R.Jin, C.A. Mirkin. *Science*, 297, 1536 (2002)
3. J.Zhang, J.Malicka, I.Gryczynski, J.R. Lakowicz. *J. Phys. Chem. B*, 109, 7643 (2005)
4. J. A. Creighton, C.G. Blatchford, M.G. Albrecht. *J.Chem. Soc., Faraday Trans.*, 75, 790 (1979)
5. P.C. Lee, D.Meisel. *J.Phys. Chem.*, 86, 3391 (1982)
6. Ravindra S., Murali Mohan Y., Narayana Reddy N., Mohana Raju K. *Fabrication of antibacterial cotton fibres loaded with silver nanoparticles via "Green Approach" // Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects*. 2010. V.367. P.31-40.
7. Begum N.A., Mondal S., Basu S., Laskara R.A., Mandal D. *Biogenic synthesis of Au and Ag nanoparticles using aqueous solutions of Black Tea leaf extracts // Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*. 2009. V.71. P.113-118.
8. Nadagouda M.N., Varma R.S. *Green synthesis of silver and palladium nanoparticles at room temperature using coffee and tea extract // Green Chem*. 2008. V.10. P.859 - 862.

Базарбек М. Карагандинский государственный университет имени академика Е.А.Букетова, группа ТЭК-210, студент
(Научный руководитель – доктор PhD Танашева Н.К.)

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ДАННЫХ ПО РАСЧЕТУ АЭРОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВУХЛОПАСТНОГО ВЕТРОДВИГАТЕЛЯ

Расчетные методы ветродвигателей различного рода аппаратов давно и активно развиваются с впечатляющими результатами. С помощью численного моделирования появилась возможность решать связанную задачу динамики и аэродинамики ветротурбины.

Суть этого метода - это решения нестационарных уравнений Навье-Стокса в мобильных криволинейных координатах, реализованных на основе неявной схемы. В работах разработаны модели ветротурбины и получено прогнозирование производительности ветротурбины и оценки возможностей модели, а также ее аэродинамические характеристики.

Для определения аэродинамических характеристик обтекания ветродвигателя с вращающимися цилиндрами воздушным потоком при малых скоростях потока применялось математическое моделирование. Моделирование осуществлялось с помощью программного комплекса Ansys Fluent. Программный комплекс Ansys Fluent позволяет моделировать течение жидкостей и газов для промышленных задач с учетом турбулентности, теплообмена, химических реакций. К примерам применения Fluent можно отнести задачи обтекания крыла, горение в печах, внешнее обтекание нефтедобывающих платформ, течение в кровеносной системе, конвективное охлаждение сборки полупроводника, вентиляция в помещениях, моделирование промышленных стоков [1-2].

Для численного решения задачи используется метод конечных объемов и нестационарное уравнение Навье-Стокса. Частные производные аппроксимируются со вторым порядком точности, производные по времени - по неявной схеме Эйлера второго порядка. Для расчета и моделирования использован программный пакет ANSYS Fluent. Модель относится к семейству 2-х параметрических моделей турбулентности, содержит уравнения переноса для кинетической энергии турбулентности и ее диссипации.

Были проведены исследования по определению аэродинамических характеристик систем вращающихся цилиндров в лабораторных условиях [3]. Все экспериментальные испытания по определению аэродинамических характеристик выполнялись в аэродинамической трубе Т-1-М. Основные характеристики рабочей части аэродинамической трубы: диаметр – 50 см, длина – 80 см, интенсивность турбулентности – 3%, скорость потока $l \div 25$ м/с.

В настоящей работе рассматривается численное моделирование с двумя вращающимися цилиндрами расположенными линейно друг к другу (рис.2) в рабочей камере аэродинамической трубы. Скорость воздушного потока менялась в диапазоне от 2 до 14 м/с.

Для построения трехмерной модели был задействован программный комплекс Kompas-3D_V15.

На рисунке 1 показана трехмерная модель ветродвигателя с вращающимися цилиндрами.

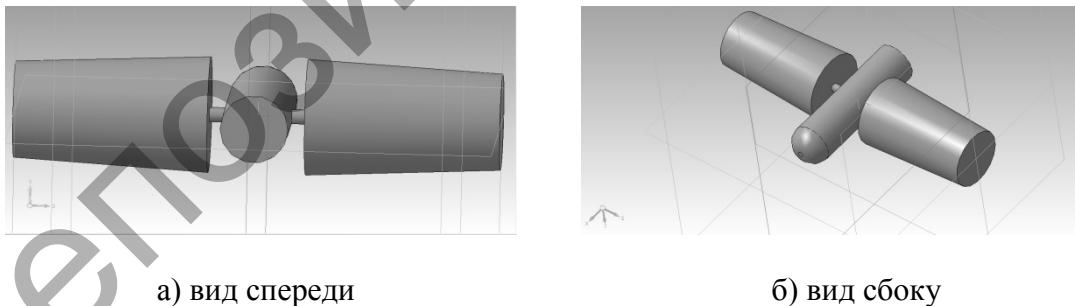


Рисунок 1 – Трехмерная модель ветродвигателя с вращающимися цилиндрами

Лопастей вращающихся цилиндров представляют собой цилиндрические элементы со следующими геометрическими размерами: $D=12$ см, $d=10$ см, $l=20$ см.

Область, окружающая ветродвигателя, соответствует размерам аэродинамической трубы Т-1-М.

Система уравнений, описывающая течение газа представлена в виде [4]:

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} * \nabla) \vec{V} = \vec{F} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{V} \quad (1.1)$$

$$\operatorname{div} \vec{V} = 0 \quad (1.2)$$

Краевые условия. Граничные условия на стенке.

Условие прилипания и не протекания:

$$\vec{V} = 0; \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial k}{\partial n} = 0, \quad \varepsilon_p = \frac{C_\mu^{3/4} \cdot k_p^{3/2}}{\kappa \cdot y_p}. \quad (1.4)$$

где $k = 0,4187$ – постоянная Кармана; индекс P – относится к центру пристенной ячейки разностной сетки.

Граничные условия на входе.

$$U = U_{in}; V = 0. \quad (1.5)$$

Турбулентные параметры потока определяются через задание интенсивности турбулентных пульсаций I и гидравлического диаметра D_{hyd} :

$$k = \frac{3}{2} (I \cdot V_{inlet})^2; \quad \varepsilon = C_\mu^{3/4} \cdot \frac{k^{3/2}}{\ell}; \quad \ell = 0.07 \cdot D_{hyd}. \quad I = 3\% \quad (1.6)$$

Граничные условия на выходной границе:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0. \quad (1.7)$$

Для k - ε модели использовался стандартный рекомендуемый набор эмпирических констант (2.0), который обычно принимается по умолчанию в вычислительных пакетах:

$$C_\mu = 0.09, C_{\varepsilon 1} = 1.44, C_{\varepsilon 2} = 1.92, \sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3. \quad (1.8)$$

Размеры расчетной области брались в соответствии с габаритами аэродинамической трубы.

Конечно-разностная сетка строилась в программе Gambit 2.3.16. Для выбора системы измерения были проведены расчеты для двумерно постановки задачи [5].

Для определения влияния размера разностной сетки (количество ячеек) на определение силы лобового сопротивления треугольной лопасти с помощью используемой модели были проведены расчеты для трех разностных сеток: 1 – 20000 узлов, 2 – 40000 узлов, 3 – 160000 узлов.

В таблице 1 показаны силы лобового сопротивления полученные для малых скоростей ветра в диапазоне от 2 до 6 m/s. Значение C_1 – соответствует силе лобового сопротивления, полученной по используемой модели на сетке в 20000 узлов, C_2 – 40000 узлов, а C_3 – 160000 узлов.

Таблица 1. Сравнение силы лобового сопротивления для различных разностных сеток

скорость сетка	сила лобового сопротивления		
	C_1	C_2	C_3
2	0.12197591	0.11689019	0.11694198
4	0.48873618	0.46832793	0.4683286
5	0.76396827	0.7320603	0.73198883
6	1.1004501	1.0544758	1.0543102

Из таблицы 1 видно, что расхождения значений сил лобового сопротивления для сеток в 40000 и 160000 узлов практически минимально, а разностная сетка в 20000 узлов имеет значительное отличие.

Следовательно, для дальнейших расчетов будет актуальнее использовать сетку в 40000 узлов.

Численное моделирование проводилось с помощью пакета программ ANSYS Fluent на основе решения двумерных уравнений (1.1), (1.2), граничных условий (1.3) – (1.8) с использованием метода Патанкара [8], неявной схемы 2-го порядка точности по пространству для конвективных членов уравнений, двухпараметрической модели турбулентности k-ε.

На рисунке 2 представлена зависимость коэффициента лобового сопротивления от числа Рейнольдса при постоянной угловой скорости равной 1000 об/мин. Видно, что данные численного эксперимента аппроксимируются степенной зависимостью: $C_x = 160,81 \cdot Re^{-0,471}$.

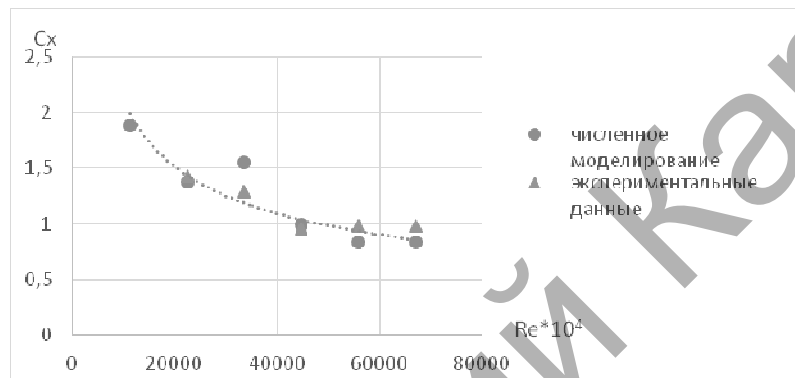


Рисунок 2 – Зависимость коэффициента лобового сопротивления от числа Рейнольдса при угловой скорости равной 1000 об/мин.

На рисунке 3 приведена зависимость коэффициента подъемной силы от числа Рейнольдса при постоянной угловой скорости равной 1000 об/мин. Данные численного эксперимента аппроксимируются степенной зависимостью: $C_y = 3e + 0,6Re^{-1,202}$.

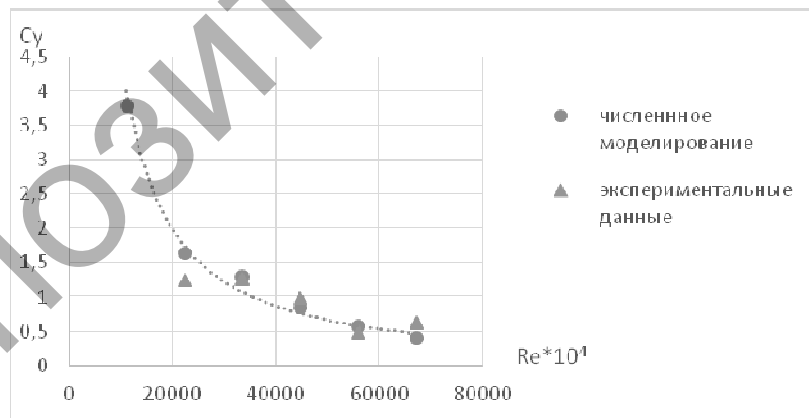


Рисунок 3 – Зависимость коэффициента подъемной силы от числа Рейнольдса при угловой скорости равной 1000 об/мин.

Выводы:

На основе экспериментальных и численных расчетов мы получили следующие результаты:

- установлено, что коэффициент лобового сопротивления при увеличении числа Рейнольдса падает.
- установлено, что коэффициент подъемной силы, при увеличении числа Рейнольдса уменьшается, но при дальнейшем увеличении Re, можно предположить, что

коэффициент подъемной силы достигнет своего минимального значения и дальше уменьшатся не будет.

Таким образом, из сравнения результатов, полученных в процессе моделирования с помощью программы ANSYS FLUENT и экспериментальных данных, полученных при испытаниях двухлопастного ветродвигателя можно увидеть удовлетворительное согласование экспериментальных и численных расчетов по аэродинамическим характеристикам. Максимальная величина расхождений численных и экспериментальных данных не превышает 1–2 %.

Литература:

1. Kussaiynov K., Sakipova S.E., Tansykbaeva N.K., Kussaiynova A. // Turbulence, Heat and Mass Transfer. 2012. V.7. P. 577-580.
2. Кусаиынов К., Камбарова Ж.Т., Танашева Н.К., Шаймерденова К.М., Алибекова А.Р. // ИФЖ. 2015. Т. 88. В. 2. С. 23-28.
3. Жиленко Д.Ю., Кривоносова О.Э. // Письма ЖТФ. 2015. Т.41. В. 1. С. 12-19.
4. Исаев С.А., Баранов П.А., Судаков А.Г., Ермаков А.М. // Письма ЖТФ. 2015. Т.41. В. 2. С. 49-57.
5. Патанкар С.В. // Энергоатомиздат. Москва. 1984. 149 с.

Бөрібаева А.М., Айтан М.Е., академик Е.А.Бөкетов атындағы Қарағанды мемлекеттік университеті, химия факультеті, ХЕ-41 тобы, студенттер.
(*Ғылыми жетекші: х.ғ.к., қауым. проф. Әбулдісова Л.Қ.*)

СҰЙЫҚ КРИСТАЛДАРДАҒЫ ҚЫСҚА АУҚЫМДЫ ТӘРТІБІН КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУ

Ерекше қасиеттерге ие сұйық кристалды материалдар әр түрлі ғылым мен техника салаларында көп қолданылуда: молекулалық биология, медицина, кибернетика, микроэлектроника, оптика және т.б. [1]. Бұл мезоморфты қосылыстардың құрылысын және физика-химиялық қасиеттерін интенсивті зерттеуге қызығушылық тудырады.

Сұйық кристалды қосылыстардың құрылым-қасиет өзара байланысын анықтау, мезоморфизмнің молекулалық табиғатын зерттеу маңызды болып табылады. Сұйық кристалдарды компьютерлік модельдеу тәсілдері – молекулалық механика және динамика [2], Монте-Карло [3], атом-атомдық потенциалдар [4], квантты-химиялық жартылай эмпирикалық және эмпирикалық емес әдістері [5], ұйытқу теориясы [6, 7] тәжірибеге дейінгі кезеңде мезоморфты қасиеттерді болжауға және содан кейін қасиеттері берілген мезоморфты заттардың бағытталған синтезін іске асыруға мүмкіндік береді [8, 9]. Бұл үшін димерлердің әр түрлі конфигурацияларындағы екі мезогенді молекуланың әрекеттесу энергиялары есептелінеді және әр конфигурацияның ықтималдылығы анықталады [6, 7, 10].

Осы жұмыста квантты-химиялық Хартри-Фок әдісі және тығыздық функционалы теориясы Шифф негіздері (азометиндер) мен азобензолдардағы молекулалық тәртібін модельдеу үшін қолданылды. Оқшауланған молекула геометриясын ықшамдау амалы V3LYP/3-21G, V3LYP/6-31G, RHF/6-31G, RHF/6-31G(d,p), RHF/6-31G++(d,p) әдістерімен Gaussian программалық жүктеме негізінде орындалды.

Молекулааралық әрекеттесу энергиясы сұйық кристалдың әр түрлі қабаттарында (стекинг, St, бүйір) және бір қабатта (Pl, планарлы, жазық; T, терминалды) орналасқан молекулалар димерлерінің тепе-тең геометриялық конфигурациялары үшін есептелген (сурет 1). XYZ ортогоналды координаталық жүйесінің бас нүктесі болып, бірінші молекуланың масса орталығы алынды, X осі оның ұзын осі бойымен бағытталған, XY жазықтығы молекула жазықтығына сай келеді. Стекинг-конфигурациясында оқшауланған молекулалар масса орталықтарының бастапқы аралығы Z осі бойынша, жазық конфигурациясының Y осі