

ОСОБЕННОСТИ КЛАСТЕРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ СТРОИТЕЛЬНЫХ КОМПОЗИТОВ

Гергега А.Н., Выровой В.Н., Суханов В.Г. (*Одесская государственная академия строительства и архитектуры*)

Формування та функціонування структури гетерогенних матеріалів представлено як взаємообумовлена еволюція кластерних систем. Показана роль внутрішніх границь розділу. Запропоновано метод розрахунку потенціальних полів міжкластерної взаємодії.

Полимасштабность кластерных систем композиционных материалов

Создание строительных композитов с определёнными свойствами требует достаточно полного представления о процессах формирования кластерных структур материала, понимания особенностей их взаимодействия и функционирования.

Многоуровневая организация строительных композитов предполагает образование и сосуществование кластеров различного масштабного уровня, различающихся составом и характерными размерами. Под кластерами обычно понимают систему конечного числа связанных частиц, в которой преобладают силы взаимодействия, значительно превосходящие гравитационные, выталкивающие и центробежные.

Сложная организация композиционных материалов – результат формирования их структуры (и свойств) в сложных, многофакторных и хаотичных синергетических процессах. Как любая самоорганизующаяся система, композит имеет иерархическое строение, синхронно проявляющее самую разную активность. Трансформация вещества от стадии «среды» до получения композиционного материала проходит несколько этапов, имеет сложную эволюционную структуру, которая включает процессы, протекающие в трёх асимптотиках.

На микроскопическом уровне особое значение имеет химическая природа взаимодействующих частиц. В этой асимптотике, когда индивидуальность частиц еще не подавлена групповыми признаками, формирование свойств вещества во многом определяется химическими процессами. Накопление в среде молекулярных комплексов создает благоприятные условия для начала процессов кластерообразования, акцент переносится на другой масштаб, возрастает роль физико-химических процессов.

В процессе роста кластеров произвольной природы на любом следующем масштабном уровне может возникнуть принципиально иные структуры, приводящие к скачкообразным изменениям свойств образца и даже «катастрофе» в виде структурного фазового перехода, когда величина неоднородности становятся сравнимой с размерами тела.

Большой экспериментальный и теоретический материал, включая компьютерные и качественные модели, проясняет многие существенные черты процессов, проходящих в промежуточной асимптотике. Релевантное описание этих процессов и их результатов с необходимостью требует применения подходов и методов, существенных для рассматриваемого масштаба. Характерным для мезоскопических масштабов является самоаффинность структур, позволяющая описывать их как мультифракталы, используя, в частности, набор размерностей Реньи.

Результаты структурного перехода могут различаться в зависимости от строения и свойств перколяционного кластера, занимающего промежуточное положение между микро- и макрообразованиями и, по сути, определяющего новое состояние вещества. В строительных материалах таких промежуточных подуровней может быть несколько, что создаёт дополнительные возможности для модификации структуры и свойств материала.

Перколяционные кластеры существенно изменяют процессы проводимости и массопереноса, определяют механическую прочность и коррозионную устойчивость, влияют на долговечность, приводят к аномальной диффузии, другим физико-химическим и механическим эффектам. Перколяционный подход, как известно, позволяет со сходных позиций изучать диффузионный перенос и коррозию, кинетику химических реакций и деструкцию, передачу механических напряжений и осмос, и другие явления как происходящие в матрице

бесконечного кластера. Интересно отметить, что бесконечные кластеры являются переносчиками и внешних воздействий, включая агрессивные, предопределяют, таким образом, взаимодействие материала с внешней средой [1].

Структуры, наблюдаемые в макроскопических размерах, – это не только следствие самоорганизации на упомянутых уровнях, но и результат процессов, свойственных самому масштабу. Именно характерные размеры структурных блоков, кластеров макрочастиц, внутренних границ раздела, и возникающие из этого возможности, связанные с распределением по размерам, обуславливают характер и своеобразие протекающих процессов самоорганизации, структуру и свойства образующихся кластерных структур.

Обобщение понятия кластера

Существование кластерной организации структур в различных асимптотиках вызывает необходимость и позволяет по данным экспериментальных и теоретических исследований обобщить понятие кластера.

Как одно из фундаментальных понятий современного материаловедения кластеры определяют перечислением атрибутивных свойств: кластерные системы обладают фрактальной структурой, скачкообразно изменяют физико-химические свойства при минимальном изменении количества составляющих частиц, имеют значительную величину отношения площади поверхности к объёму, экстенсивную плотность и другие [2-7]. Кластеры существуют на всех уровнях структурных неоднородностей (масштабах), обладают высокой химической активностью, их эволюция в условиях сложных многофакторных взаимодействий и внешних влияний, проходя через ряд метастабильных состояний, ведёт к образованию новых структур, которые могут обеспечить реализацию необходимых свойств.

Наличие структуры и достаточная степень взаимодействия частиц делает кластеры энергетически и информационно ёмкими, позволяет взять на себя роль «кирпичиков», реально формирующих структуру тела. Фрактальные кластеры являются основными структурообразующими элементами многих макроскопических систем, возникающих в различных физико-химических процессах и явлениях [8], в частности, в процессе формирования композиционных материалов [9].

Теорема о полевого взаимодействия мультифракталов

Интерес к фрактальным кластерам обусловлен ещё и тем, что они являются весьма распространёнными природными объектами, составляют основу многих макроскопических систем, возникающих в результате протекания физико-химических процессов и явлений, сходных с процессами образования, взаимодействия и роста фрактальных кластеров. Такие структуры обладают специфическим набором, привлекательным с точки зрения прикладного использования в современных технологиях. Например, расчёты межкластерного взаимодействия позволяют получить представление о свойствах ещё неизготовленного материала. Это важно, в частности, потому, что процессы, происходящие при формировании отдельных кластеров и систем, определяются большим количеством конкурирующих факторов, которые не позволяют ограничиться качественными соображениями.

Примем, что в системе произошло начальное спонтанное перераспределение частиц с образованием кластерных структур, и что в системе присутствуют некооперированные частицы. Дальнейшая судьба таких частиц предопределяется агрессивностью кластерных образований.

Пионерские работы по описанию взаимодействия геометрических фигур правильной формы на конечных расстояниях принадлежат Н.Е. Жуковскому [10]. Предлагаемый ниже алгоритм построения силового поля – модернизация его метода для случая, когда объект является фрактальным кластером.

ТЕОРЕМА. Объёмный мультифрактальный объект конечных размеров притягивает по нормали материальную точку единичной массы силой, $F^i = a \cdot \sum \rho_i \omega_i$ где a – постоянная, зависящая от типа взаимодействия, ρ_i – локальная объёмная плотность, а ω_i – телесный угол, под которым виден соответствующий фрагмент мультифрактала из притягиваемой точки [11, 12].

Доказательство теоремы аналогично приведённому Н.Е. Жуковским [10].

Пусть есть тонкая фрактальная пластина произвольной формы и конечных размеров, и произвольная точка O единичной массы. Определим нормальную составляющую силы взаимодействия, точнее, вектора

напряжённости (рис. 1). Опустим из точки O перпендикуляр на пластину и совместим с ним ось z . Выделим элемент объёма dv и построим малый конус, соединив контур элемента dv с т. O . Сила притяжения элементом dv точки O , по сути, напряжённость поля, есть

$$dE(r) = a \cdot \rho(r) \cdot dv / r^2 \quad (1)$$

где a – коэффициент взаимодействия, $\rho(r)$ – локальная плотность, dv – элемент объёма, r – расстояние от т. O до элемента dv .

Преобразуем выражение (1). Проведём из т. O сферу единичного радиуса, которая вырезает из конуса, упомянутого выше, элемент площади dw (рис. 1). Если пересечь конус плоскостью, параллельной поверхности пластины, и касательной к dw , получим элемент площади dv' . Так как площади параллельных сечений конуса относятся как квадраты расстояний до вершины, имеем $dv' / dv = 1 / r^2$, или $dv = r^2 \cdot dv'$, здесь dv – контур элемента объёма.

Так как $dw = dv' \cdot \cos \alpha$, где α – угол между нормалью и направлением на рассматриваемый фрагмент, другими словами, между перпендикулярами к контурам dv' и dw , следовательно, контур элемента

$$dv = r^2 \cdot dw / \cos \alpha .$$

Тогда для нормальной составляющей напряжённости, порождённой элементом dv и действующей на произвольную точку единичной массы, получим:

$$dE_n = a \cdot \rho(r) \cdot \cos \alpha \cdot dv / r^2 = a \cdot \rho(r) \cdot dw , \quad (2)$$

где dw , по сути, – телесный угол, под которым виден контур элемента объекта. Что требовалось доказать.

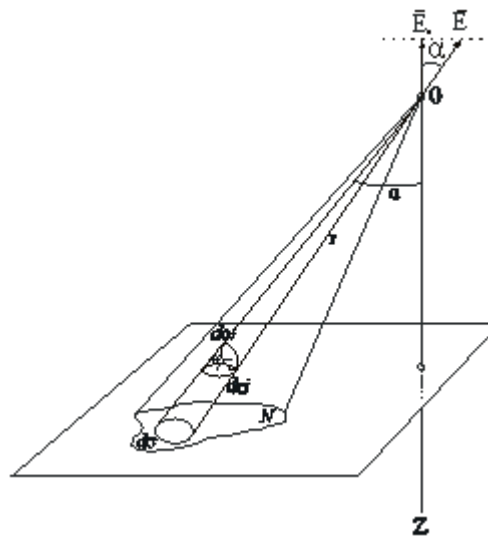


Рис. 1. К доказательству теоремы о взаимодействии мультифрактала с материальной точкой

Алгоритм построения силовых полей, базирующийся на рассмотренной теореме несложен. Его основные положения следующие:

– вокруг объекта описывается прямой параллелепипед, разделённый на кубические ячейки, размер которых определяется необходимой точностью получаемых результатов;

– из точки пространства, в которой определяется напряжённость, строится телесный угол, под которым виден фрагмент мультифрактала, для которого рассчитывается величина dE . Затем производится суммирование по ячейкам параллелепипеда.

Эффективный радиус фрактального кластера

При изменении масштаба рассмотрения кластерных систем композита бывает необходимо (или просто удобно) уменьшить степень детализации, нивелировать подробности и представить кластер в виде сферы, заменяющей его при описании взаимодействия [13]. В частности, это используется при подсчёте количества кластеров и для оценки в первом приближении величины границ раздела.

Для получения такой сферы будем исходить из того, что силы взаимодействия между частицами, составляющими кластер, пропорциональны r^{-2} . Понятно, что в этом случае расположенные в непосредственной близости частицы вносят экспоненциально большой вклад в величину силового поля. Эти расходящиеся слагаемые устраняются в модели с помощью простого правила: частицы, расположенные на расстоянии 2-3 средних радиусов частиц от данной точки, исключаются из расчёта напряжённости в ней. В рамках модели это приводит к тому, что экспериментальные зависимости $E(r)$ внутри кластера аппроксимируются прямой, а на расстоянии 5-10 радиусов от него – функцией $1/r^2$ (рис. 2).

Такой характер зависимости $E(r)$ позволяет ввести понятие эффективного радиуса кластера – радиуса сферы, которая могла бы заменить кластер при описании силовых взаимодействий. Если использовать сравнение с классическим результатом – полем сплошной сферы – то видно, что эффективный радиус есть расстояние от начала координат до точки пересечения аппроксимирующих.

Внутренние границы как гаранты свойств материала

Одним из следствий физических процессов и химических реакций, протекающих в твёрдом теле, может быть относительное смещение его частей, приводящее к снижению уровня однородности. Если трактовать структуру как порядок, заключающийся в определённом неоднородном распределении в пространстве величин, характеризующих строение вещества, и установленный закон эволюции исследуемой системы [14, 15], то смещения, а в общем случае – деформации, приводящие к появлению границ раздела, являются движущей силой возникновения новых свойств, совершенствования структуры, стабилизации материала как системы.

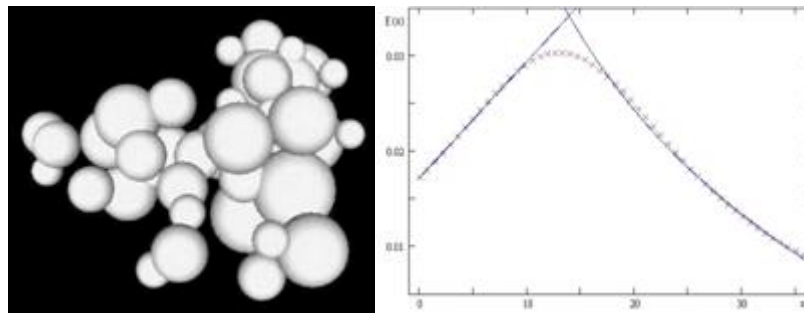


Рис. 2. Модельный кластер и график зависимости напряжённости его силового поля (в усл. ед.) от расстояния

Если стоит задача оценки роли границ раздела в формировании свойств материала, то явно недостаточно описывать характерные размеры кластерных образований только эффективным радиусом, нужно воспользоваться инструментами и представлениями фрактальной геометрии.

Границы раздела в материале представляют собой фрактальные поверхности, разделяющие разнородные части тела. Как отмечалось, они являются следствием процессов организации структуры, обусловлены произвольностью формы и несоразмерностью как кластеров различных размеров, так и макроскопических структурных блоков.

Если степень неоднородности материала достаточно велика, в эволюции внутренних границ появляются коллективные эффекты: когерентное поведение границ раздела определённого структурного уровня (размера) порождает элементы большего масштаба, возникает инфляция структуры материала. Это первый шаг иерархической соподчинённости – важного аспекта эволюции, условия целостного существования материала.

Когда в некоторой области материала силовые поля деформаций, складываясь, образуют в результате

интерференции локальные области с величиной деформации, превышающей среднее значение, это создаёт энергетические предпосылки образования иного, более крупного уровня модульности системы. Экспериментальные данные показывают, что образуется сеть внутренних границ, обладающая свойством статистического самоподобия, которая нивелирует действие силовых полей, возникающих вследствие неоднородности материала [16].

Статистическое самоподобие в расположении границ приводит к некой «кратности» и в конфигурации полей, проецируют этот механизм на всё большие масштабы, создаёт всё более крупные границы раздела и протяжённые кластеры вещества, которые, в свою очередь, способствуют дальнейшему уходу текстуры материала от однородности. В физических объектах оно реализуется в отчётливо иерархической пространственно-временной системе структуры.

Неоднородности различных размеров порождают друг друга, происходит «перекачка» энергии между ними. Это есть проявление взаимообусловленности и взаимовлияния различных уровней структурных неоднородностей, демонстрация существования положительной обратной связи между подобными явлениями на разных масштабах.

Выводы

Композиционный материал представляет самоорганизующуюся систему с характерным взаимодействием структурных неоднородностей разных масштабов.

Кластеры вещества и кластеры границ раздела – взаимообусловленные и совместно эволюционирующие кластерные системы. Их сосуществование создаёт дополнительные возможности для генерации структур и модификации свойств материала.

Предложенные методы расчёта потенциальных полей внутри и вне кластерных структур будут полезным инструментом для расчёта характеристик силовых полей фрактальных кластеров, напрямую связанных с их структурой и свойствами, от которых, в свою очередь, зависит функциональное многообразие композиционных материалов.

Литература

1. Выровой В.Н., Гергега А.Н. Кластеры детерминированные, вероятностные, случайные. //Вісник Донбаської національної академії будівництва та архітектури. – 2008. – № 1(69). – С. 19-23.
2. Мандельброт Б. Фрактальная геометрия природы – М.: ИКИ, 2002. – 656 с.
3. Смирнов Б.М. Фрактальные кластеры. //УФН. – 1986. – Т. 149, вып.2. – С. 177-200.
4. Федер Е. Фракталы. – М.: Мир, 1991. – 254 с.
5. Гергега А. Н., Выровой В.Н. Иерархия процессов кластерообразования. //Строительные материалы. Наука. – 2006. – №8. – С. 2-3.
6. Смирнов Б.М. Свойства фрактального агрегата. // УФН – 1989. – Т. 157, вып. 2. – С. 357- 360.
7. Смирнов Б.М. Процессы в плазме и газах с участием кластеров. //УФН – 1997. – Т. 167, вып. 11. – С. 1169 - 1200.
8. Фракталы в физике (под ред. Л. Пьетронеро и Э. Тозатти) – М.: Мир, 1988. – 670 с.
9. Дворкин Л.И., Соломатов В.И., Выровой В.Н., Чудновский С.М. Цементные бетоны с минеральными наполнителями. – Киев: Будивельник, 1991. – 137 с.
10. Жуковский Н.Е. Теоретическая механика. – М.: ГИТТЛ, 1952. – 812 с.
11. Гергега А.Н., Выровой В.Н., Ковдиенко Н.А., Шумакевич А.И. Компьютерное моделирование фрактальных кластеров в гетерогенных средах. // Моделирование в материаловедении. – Одесса, 1998. – С. 20-21.
12. Гергега А.Н., Воробьева Е.Н. О механических напряжениях, создаваемых кластерами гетерогенной среды. //Моделирование и оптимизация в материаловедении. – Одесса, 2005. – С. 22.
13. Выровой В.Н. Физико-механические особенности структурообразования композиционных строительных материалов. //Дисс. ... д-ра техн. наук. – Одесса, 1987. – 340 с.
14. Хакен Г. Синергетика. Иерархия неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. – М.: Мир, 1985. – 420 с.
15. Змитренко Н.В., Михайлов А.П. Инерция тепла. – М.: Знание, 1982. – 62 с.
16. Гергега А.Н., Выровой В.Н. Компьютерное моделирование внутренних границ раздела как элементов структуры материала. /Сборник «Моделирование-2008». – Киев: ИПМЭ им. Г.Е. Пухова, 2008. – С. 195-199.