

sep. 2010. – Poiana Braşov, 2010. – Vol. II. – P. 232 – 237. **3.** Розенталь Н.К. Коррозионностойкие бетоны особо малой проницаемости / Н.К. Розенталь, Г.В. Чехний // Бетон и железобетон. – 1998. – № 1. – С. 27 – 29. **4.** Зайцев Ю.В. Особенности механики разрушения бетона и железобетона при длительном действии нагрузки и внешней среды / Ю.В. Зайцев, Н.К. Розенталь, Г.В. Чехний // Строительные материалы, оборудование, технологии XXI века. – 2001. – № 8. – С. 29 – 30.

Поступила в редколлегию 28.08.12

УДК 666.91

Свойства железобетонных конструкций, армированные полимерными фибрами / И.В. РУССУ, Е.Я. НИКА // Вісник НТУ «ХП». – 2012. – № 59 (965). – (Серія: Хімія, хімічна технологія та екологія). – С. 86 – 91. – Бібліогр.: 4 назв.

Наведено результати досліджень згинаючих залізобетонних конструкцій, що армовані поліпропіленовими короткими фібрами марки Multi 190 і довгими марки High Grade 380. Експериментально доведено, що висока міцність при вигині залізобетонних конструкцій досягається при армуванні розтягнутій частині довгою фіброю марки High Grade 380, а стислій частині короткою фіброю марки Multi 190. У поєднанні з акриловою добавкою дисперсне армування дозволяє підвищити міцність бетону при стиску більше 1,35 рази.

The results of studies of flexible reinforced concrete, reinforced with polypropylene fibers shorter brand Multi 190 and long-brand High Grade 380. Experimentally proved that the highest bending strength concrete structures have reinforced in the tension zone with long fibers brand High Grade 380, and short fibers in a concise brand Multi 190. In combination with an acrylic additive dispersed reinforcement increases the compressive strength of concrete more than 1,35 times.

УДК 666.3

Е.Ю. СВЕТКИНА, канд. хим. наук, доц., ГВУЗ «НГУ», Днепропетровск
О.Г. БЕЗРУКАВА, мл. науч. сотруд., ДНУ, Днепропетровск
Ю.Б. ВИНОГРАДОВ, ученик, ДОЛІМФП при ДНУ, Днепропетровск

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ МЕХАНОХИМИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ МИНЕРАЛОВ В ПРОЦЕССЕ ОБОГАЩЕНИЯ ПОЛЕЗНЫХ ИСКОПАЕМЫХ

Рассмотрены процессы виброударной активации минералов с применением решетчатой модели на ЭВМ. С помощью сделанной программы можно будет прогнозировать механические свойства, теплоемкость, твердость и электропроводимость квазикристаллических систем. Возможно также прогнозирование некоторых физических свойств квазикристаллов.

© Е.Ю. Светкина, О.Г. Безрукава, Ю.Б. Виноградов, 2012

Виброударный способ измельчения, реализуемый в вертикальной вибрационной мельнице приводит, к повышению реакционной способности и более глубоким изменениям в структуре. Например, для карбида титана [1] это может привести к интенсификации процесса спекания и улучшению механических свойств готовых деталей. Процесс механохимической активации минерала посредством измельчения приводит к изменению межатомных связей в кристаллах, в результате чего образуются новые соединения, изменяющие физико-химические свойства веществ. Активация карбида титана при виброударном измельчении доказана увеличением сорбционных характеристик порошков за счет свободных ионов, образующихся на поверхности частиц, а также изменением его электрических свойств. Мелкодисперсные порошки карбидосталей позволят достичь более высокий уровень физико-механических свойств материалов, причем потребуется значительно меньше железосодержащей подложки, т.к. их удельная поверхность в несколько раз выше удельной поверхности эквивалентных частиц железа.

Рассматривая квазихимическое равновесие образования адсорбированных на поверхности кластеров $[Me] \text{ (крист.)} \leftrightarrow [Me] \text{ (крист.)} \times Me_g \text{ (адс.)}$, нетрудно убедиться, что на границе металла с собственным паром конденсация поверхностных кластеров ничтожно мала вплоть до точки плавления (иначе говоря, поверхность остается атомно гладкой). Однако в присутствии активной среды, которая адсорбируется на поверхности со значительным тепловым эффектом, доля поверхностных кластеров резко возрастает.

Некоторое «дробление», или «диспергирование», или «кластеризация» поверхности оказывается энергетически выгодным вследствие стабилизации возникающих кластеров средой. Расчет равновесия между решеткой и поверхностными кластерами типа « i » дает для гранцентрированных металлов простое соотношение:

$$\frac{N_i}{1 - \sum N_i} \approx B e^{-\frac{L}{RT} [g_i - g_i \varepsilon_i - 0,2m_i]} \cdot e^{\frac{-\sigma_0(n_i - m_i)}{RT}}, \quad (1)$$

где левая часть представляет собой отношение числа мест поверхности, занятых кластерами, к числу свободных мест; L – теплота возгонки металла; g_i – число атомов в кластере; m_i – число мест, занимаемых кластером на атомно гладкой поверхности решетки; n_i – число поверхностных атомов кластера, доступных для адсорбции; σ_0 – работа адсорбции среды на одно место;

ε_i – безразмерная избыточная энергия свободных кластеров по сравнению с бесконечным кристаллом; B – множитель, определяемый изменением энтропии системы при образовании поверхностных кластеров, согласно приближенным оценкам $B \cong 0$.

Формула (1) показывает, что концентрация поверхностных кластеров при каждой данной температуре определяется главным образом соотношением между энергией решетки металла и энергией взаимодействия поверхности со средой: чем прочнее решетка и чем слабее адсорбция, тем меньше «кластеризация» поверхности. Нами были получены хорошие результаты [2] по однородности измельченного материала, однако, требовалось зафиксировать кинетику адсорбции кислорода. Поэтому были проведены опыты по адсорбции кислорода, который необходимо было в последствии удалять.

Изменение размера частиц при различных видах измельчения – это не единственный результат механического воздействия на твердые тела. Наиболее важным является то, что при этом происходят всевозможные изменения: фазовые переходы, энергетическая активация частиц на поверхности и в объеме, деформация, возникновение точечных и протяженных эффектов. Эти изменения в конечном итоге повышают активность порошков твердых материалов в процессах последующего их использования, поэтому актуальным является прогнозирование свойств после механохимической активации.

Целью настоящей работы является прогнозирование свойств минералов, подвергшихся механохимической активации, что связано с подготовкой минералов к процессу сепарации.

Один из методов исследования состояния твердого тела – расчетно-теоретический. В работе [2] методом Монте-Карло рассчитана толщина активированного поверхностного слоя, а также изменение энергетических параметров процесса и ожидаемые фазовые переходы.

Рассмотрим теперь обычную структуру, которая образована, за счет типичных связей. Обычную силу межатомного взаимодействия можно оценить из таких простых соображений. Типичная потенциальная энергия межатомного взаимодействия – порядка 1 эВ, т.е. около 10^{-19} Дж. Конечно, точное значение меняется от одного вещества к другому, но для всех нормальных веществ эта энергия – порядка электрон-вольта. Для разрыва межатомной связи надо разнести атомы на расстояние порядка их собственного размера, т.е. порядка 1 ангстрема или 10^{-10} м. Этим мы увеличиваем энергию системы

на один электрон-вольт, а необходимая для этого сила приблизительно равна 10^{-19} Дж / 10^{-10} м = 10^{-9} Н. Именно такая сила и разорвет типичную межатомную связь [3, 4]. Отсюда можно получить ограничение на такую важную характеристику материала как модуль Юнга. Запишем закон Гука:

$$F = ES\Delta x/x. \quad (2)$$

Размерность модуля Юнга: $\text{Н/м}^2 = \text{Па}$. Подставим в формулы числа. Поскольку сила в 10^{-9} Н, как мы знаем, разорвет одну атомную цепочку, а поперечную площадь в 1 м^2 пересекает $(1 \text{ м} / 10^{-10} \text{ м})^2 = 10^{20}$ атомных цепочек, то наша оценка модуля Юнга даст $E = 10^{11} \text{ Н/м}^2 = 0,1 \text{ ТПа}$.

Исходя из этой оценки модуля Юнга, получим максимальное напряжение, которое может выдержать кристалл. Механическое напряжение – это сила, приложенная к единичной поперечной площади:

$$\sigma = F/S = E\Delta x/x. \quad (3)$$

Из опыта тела рвутся, когда их относительное удлинение $\Delta x/x$ достигает величин порядка 10 % (эластичные материалы типа резин мы не рассматриваем: они кристаллами заведомо не являются). Значит, предельное значение напряжения или прочность кристалла на разрыв $\sigma_B = 10 \text{ ГПа}$.

Теперь попытаемся получить значение предела прочности кристалла на сдвиг. Для этого надо оценить, какую скользящую силу необходимо приложить к двум атомным плоскостям, чтобы они начали скользить друг относительно друга (рис. 1). В связи с этим нами было предложено графически строить узловые ряды, а затем по искажению петли рассчитывать сдвиговые деформации.

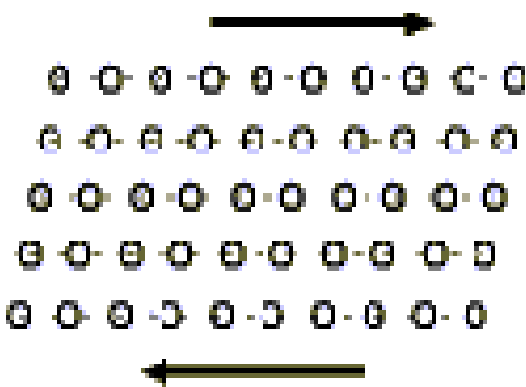


Рис. 1 – Сдвиг атомных плоскостей под действием внешних сил

Очевидно, что поскольку атомные плоскости удерживаются от скольжения благодаря тем же межатомным силам, ответ получится по порядку величины тот же самый: сила в 10^{10} Н, приложенная к площади 1 м^2 , сможет вызвать необратимую сдвиговую деформацию кристалла (заставит кристалл течь). Более аккуратный расчет даст в несколько раз меньшую

оценку, что и понятно: ведь сдвигать атомные плоскости легче, чем отрывать их одну от другой. Тем не менее, порядок величины будет тот же.

Структура, образующихся кластеров, может быть тройкого рода: цепочечная или линейная, или точнее одномерная; цепочка частиц может быть изогнутой, зигзагообразной и т.д.; сетчатая или двумерная; трехмерная, образующаяся при сферическом расположении отдельных частиц, а также при образовании частицами многогранника.

Программа можем рассчитывать либо концентрацию дефектов, либо концентрацию (плотность) электронов на уровнях. Это приводит к приближенному расчету уровней Ферми, показывающих наличие различных валентных электронов, т.е. прогнозирование электронного строения и магнитных свойств как металлических сплавов так и в кластерных соединениях.

Модель разработана с помощью визуального программирования C++ Builder. Такая модель дает возможность построения двухмерной модели квазикристалла с заданными свойствами.

Для построения двухмерной модели была использованы формулы [4]:

$$x_1 = 300 * (a + \cos 1 * (e + b) - \cos 2 * (d + c)); \quad (4)$$

$$y_1 = 300 * (\sin 2 * (c - d) + \sin 1 * (b - e)); \quad (5)$$

где x_1 – координата абсциссы, y_1 – координата ординаты, $\cos 1$ – $\cos(2 * \pi / 5)$, $\cos 2$ – $\cos(4 * \pi / 5)$, $\sin 1$ – $\sin(2 * \pi / 5)$, $\sin 2$ – $\sin(4 * \pi / 5)$, a, b, c, d, e – параметры соответствующих координат.

В результате применения данной программы была определена наибольшая плотность содержания полезных компонентов. Данные по плотности занесены в гистограмму, представленную на рис. 2.

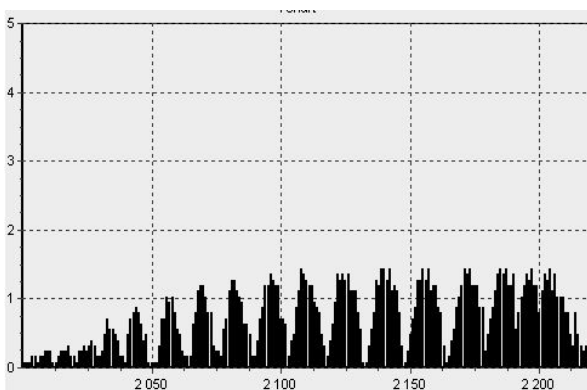


Рис. 2 – Гистограмма плотности

Таким образом, видно, что плотность минералов, являющихся кристаллами колеблется. Области, в которых наблюдается наибольшая плотность соответствует максимальному содержанию полезного компонента, а минимальная плотность соответствует областям с меньшим содержанием полезных компонентов, а также с ми-

нимальным значением механического напряжения и максимальной вероятностью разрыва связей.

Выводы.

На основании теоретических предположений определена плотность полезных компонентов графическим методом.

Построена двухмерная модель с помощью визуального программирования с заданными параметрами.

Показана возможность оценки механических и физических макропоказателей в минерале.

Список литературы: 1. Светкина Е.Ю. Особенности измельчения титана в вертикальной вибрационной мельнице / Е.Ю. Светкина // Вибрация в технике и технологиях. – 2002. – № 5 (26). – С. 5 – 11. 2. Светкина Е.Ю. Фазовые переходы при виброударной активации минералов / Е.Ю. Светкина, Л.А. Якубович // Науковий вісник НГУ. – 2003. – № 10. – С. 67 – 72. 3. Иванов И.П. Современная физика в задачах [Электронный ресурс] / И.П. Иванов. – Режим доступа: <http://www.nsu.ru/materials/ssl/text/metodics/ivanov.html>. 4. Marder M. How to make a quasicrystal [Электронный ресурс] / Marder M. – Режим доступа: <http://www.physics.emory.edu/~weeks/software/exquasi.html>

Поступила в редколлегию 20.08.12

УДК 666.3

Прогнозирование механохимической активации минералов в процессе обогащения полезных ископаемых / Е.Ю. СВЕТКИНА, О.Г. БЕЗРУКАВА, Ю.Б. ВИНОГРАДОВ // Вісник НТУ «ХП». – 2012. – № 59 (965). – (Серія: Хімія, хімічна технологія та екологія). – С. 91 – 96. – Бібліогр.: 4 назв.

Розглянуто процеси віброударної активації мінералів із застосуванням ґраткової моделі на ЕОМ. за допомогою зробленої програми можливий розрахунок механічних властивостей, теплоємності, твердості і електропровідності квазікристалічних систем. Можна також прогнозувати деякі фізичні властивості квазікристалів.

The processes of the vibroshock activating of minerals are considered with the use of the latticed model on computer. By the done program it is possible it will be to forecast mechanical properties, heat capacity, hardness and conductivity of the quasicrystalline systems. Possibly also prognostication of some physical properties of quasicrystals .