

Л.Е. ТРОФИМОВА, канд. техн. наук, доц., ОГАСА, Одесса, Украина,
Н.Б. УРЬЕВ, академик РАН, д-р хим. наук, проф., ИФХЭ РАН,
Москва, Россия

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ В ДИСПЕРСНЫХ МАТЕРИАЛАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ПОДХОДА

Проанализированы процессы структурообразования дисперсных систем в динамических условиях с позиций синергетики и теории катастроф. Исследовательской программой предусмотрено решение задач, связанных с описанием и анализом таких явлений, когда увеличение интенсивности технологических воздействий приводит к качественно новому поведению системы. Показано, что использование новых представлений для описания эволюции дисперсий в условиях различных технологических операций дает возможность поднять на новый уровень моделирование физико-химических процессов при получении современных композиционных материалов.

Ключевые слова: дисперсные системы, структурообразование, физико-химическая динамика, топологический подход.

Введение. Как известно, растворы и бетоны на основе минеральных или органических вяжущих веществ и целый ряд подобных материалов являются типичными дисперсными композитами. Их получение на всех стадиях комплексного технологического процесса связано с возникновением многокомпонентных структурированных дисперсных систем, эволюцией формирующихся в них дисперсных структур. Существенная часть этого процесса протекает в динамических условиях, определяющие элементы регулирования которыми должны быть основаны, как показано в [1, 2], на принципах физико-химической динамики дисперсных систем и материалов.

Физико-химическая динамика дисперсных систем преимущественно рассматривает динамические процессы, протекающие в совокупности частиц дисперсных фаз, связанных за счет действия дисперсионных сил в пространственную структурную сетку; механизм распада таких структур в условиях динамических воздействий с образованием из них агрегатов; их развитие, взаимодействия между собой и с дисперсионной средой (вплоть до распада на отдельные частицы с высвобождением иммобилизованной в них дисперсионной среды).

© Л.Е. Трофимова, Н.Б. Урьев, 2014

Наряду с процессами разрушения структуры агрегатов в рамках физико-химической динамики рассматривают и обратные процессы формирования структур в условиях динамических воздействий на систему. Традиционный способ сбора информации, необходимой для фиксации закономерностей развития дисперсных систем в динамических условиях состоит в построении и анализе полных реологических кривых.

Математическая модель. Основные направления исследования обусловлены [1, 2] необходимостью изучения механизмов формирования разрывов сплошности и возникновения слоев во время сдвиговых деформаций дисперсных структур и важны как для реологии дисперсных систем, так и для решения прикладных задач технологии. Методологическая основа исследований – интерпретация традиционных экспериментально-теоретических результатов по реологии с объединенных позиций синергетики, занимающейся изучением процессов самоорганизации, относительно устойчивого существования и распада структур различной природы, образующихся в далеких от равновесия системах, и теории катастроф, описывающих те критические (пороговые) ситуации, при которых возникают, поддерживаются и теряют устойчивость диссипативные самоорганизующиеся структуры [3, 4]. С данных позиций и рассматривается ряд вопросов, связанных с различными аспектами технологии дисперсных строительных материалов. При этом учитывается, что такие существенно различные с точки зрения технологии процессы как перемешивание, транспортирование, укладка, уплотнение (формование), и др. неизбежно сопровождаются возникновением и разрушением дисперсных структур.

Как указывается в [1, 2], получение плотных, прочных и долговечных композиционных материалов в значительной степени определяется условиями формирования структуры при перемешивании. Преимущественное значение смещения по сравнению с другими технологическими процессами регламентируется тем, что основы будущей структуры закладываются уже в ходе взаимного распределения образующих ее компонентов при сдвиговой деформации вследствие вращения смешивающих органов машин. Описание поведения большинства дисперсных систем при смещении, а также в разнообразных химико-технологических процессах, осуществляемых при вынужденной конвективной диффузии дисперсных фаз, состоит в построении полной реологической кривой течения. Такие кривые, полученные с помощью ротационных вискозиметров, выражают зависимость эффективной сдвиговой

вязкости от скорости деформации или напряжения сдвига при обязательной реализации изотропности разрушения находящейся в измерительной ячейке системы. В таких условиях сдвиг с заданной скоростью распространяется на весь зазор («чистый однородный сдвиг» по Ребиндеру), чем и определяется изотропный характер разрушения структуры. Поскольку при смещении осуществляется сдвиговое деформирование, то поведение дисперсной системы в зазоре между коаксиальными цилиндрами ротационного вискозиметра в известной степени может моделировать эту операцию. Необходимо отметить, что соблюдение «чистого однородного сдвига» в общем случае нарушается при достижении и превышении некоторой критической концентрации элементов микронеоднородностей в объеме системы. Деформация систем при этом сопровождается необратимым локальным разрывом сплошности. В результате сдвиг распространяется не на весь зазор, а реализуется в относительно тонком слое при сохранении неразрушенной или значительно менее разрушенной структуры в зонах, непосредственно примыкающих к поверхностям разрыва. Таким образом, сдвиговое деформирование дисперсных систем в зазоре коаксиальных цилиндров приводит к существенной перестройке микроструктуры с образованием и развитием одной или нескольких локальных зон сдвига в зависимости от концентрации дисперсной фазы в дисперсионной среде. Этот эффект означает нарушение континуума в изменении линейной скорости по сечению зазора при превышении скорости деформации. Одним из вероятных факторов возникновения локальных зон скольжения, эквивалентных разрыву сплошности, является скачок концентрации вблизи границы образующейся в ходе деформации макронеоднородности.

В рамках теории катастроф, позволяющей моделировать некоторые нарушения непрерывности развивающихся процессов различных видов, для установления наиболее существенных особенностей возникновения зон повышенной плотности можно провести [4, 5] аналогию с образованием скопления частиц («рождением блинов») по Зельдовичу. Теория Зельдовича описывает подобные структурные перестройки при помощи ряда геометрических форм – элементарных катастроф, в том числе и типа «сборка» (с учетом наличия двух сценариев развития процессов формирования уплотнений, а именно: принципов максимального промедления и Максвелла). В первом случае рассматривается модель появления трехпоточковых (*S*-образных) конфигураций. По данному сценарию пересечение траекторий частиц ведет к локальным особенностям, эквивалентным каустикам, возникающим в ре-

зультате пересечения лучей в геометрической оптике и являющимся местами наибольшего скопления частиц. При этом нарушается непрерывность изменения скорости потока. Профиль скорости становится трехзначным: через одну точку пространства проходят с разными скоростями три потока частиц; происходит «перехлест», т.е. образуется складка. Плотность вещества в «блине», ограниченном каустиками, и есть сумма плотностей этих потоков. Такой подход уместен при интерпретации эффекта сжатия структурированных дисперсий; коллапс приводит к появлению слоистости и разрывов в системе. Второй подход иллюстрирует посредством представлений об ударной волне зарождение уплотненных областей при сдвиговом деформировании. Данная модель учитывает соударения частиц, поэтому скачкообразный переход системы в новое состояние при некотором критическом значении скорости деформации сопровождается переносом частиц и их «налипанием» на структуру основного слоя. Такая трактовка описывает процесс «наслаивания» частиц твердых фаз, способствующий формированию уплотненной структуры.

Представляется также информативным описывать возможные схемы распределения скоростей в рабочем зазоре вискозиметра, соответствующие различным вариантам структурных изменений в сдвиговом потоке, за счет привлечения теории нелинейных волн. Поскольку строгий математический анализ достаточно труден, наиболее существенные черты формирования разрывов имеет смысл устанавливать [4] качественно на основе аналогии с исследованиями коллективных явлений в плазме. В модели, учитывающей соударения частиц, возникает ситуация, аналогичная образованию ударной волны (разрыва), которой свойственны крутые перепады профиля. Характер структуры волны зависит от вязкости исследуемой системы. Если вязкость достаточно мала, то общая качественная форма профиля, отвечающая скачку скорости, – ударная волна с затухающей осциллирующей структурой, находящейся перед ее фронтом (пакет солитонов). Чем меньше вязкость, тем больше число осцилляций (разрывов). При возрастании вязкости имеет место обычная ударная волна без осцилляции с монотонной структурой. Таким образом, обычные аperiodические ударные волны и солитонные пакеты трактуются как различные предельные ситуации для одного и того же нелинейного процесса.

Применительно к дисперсным системам эти модельные представления согласуются с экспериментальными результатами: монотонным и осцилли-

рующим профилям соответствуют одиночные и множественные разрывы сплошности.

Выводы.

Главная составляющая физико-химической динамики – это динамика контактных взаимодействий между частицами, определяющая закономерности разрушения и механизм образования, устойчивости структур в дисперсных системах в динамических условиях.

Поскольку строительные композиты могут трактоваться как самоорганизующиеся системы, эволюция которых в пространстве и времени сопровождается образованием диссипативных структур, установление этих закономерностей принятыми инструментальными способами исследования целесообразно дополнить их описанием с единой точки зрения и в единой топологической схеме.

С целью дальнейшего развития данного подхода предлагается использовать моделирование процессов структурообразования на базе представлений о качественных скачках в изменении поведении объекта в сочетании с предположением о возможном мягком характере бифуркации.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 12-03-00473).

Список литературы: 1. *Урьев Н.Б.* Высококцентрированные дисперсные системы / *Н.Б. Урьев.* – М.: Химия, 1980. – 320 с. 2. *Урьев Н.Б.* Физико-химические основы технологии дисперсных систем и материалов / *Н.Б. Урьев.* – М.: Химия, 1988. – 256 с. 3. *Урьев Н.Б.* О возможности анализа кривых течения структурированных дисперсных систем с позиций теории катастроф / *Н.Б. Урьев, Л.Е. Трофимова* // Коллоидный журнал. – 2003. – Т. 65, № 3. – С. 411 – 417. 4. *Трофимова Л.Е.* Моделирование процессов структурообразования дисперсных систем и материалов / *Л.Е. Трофимова, Н.Б. Урьев.* – Одесса: Астропринт, 2011. – 36 с. 5. *Зельдович Я.Б.* Частицы, ядра, Вселенная. Избран. труды / *Я.Б. Зельдович.* – М.: Наука, 1985. – 464 с.

Referens: 1. *Ur'ev N.B.* Vysokokoncentrirovanye dispersnyye sistemy / *N.B. Ur'ev.* – Moscow: Himija, 1980. – 320 s. 2. *Ur'ev N.B.* Fiziko-himicheskie osnovy tehnologii dispersnyh sistem i materialov / *N.B. Ur'ev.* – Moscow: Himija, 1988. – 256 s. 3. *Uriev N.B.* On the Possibility of Flow Curve Analysis of Structured Disperse Systems Using the Catastrophe Theory / *N.B. Uriev, L.E. Trofimova* // Colloid Journal. – 2003. – Vol. 65, № 3. – P. 411 – 417. 4. *Trofimova L.E.* Modelirovanie processov strukturoobrazovanija dispersnyh sistem i materialov / *L.E. Trofimova, N.B. Ur'ev.* – Odessa: Astroprint, 2011. – 36 s. 5. *Zel'dovich Ja.B.* Chasticy, jadra, Vselennaja. Izbran. trudy / *Ja.B. Zel'dovich.* – Moscow: Nauka, 1985. – 464 s.

Поступила в редколлегию (Received by the editorial board) 18.07.14

Исследование закономерностей структурообразования в дисперсных материалах с использованием топологического подхода / Л.Е. ТРОФИМОВА, Н.Б. УРЬЕВ // Вісник НТУ «ХПІ». – 2014. – № 52 (1094). – (Серія: Хімія, хімічна технологія та екологія). – С. 141 – 146. – Бібліогр.: 5 назв. – ISSN 2079-0821.

Проаналізовано процеси структуроутворення дисперсних систем в динамічних умовах з позицій синергетики та теорії катастроф. Дослідницькою програмою передбачено рішення задач, пов'язаних з описом та аналізом таких явищ, коли збільшення інтенсивності технологічного впливу призводить до якісно нової поведінки системи. Показано, що використання нових уявлень для опису еволюції дисперсій в умовах різноманітних технологічних операцій дає можливість підняти на новий рівень моделювання фізико-хімічних процесів при одержуванні сучасних композиційних матеріалів.

Ключові слова: дисперсні системи, структуроутворення, фізико-хімічна динаміка, топологічний підхід.

Research of the regularities of structure formation of disperse materials with the use of topology approach / L.E. TROFIMOVA, N.B. URIEV // Visnyk NTU «KhPI». – 2014. – № 52 (1094). – (Series: Khimiya, khimichna tekhnolohiya ta ecolohiya). – P. 141 – 146. – Bibliogr.: 5 names. – ISSN 2079-0821.

For a number of years, the author, under scientific guidance and with consultations of the chief of Laboratory of High Concentration Disperse Systems of the Institute of Physical Chemistry of the Russian Science Academy, member of the Russian Academy of Natural Sciences, Doctor of Chemistry N.B. Uriev, have been conducting research with aim of determining the consistent pattern of formation, stability and decomposition of structured disperse systems in heterogeneous chemical technological processes of making construction materials with predetermined structure and predictable performance indicators while reducing resource consumption for their production. Research program includes solution of tasks connected to description and analysis of such phenomena when increasing the intensity of technological treatment leads to qualitatively new system behaviour. Understanding the nature of dispersions abnormal rheological behaviour uncovers the possibility of implementation of optimal dynamic condition of the system and corresponding level of isotropic decomposition of the structure, which is the necessary condition for obtaining materials with requested properties. Methodological base of research is the analysis of processes of disperse systems structure formation in dynamic and static conditions from the point of view of synergetics and catastrophe theory. Use of new ideas for disperse systems evolution under conditions of different technological operations let us raise physics-chemical processes modeling to the new level to create modern compositions.

Keywords: disperse systems, structure formation, physics-chemical dynamics, topological approach.