

УДК 541.182

М. И. КУЛАК

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ НА УПРУГИЕ СВОЙСТВА ФРАКТАЛЬНЫХ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ

(Представлено академиком АН БССР И. Н. Ермоленко)

Отличительной особенностью структуры многих неупорядоченных материалов является ее фрактальная (дробная) размерность. Структуры (кластеры) с такой размерностью получаются в результате процессов как химического, так и физического роста — полимеризации, агрегации коллоидов, разделения фаз [1]. Обнаружены они и у ряда соединений природного происхождения — лигнинов, целлюлоз [2, 3].

Наибольший прогресс достигнут в исследовании структуры фрактальных кластеров и основных процессов их агрегации. Вместе с тем необходимость разработки методов интенсификации химико-технологических процессов с участием таких дисперсных систем обуславливает актуальность построения теории структурно-механических свойств как основы их физико-химической механики. Ключевой характеристикой теорий такого рода являются модули упругости, поскольку они определяют не только жесткость и деформативность дисперсных систем материалов, но также их вязко- и термоупругое поведение, прочность и твердость. Существующие асимптотические оценки поведения модулей упругости в области перколяционных фазовых переходов [1] мало пригодны для конкретных расчетов напряженных состояний при различных видах нагружений.

В работе [4] рассмотрены процессы агрегации компонентов в полимерных композитах с дисперсными наполнителями и самосогласованный подход для определения их эффективных упругих свойств. Данная работа посвящена построению в рамках аналогичной теоретической схемы описания распределения упругих свойств в фрактальных кластерах.

Основные типы процессов агрегации и соответствующие им характеристики кластеров приведены в таблице. Значения фрактальной размерности D соответствуют данным [5, 6]. Хотя эти значения получены в результате моделирования на ЭВМ, за каждой из моделей стоят реальные процессы, а в некоторых случаях и группа процессов химической или физической агрегации. Так, агрегация типа частица—кластер с броуновским движением частиц приводит к структурам, наблюдающимся у аэрозольных агрегатов. Химическая модель реализуется в коллоидах, когда электростатическое отталкивание не полностью экранировано. Агрегация типа кластер—кластер имеет место при некоторых видах процессов напыления и осаждения пленок на поверхности и подложки.

При построении распределения модулей упругости в кластерах будем считать, что их скелет выполняет роль матрицы композита, а поры (поры) являются включениями (наполнителем). Упругие харак-

теристики таких включений равны нулю и в рамках самосогласованного подхода объемный K и сдвиговой G модули материала будут определяться следующими соотношениями:

$$K = 4kg(1-n)/(3kn+4g), \quad (1)$$

$$G = g[9k+8g-2n(7k+9g)]/[9k+8g+n(k+2g)], \quad (2)$$

где k и g — объемный и сдвиговой модули материала частиц кластеров; n — объемная доля пор.

Особенность самосогласованного подхода состоит в том, что выра-

Характеристики фрактальных кластеров, образованных при агрегации твердых частиц

Характер процесса агрегации	D	$R, N=10^4$	$R, N=10^5$	$N, R=50$
Частица — кластер, линейные траектории	2.97	22	48	11158
Перколяционные кластеры	2.51	39	98	18383
Частица — кластер, броуновское движение	2.46	42	107	15117
Химическая агрегация	2.04	91	282	2923
Кластер — кластер, линейные траектории	1.94	116	380	1977
Кластер — кластер, броуновское движение	1.77	182	668	1017

жения (1) и (2) определяют эффективные свойства системы при условии, что объемная доля включений мала: $n < 0,1$. Распределение плотности в кластерах известно:

$$\rho = \rho_0(r^{D-d}), \quad (3)$$

где r — безразмерное текущее расстояние, выраженное в долях радиуса частиц; ρ_0 — плотность материала частиц кластеров; $d=3$ — размерность физического пространства. Учитывая, что $n=1-\rho$, условие малости n можно выполнить, используя специальную процедуру.

Выделим в кластере в зоне максимума плотности некоторый объем, содержащий малую объемную долю пор n . По формулам (1) и (2) определим его эффективные характеристики K_1, G_1 . Далее увеличим размер выбранного объема. Если считать, что материал в этом объеме обладает такими же эффективными характеристиками, как и в меньшем объеме, то по отношению к реальным свойствам материала они будут завышенными — при увеличении объема пористость растет. Поэтому для расчета реальных свойств материала нужно учитывать количество пор, равное разности долей пор для второго n_2 и первого объемов n_1 :

$$\Delta n_2 = n_2 - n_1. \quad (4)$$

Используя (1) — (4), получим следующие выражения для вычисления модулей упругости на втором шаге:

$$K_2 = 4K_1G_1(1-\Delta n_2)/(3K_1\Delta n_2 + 4G_1), \quad (5)$$

$$G_2 = G_1[9K_1 + 8G_1 - 2\Delta n_2(7K_1 + 9G_1)] / [9K_1 + 8G_1 + \Delta n_2(K_1 + 2G_1)]. \quad (6)$$

Аналогичным образом выполняются и все последующие шаги. Так, для некоторого произвольного $i+1$ -го шага выражения (5) и (6) будут выглядеть следующим образом:

$$K_{i+1} = 4K_i G_i (1 - \Delta n_{i+1}) / (3K_i \Delta n_{i+1} + 4G_i), \quad (7)$$

$$G_{i+1} = G_i [9K_i + 8G_i - 2\Delta n_{i+1} (7K_i + 9G_i)] / [9K_i + 8G_i + \Delta n_{i+1} (K_i + 2G_i)]. \quad (8)$$

Вычисления заканчиваются после исчерпания всего объема кластера радиусом R .

Поскольку фрактальные кластеры могут получаться в результате процессов агрегации довольно широкого спектра, то естественно возник

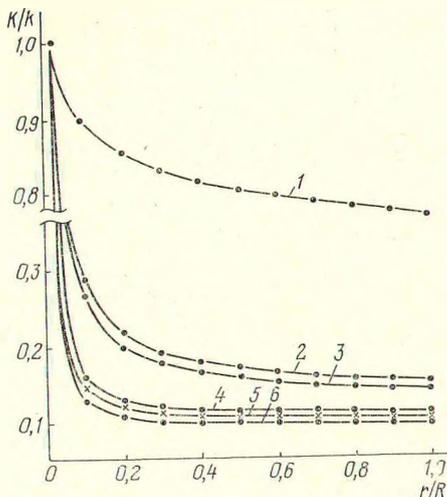


Рис. 1. Распределение объемных модулей упругости в фрактальных кластерах: 1 — $D=2,97$; 2 — 2,51; 3 — 2,46; 4 — 2,04; 5 — 1,94; 6 — $D=1,77$

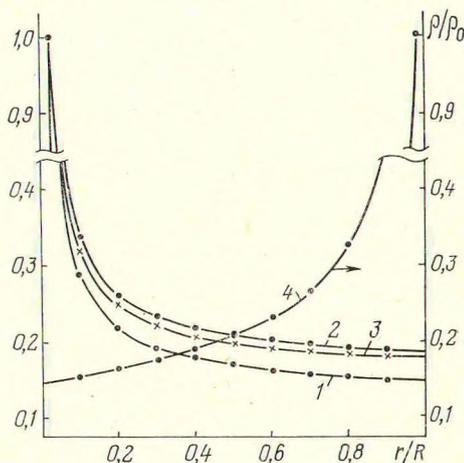


Рис. 2. Распределение модулей упругости и плотности в фрактальном кластере с $D=2,51$: 1 — объемные модули; 2 — сдвиговые модули; 3 — модули Юнга; 4 — относительная плотность

кает вопрос о сопоставимости кластеров. Учитывая, что радиус R и количество содержащихся в кластере частиц N связаны соотношением $N=R^D$, можно фиксировать количество частиц и работать с кластерами, радиусы которых, как видно из данных таблицы, будут различаться на порядок. Однако такой подход не является корректным, так как структурно-механические свойства кластеров зависят не только от их структуры и количества частиц, но не в меньшей степени и от размера. Поэтому конкретные вычисления проводились для кластеров фиксированного радиуса $R=50$ с количеством частиц, обычно принятым при моделировании фрактальных систем $N=10^3-10^6$. Результаты вычислений распределения объемных и сдвиговых модулей упругости в кластерах представлены на рис. 1, 2.

Как видно из графиков на рис. 1, модули упругости значительно, в 5—10 раз, изменяются в пределах размера кластеров, особенно при агрегации типа кластер—кластер. Имеет место также зависимость упругих свойств от конфигурации кластера. Подход позволяет правильно воспроизвести тензорные свойства упругости, что иллюстрирует рис. 2, на котором представлены распределения сдвиговых, объемных и модулей Юнга для кластеров с $D=2,51$. На этом же рисунке приведен закон распределения плотности в кластере. Поскольку плотность имеет конечные значения, то одно из основных условий, которому должны удовлетворять результаты, это конечная жесткость кластеров [1]. Рис. 1 и 2 свидетельствуют о том, что оно выполняется.

Основу разработки методов управления процессами структурообразования и физико-механическими свойствами дисперсных систем и ма-

териалов составляют условия и механизмы формирования контактов между частицами. Результаты работы в данном направлении свидетельствуют, что по своей физико-химической сути предлагаемый подход в большей степени применим для исследования дисперсных структур с фазовыми контактами, либо с контактами переходного типа от коагуляционных к фазовым.

Summary

The paper describes a self-consistent approach to the calculation of the distribution of elasticity moduli in fractal aggregates.

Литература

1. Фракталы в физике / Под ред. Л. Пьетронеро, Э. Тозатти. М., 1988.
2. Кокоревич А. Г., Гравитис Я. А., Озоль-Калнин В. Г. // Химия древесины. 1989. № 1. С. 3—24.
3. Кулак М. И. // Строение древесины и его роль в процессах делигнификации. Рига, 1990. С. 132—135.
4. Кулак М. И. // Докл. АН БССР. 1990. Т. 34, № 9. С. 819—822.
5. Смирнов Б. М. // УФН. 1986. Т. 149, вып. 2. С. 177—219.
6. Жюльен Р. // УФН. 1989. Т. 157, вып. 2. С. 339—357.

*Белорусский технологический институт
имени С. М. Кирова*

Поступило 21.02.91