УДК 539.4.015.2

Л.И. Гречихин, д-р физ.-мат. наук, **Э.Д. Подлозный,** доц.
Минский государственный высший авиационный колледж,
ЧУО «БИП- институт правоведения», г. Минск, Беларусь

ПЛОТНОУПАКОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ И ЕГО РОЛЬ В УПРОЧНЕНИИ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Показано, что плотноупакованное состояние увеличивает энергию связи бинарного взаимодействия между разными материалами в композиционных конструкциях, а на примере формирования высокопрочных бетонов продемонстрирована эффективность применения связующего материала в виде плотноупакованного состояния.
Ключевые слова: *конструкционные материалы плотноупакованное состояние, модуль Юнга, бинарная связь, механические свойства*

Введение. При упрочнении конструкционных и производстве разных композиционных материалов применяют плотноупакованное состояние [1,2]. В первом случае добиваются увеличения механических свойств, а при производстве композиционных материалов плотноупакованное состояние выполняет роль связующего поверхностно активного слоя. Плотноупакованное состояние является по существу пятым агрегатным состоянием вещества и реализуется в естественных и искусственных условиях. В естественных условиях плотноупакованное состояние возникает вблизи абсолютного нуля температуры, а искусственно создают путем нанесения поверхностно активного покрытия из атомов, молекул или кластеров, обладающих сравнительно большим встроенным дипольным электрическим моментом. В этом случае на кластерных структурах других материалов вначале происходит заполнение открытых межкластерных пустот, основного материала, а затем формируются монослои, которые связаны между собой диполь-дипольным взаимодействием вдоль поверхности и нормально к поверхности, как это показано на рис. 1. Такое расположение молекул приводит к плотному монолитному образованию с энергией связи вдоль поверхности, превосходящее энергию связи нормально к поверхности. В результате реализуется не только прочная связь между контактирующими телами, но и упрочнение поверхности исходных материалов во много раз. Плотноупакованное состояние представляет собой новое агрегатное состояние с необычными физико-химическими, механическими, тепловыми, электрическими и магнитными свойствами. В этом направлении уже получены обнадеживающие результаты при создании новых конструкционных материалов [3-5] и широко используется как связующее при производстве многослойных конструкционных материалов, а также бетонов и железобетонов [3-8]. Полученные результаты не достаточно обоснованы. В этой связи возникает **цель**: разработать адекватную модель формирования плотноупакованного состояния и выяснить причину возникновения новых физических свойств, которые выделяют такое состояние в 5-е агрегатное состояние вещества. Поставленная цель может быть достигнута путем решения следующих задач:

• Разработать модель формирования молекул, внутрикластерных структур, межкластерные решеточные структуры на основе двухчастичной квантовой механики.

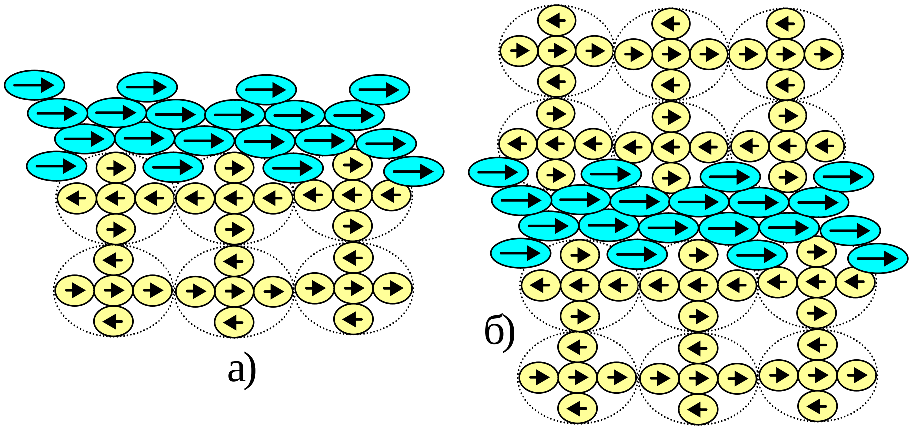

Рис. 1. Примерное располо-жение молекул с большим дипольным электрическим моментом в плотноупакованном состоянии: а) - на поверхности конструкционного материала и б) - между двумя кристаллическими телами, выполняя роль связующего материала

• Рассмотреть в каких условиях происходит переход от одного агрегатного состояния к другому.

• Выяснить, в каких условиях возникает плотноупакованное состояние.

• Определить основные свойства плотноупакованного состояния.

• Какую роль выполняет плотноупакованное состояние в разных композиционных конструкционных материалах.

Последовательно рассмотрим, каким образом решаются поставленные задачи.

Двухчастичная квантовая механика бинарного взаимодействия

Бинарное взаимодействие возникает внутри сложных атомных систем между разными энергетическими состояниями. Это приводит к деформации электронных оболочек. Если это *S*-оболочка, и она взаимодействует с электронами вытянутых состояний *P*- и *D*-оболочек, то сферически симметричное электронное *S*-состояние смещается относительно положительного центра атома вследствие гибридизации волновых функций разных энергетических уровней. В результате внутри сложной атомной системы возникает встроенный дипольный электрический момент отличный от нуля. На эту ситуацию впервые обратил серьезное внимание Ч. Коулсон [11]. Выполненный им расчет смещения *S*-состояния для атома углерода составил 0,471 Å. Такому смещению соответствует встроенный электрический момент $7{,}33\cdot10^{-30}$ Кл·м. Аналогичный расчет был выполнен в работе [9] для атома кислорода и составил $5{,}37\cdot10^{-30}$ Кл·м. Полученные столь большие значения встроенных дипольных электрических моментов в сложных атомных системах должны существенным образом влиять на энергию бинарного взаимодействия, а, соответственно, на физико-механические свойства конденсированных сред, которые формируются сложными атомными системами.

Так как гибридизация волновых функций сложных атомных систем приводит к существенному изменению физических и химических свойств конденсированного состояния, то возникла необходимость разработать методику расчета встроенных дипольных электрических систем для сложных атомных систем. Первая, более простая, теория возникновения встроенного дипольного электрического момента была описана в [10], а более совершенная в [12]. С учетом наличия в сложных атомных системах встроенных электрических моментов стало возможным правильно оценивать дополнительно возникающую связь вследствие электрон-дипольного и диполь-дипольного взаимодействий. В результате при образовании двухатомных молекул энергия бинарной связи существенно уменьшается вследствие отталкивания дипольных электрических моментов ионных остовов. В трехатомных молекулах наоборот диполь-дипольное взаимодействие увеличивает бинарную связь между двухатомной молекулой и атомом в трехатомной молекуле. Бинарная связь между сложными молекулами внутри кластеров и связь между кластерами осуществляется преимущественно электрон-дипольным и диполь-дипольным взаимодействием с учетом суперпозиции электрических полей.

Если суммировать результаты, полученные школой доктора физико-математических наук, профессора Гречихина Леонида Ивановича (5 докторов наук и 2 накануне защиты докторской диссертации), то окончательную систему получения энергий бинарного взаимодействия следует представить в виде следующего блока:

Ковалентная связь

$$E_{ков.} = \begin{cases} -\dfrac{2E_{св}R_0^6}{r^6} + \dfrac{E_{св}R_0^{12}}{r^{12}}, & при \quad r \le R_0; \\ \sum\limits_{i=1}^{3} N_i \kappa_i^2 \left[\sum\limits_{k=0}^{3}\sum\limits_{l=0}^{3} Z_{a,k}^* Z_{b,l}^* \int\limits_{(a)} \int\limits_{(b)} \rho_{e,a}(\varepsilon_k)\rho_{e,l}(\varepsilon_l) \left(\dfrac{H_{1,1}+H_{1,2}}{1+S} \right) d\varepsilon_k d\varepsilon_l \right] & > \quad {}_0. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь R_0 – равновесное расстояние между взаимодействующими частицами; $E_{ков.}$ – результирующая энергия связи на равновесном расстоянии; N_i – число частиц в i-й координационной сфере; κ_i –коэффициент видности; $Z_{a,k}^*, Z_{b,l}^*$ - эффективные заряды взаимодействующих частиц; $\rho_{e,a}(\varepsilon_k), \rho_{e,b}(\varepsilon_l)$ - распределение электронной плотности вокруг силовых центров взаимодействующих частиц k-ом и l-ом энергосостояниях; $H_{1,1}$, $H_{1,2}$ и S -соответственно интегралы кулоновский, обменный и перекрытия, определяемых по методу Гайтлера-Лондона.

Ионная связь. Ионная связь определяется по времени пребывания валентных электронов вблизи взаимодействующих частиц и определяется следующим образом:

$$E_{ион} = \left[(1-P_1)P_2 + (1-P_2)P_1\right] S(1-S)\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R_0}. \quad (2)$$

Здесь P_1 и P_2 – соответственно вероятность пребывания валентного электрона вблизи первой частицы и вблизи второй частицы, а S – интеграл перекрытия двухчастичной квантовой механики.

Наведенная энергия связи. В процессе обмена валентными электронами между взаимодействующими частицами возникает увеличенная плотность электронного облака. Это облако отстоит от первой и второй взаимодействующих частиц на величину ковалентного радиуса, уменьшенного на величину толщины электронного облака перекрытия. Тогда

$$E_{нав.} = P_1 P_2 (1-S)^2 \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{Z_1^*}{r_1} + \frac{Z_2^*}{r_2}\right]. \quad (3)$$

Энергия связи точечного заряда – диполь

$$E_{e-d} = 2P_1(1-P_2)(1-S)S\frac{ep_{э,2}}{4\pi\varepsilon_0 R_0^2} - (1-P_1)P_2(1-S)S\frac{e(p_{Э,1}-p_{Э,2})}{4\pi\varepsilon_0 R_0^2}, \quad (4)$$

где $p_{э,1}$ и $p_{э,2}$ – встроенные дипольные электрические моменты ионов взаимодействующих частиц, а появление члена (1 – S) в (4) обусловлено тем обстоятельством, что взаимодействие точечный заряд-диполь не реализуется при нахождении обоих валентных электронов вблизи одного из атомов. В этом случае возникает доля ионной связи и полностью исключается взаимодействие точечный заряд-диполь.

Диполь-дипольное взаимодействие. В общем случае диполь-дипольное взаимодействие определяется по формуле [6]:

$$E_{дип-дип} = \frac{p_{э,1} p_{э,2} \varphi(\alpha_i, N_i)}{4\pi\varepsilon_0 R_0^3}. \quad (5)$$

Здесь R_0 – равновесное расстояние в конденсированной фазе, определяемое из плотности вещества; $\varphi(\alpha_i, N_i)$ - функциональная связь от взаимного расположения электрических диполей в структуре конденсированной среды.

Таким образом, сложное по своей конфигурации электрическое поле, формируемое диполями, приводит к тому, что следует учитывать взаимное расположение диполей друг относительно друга, которое формируется строением кристалла.

Диполь-дипольное взаимодействие в первом ближайшем слое ослабляется крутильными колебаниями электрических диполей в плоскостях XZ и YZ. Это две степени свободы, поэтому $E_{дип,рез}(1) = E_{дип,0} + k_Б T$. При взаимодействии со вторым и третьим слоями добавляются еще две степени свободы, обусловленные колебаниями частиц вещества в плоскости, перпендикулярной радиусу, соединяющего взаимодействующие частицы. Тогда

$$E_{дип,рез}(2,3) = E_{дип,0} + 2k_Б T. \quad (6)$$

В конденсированном состоянии на основании закона Дюлонга и Пти тепловая энергия распределена по шести степеням свободы. Поэтому в этом случае

$$E_{св.,рез.} = E_{св.,0} + 3k_Б T. \quad (7)$$

Образование кластеров. Кластерная модель конденсированного состояния четко определена в работах [9,10]. Особенно в жидкостях ближний порядок формируется внутри кластеров, а в свободном пространстве находятся исходные частицы вещества, которые совершают трансляционное движение между кластерами. Плотность упаковки частиц в кластере соответствует плотности упаковки кристалла (0,68 – 0,74). Плотность упаковки свободных частиц вещества в межкластерном объеме составляет 0,44 – 0,47 [13]. Это экспериментальный факт, полученный с применением метода молекулярной динамики совместно с рентгеноструктурным анализом.

Взаимодействие с первой координационной сферой формирует кластер с наиболее плотной упаковкой частиц и с наибольшей энергией связи. Это основной кластер, который содержит 7 атомов в случае простой кубической структуры; 9 атомов в случае объемоцентрированной структуры и 13 атомов содержится в гранецентрированной структуре. Основной кластер, взаимодействуя со свободными атомами межкластерного объема, может увеличиваться в размерах с понижением температуры. Энергия связи свободного атома с кластером определяется ковалентной связью и энергией физической адгезии, определяемой электронами второй и последующей кратности ионизации с ближним окружением ячейки адгезии. При низких температурах свободные атомы в межкластерном объеме отсутствуют. Межкластерное взаимодействие уплотняет структуру и тогда каждый атом обладает энергией связи, которая обусловлена ковалентной связью со всеми атомами всех трех координационных сфер. В этом случае все вещества, в том числе и металлы, представляют собой ковалентные кристаллы. Формируется некое замороженное состояние с плотной упаковкой кластеров. При этом граница между кластерами исчезает и отсутствует между ними свободное пространство. При этом атомы (молекулы) третьей координационной сферы обобщаются.

Кластер объемоцентрированной структуры представляет собой четырехгранную бипризму, а гранецентрированная структура – трехгранную бипризму [10], а их плотная упаковка создает в кристалле соответствующую структуру. По мере распада монолитного кристаллического состояния при низких температурах на отдельные кластеры энергия связи частиц второй и третьей координационных сфер существенно изменяется, но расположение частиц в структуре остается неизменной.

Количество частиц в кластере определяется следующим образом:

$$N_{кл.} = \sum_{i=1}^{4} W_i N_i \qquad (8)$$

где N_i – число частиц в i –ой координационной сфере и W_i – вероятность того, что частица вещества связана с кластером и не находится в свободном пространстве, совершая трансляционное движение. Эта вероятность определяется с использованием функции распределения Максвелла-Больцмана.

Количество связанных частиц в кластере с ростом температуры практически падает по линейному закону, а количество свободных частиц, приходящихся на один кластер, возрастает по линейному закону [9,10].

В решеточной кластерной структуре при равновесном расстоянии R_0 в зависимости от расположения кластеров относительно друг друга возникают межкластерные пустоты. Для ГЦК структуры - это пустоты $4{,}05R_0$, $3R_0$, $1{,}5R_0$, $0{,}5R_0$ и $0{,}3092R_0$, а для ОЦК структуры – $3{,}63R_0$, $1{,}5R_0$ и $0{,}4142R_0$,. Пустоты $4{,}05R_0$, $3R_0$, и $0{,}3092R_0$ ГЦК структуры; $3{,}63R_0$ и $0{,}4142R_0$ ОЦК структуры имеют сфероидальную форму, а остальные пустоты – щелевидную форму и расположены хаотически друг относительно друга [9,10]. Ранее полагалось, что это трещины. Наличие щелевидных пустот в кристалле является причиной возникновения дислокаций.

В обменном взаимодействии между кластерами участвуют свободные изолированные атомы вследствие трансляционного движения внутри межкластерных пустот.

С ростом температуры энергия теплового движения становится выше энергии межкластерного взаимодействия, а это приводит к тому, что кластеры совершают поступательное движение в жидкости как свободные частицы. Вероятность полной свободы определяется как разность ($1 - W_i$). Находясь в жидком состоянии, связь между кластерами равна нулю, а связь со свободными атомами в конденсированном состоянии определяется обменным взаимодействием вследствие непрерывной бомбардировкой свободных атомных (молекулярных) систем. Обменное взаимодействие такого сорта обладает сферической симметрией. Поэтому кластеры не разлетаются, а хаотическое силовое взаимодействие приводит к тому, что жидкость, находясь к каком-то объеме полностью занимает этот объем. Когда под действием внешнего воздействия силовая хаотическая связь приобретает определенное направление, тогда возникает квазикристаллическая структура расплава, которая сформулирована в [10]. Реализуется жидкокристаллическое состояние.

Решеточные кластерные структуры расположены послойно и вставлены друг в друга так, что центры кластеров отстоят в горизонтальном и вертикальном направлениях на один монослой.

При создании разных композиционных материалов энергией связи в кластерных образованиях управляют путем введения частиц, которые с основой связаны не столь значительно по сравнению с атомами внешней оболочки кластера. Поэтому кластер содержит ядро, атомы которого обладают наибольшей энергией бинарного взаимодействия. Кластер сохраняет свою исходную структуру с повышением и с понижением температуры расплава, а на поверхности твердого тела является упрочняющим покрытием, т.е., тем образованием, которое увеличивает твердость и износостойкость конструкционных материалов. Учитывая это обстоятельство, рассмотрим, как происходит переход от одного агрегатного состояния к другому.

Переход от одного агрегатного состояния к другому

Энергия бинарной связи между частицами определяется следующими взаимодействиями: 1) атомов внутри основного кластера, 2) атомов второй координационной сферы с основным кластером, 3) атомов третьей координационной сферы с кластером, сформированным атомами первой и второй координационных сфер и 4) межкластерным взаимодействием. Результирующая энергия связи с учетом температурного фактора запишется так [10]

$$E_{св.,рез.} = \sum_{i=1}^{4} N_i \left(\left| E_{св.,i} \right| - W_i n_i k_Б T / 2 \right), \tag{9}$$

где W_i – вероятность передачи энергии колебания атомов i-й координационной сферы окружающим атомам и кластерам, а также кластеров друг другу; N_i – число атомов (молекул) в координационной сфере; $E_{св.,i}$ – энергия бинарной связи центральной частицы с частицами внутри кластера всех i-х координационных сфер. Разрыв каждой из связей произойдет в том случае, когда отдельные частицы в рассматриваемом бинарном взаимодействии будут обладать тепловой энергией, больше энергии бинарной связи с окружающими частицами, т.е., когда $W_i n_i k_Б T / 2 \geq E_{св.,i}$. Если энергия связи для первой координационной сферы больше энергии теплового движения, то при непрерывном столкновении молекул газа друг с другом возникают сложные молекулярные комплексы. При этом произойдет выделение энергии в виде электромагнитного излучения. Когда такое излучение полностью поглощается окружающими частицами, тогда их кинетическая энергия возрастает и при столкновении с образовавшейся молекулой будет передана энергия равная той, которая была получена в результате предыдущего бинарного взаимодействия. Наступит динамическое равновесие, и газообразное агрегатное состояние не изменится.

С понижением температуры энергия теплового движения окажется меньше бинарного взаимодействия центральной частицы с частицами первой координационной сферы внутри кластера. В таких условиях будут образовываться молекулярные комплексы в виде основных кластеров. При этом взаимодействие основного кластера со второй и третьей координационными сферами достаточно слабое и не превышает энергию теплового движения. Вследствие этого между основными кластерами взаимодействие отсутствует, и между ними возникают свободные атомы (молекулы) данного вещества. Такое состояние соответствует жидкому агрегатному состоянию.

В жидком состоянии непрерывно осуществляется перестройка частиц вещества и создается и исчезает структура с максимальной упаковкой. В соответствии с минимумом потенциальной энергии в ближнем порядке возникает наиболее плотная упаковка с ГЦК структурой, в которой разорваны связи со второй и третьей координационными сферами. Формируются кластеры с 13 атомами: 6 атомов в одной плоскости и по 3 атома над и под этой плоскостью с учетом центрального атома. В жидком состоянии возникают фазовые переходы первого рода: испарение, кипение и конденсация. В процессе испарения частицы жидкости, покидая поверхность, преодолевают потенциальный барьер, определяемый по (9). Поток испарившихся частиц зависит от температуры поверхности и от энергии связи частиц внутри жидкости, а в случае твердого тела возникает процесс абляции. Энергия связи частиц внутри жидкости определяется обменным взаимодействием свободных частиц с основным кластером.

По мере уменьшения температуры количество свободных частиц между кластерами уменьшается, а количество частиц в кластере возрастает. Как только первый координационный слой полностью заполняется и начинает формироваться второй координационный слой, то обменное взаимодействие кластеров со свободными частицами существенно уменьшается и происходит переход от жидкого состояния к твердому телу.

Наличие свободных атомов (молекул) в межкластерном объеме приводит к возникновению дополнительной обменной энергии взаимодействия, которая удерживает кристаллическое твердое тело в своем агрегатном состоянии до тех пор, пока в межкластерном объеме не появится дополнительно новая частица с ростом температуры. Два атома в межкластерном объеме неизбежно образуют двухатомную молекулу. Тогда резко уменьшится энергия обменного взаимодействия и возникнет фазовый переход первого рода – плавление. В этом заключается основной закон природы: *каждое агрегатное состояние автоматически препятствует своему изменению.*

Для кристаллического состояния характерны фазовые переходы второго рода, обусловленные изменениями в структуре, когда полностью разрывается бинарная связь с третьей координационной сферой. Для ГЦК структуры связь с третьей координационной сферой незначительная и в нормальных условиях энергия связи определяется взаимодействием с первой и второй координационными сферами. Поэтому для этой структуры фазовый переход второго рода может иметь место при разрыве связи со второй координационной сферой. Однако это достаточно редкий случай, поскольку разрыв бинарной связи со второй координационной сферой определяет фазовый переход первого рода – плавление.

При фазовых переходах второго рода происходит не только изменение энергии связи, но и заметно увеличивается объем вещества. Атомы второй и первой координационных сфер не уплотняются третьей координационной сферой. Начинается перестройка частиц в направлении обеспечения новой структуры с минимумом потенциальной энергии связи, в которой включается связь с третьей координационной сферой. Когда вновь рвется связь с третьей координационной сферой, начинается новая перестройка. Вследствие этого происходит переход ОЦК в ГЦК структуру. В первой координационной сфере вместо 8 атомов присутствуют уже 12 атомов, а во второй координационной сфере вместо 4 атомов – 6 атомов. Происходит уплотнение структуры, которое оказалось возможным вследствие разрыва связи с третьей координационной сферой в ОЦК структуре. Такое уплотнение возможно только при заметном увеличении объема вещества вследствие наличия большего числа частиц в единичной ячейке кристалла.

При обратном превращении ГЦК в ОЦК структуру более плотная упаковка с большей энергией связи преобразуется в менее плотную ОЦК структуру. Однако в этом случае энергия бинарного взаимодействия может оказаться выше, чем для ГЦК структуры. В этом случае ГЦК структура должна самопроизвольно переходить в ОЦК структуру с выделением энергии. Но при этом необходимо обеспечить разрыв связи в ГЦК структуре с 12 парами в первой координационной сфере и 6-ю парами связей со второй координационной сферой, а новое образование содержит только 8 пар связей с первой координационной сферой и 6 пар связей – со второй координационной сферой. В итоге приходится затрачивать энергию на разрыв связей больше, чем ее получается при формировании новых связей.

Как только формируется кластер с третьей координационной сферой, то в межкластерных объемах свободные атомы (молекулы) пропадают, и частицы третьей координационной сферы обобщаются и выполняют роль связующих частиц между кластерами. Возникает плотноупакованное состояние.

Плотноупакованное состояние

Вероятность образования монолитного плотноупакованного состояния при низких температурах (вблизи абсолютного нуля) определяется энергией связи каждой частицы вещества с частицами третьей координационной сферы и равна

$$W = \int_{0}^{E_{св.3}} f(E,T)dE \qquad (10)$$

Здесь $E_{св.3}$ – энергия бинарного взаимодействия частиц монолита с частицами третьей координационной сферы.

Плотноупакованное состояние может возникать и при высоких температурах. Например, при охлаждении жидкости или при пластической деформации под действием сил поверхностного натяжения кластеры, обладающие дипольным электрическим моментом, выстраиваются вдоль одного из направлений. Поэтому в приповерхностных слоях энергия связи на одну частицу возрастает на величину электрон-дипольного и диполь-дипольного взаимодействия. Присутствие такого слоя особенно хорошо проявляется на деформационных кривых хрупких материалов, энергия связи у которых определяется преимущественно диполь-дипольным взаимодействием [9,10].

В процессе нанесения упрочняющих покрытий было замечено, что с ростом толщины, покрытие отслаивается от основного материала, тогда как при малых толщинах происходит заметное упрочнение конструкционных материалов. Когда атомы, молекулы упрочняющего материала обладают встроенным электрическим моментом, то они на поверхности основы выстраиваются, так, чтобы была реализована максимальная связь с основой и максимальная связь между частицами нанесенного поверхностного слоя. В этом случае энергия взаимодействия между частицами определяется ковалентной, ионной, электрон-дипольной и диполь-дипольной связями. В результате возникает плотноупакованный слой. По мере роста толщины нормально к поверхности электрон-дипольная и диполь-дипольная связи ослабевают и в плотноупакованном слое начинают формироваться кластеры. Межкластерное взаимодействие резко падает как с основой, так и между кластерами поверхностного слоя. Вследствие этого происходит отслаивание.

Искусственно созданное плотноупакованное состояние реализуется в основном на наноуровне. Поэтому в настоящее время возникла революционная ситуация в развитии физики и техники на наноразмерном уровне. Особенно в материаловедении наблюдается резкая интенсификация в получении новых материалов с необычными свойствами.

Механические свойства плотноупакованного состояния

Монолитный плотноупакованный слой не обладает пористой структурой и это обуславливает его особые физико-механические свойства. Значительно возрастает модуль Юнга и твердость композиционного материала. Кратко рассмотрим эти свойства на примере карбоната кальция. Карбонат кальция представляет собой последовательное взаимодействие молекулы оксида кальция с молекулой диоксида углерода, как это показано на рис. 2. Результирующий встроенный дипольный электрический момент молекулы карбоната кальция ~ 12 D (Дебая).

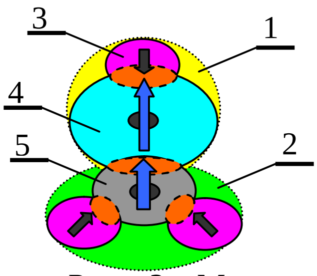

Рис. 2. Молекула карбоната кальция:
1 – молекула CaO;
2 – молекула CO_2;
3 – атом кислорода;
4 – атом кальция;
5 – атом углерода

Механические свойства конструкционных материалов определяются величиной модуля Юнга, который определяется градиентом энергии бинарной связи между частицами конденсированного состояния [6-10]:

$$E = \frac{U(r) - U(r_0)}{r_0 S_{кл.} e^2}, \qquad (11)$$

где $U(r)$, $U(r_0)$ – потенциалы взаимодействия на расстоянии r между взаимодействующими частицами и на равновесном удалении r_0; $S_{кл.}$ – площадь кластера; e – относительная деформация. Конкретные расчеты модулей Юнга были выполнены для плотноупакованного слоя карбоната кальция, которые составили при температуре 298 K и величины сжатия $e = 0{,}005$ вдоль слоя $5{,}5 \cdot 10^{10}$ Па и поперек слоя $1{,}7 \cdot 10^{11}$ Па, а при связи с частицами кремнезема модуль Юнга в этих же условиях составляет $1{,}0 \cdot 10^{11}$ Па. Для бетона модуль Юнга зависит от направления приложенной нагрузки. Обычно бетон невозможно выполнить в виде монокристалла. Поэтому для поликристаллического бетона максимальное значение модуля Юнга для высокопрочного бетона с фиброй было получено $4{,}16 \cdot 10^{10}$ Па [14]. С данными эксперимента теоретический расчет отличается незначительно.

Взаимодействие кластеров карбоната кальция с кластерами глинозема обуславливает более высокое значение модуля Юнга. Когда армирование бетона выполняется обычными железными стержнями, кластеры магнетита своими электрическими диполями выстраиваются перпендикулярно поверхности стержня. Кластер карбоната кальция, взаимодействуя с такими кластерами, обладает сравнительно высокой энергией связи, но структура кластеров карбоната кальция получается не очень плотная. Однако даже в этом случае модуль Юнга обладает сравнительно высоким значением.

Пути повышения механических свойств конструкционных материалов

Для увеличения механических свойств конструкционных материалов применяют разного рода упрочнения и армирование. Особое значение приобрело газопламенное, плазменное, лазерное упрочнение путем нанесения упрочняющего покрытия, а также армирование бетонов железной оснасткой. Железная оснастка выполняется железными прутьями после ковки и термической обработки. В этом случае поверхность прутьев покрыта плотноупакованным слоем молекул магнетита Fe_2O_3, дипольные электрические моменты которых выстроены преимущественно вдоль поверхности арматуры. Это способствует тому, что энергия связи молекул карбоната кальция возрастает с основой до 0,254 эВ и модуль Юнга составляет $6.5 \cdot 10^{10}$ Па. Если произвести заметную пластическую деформацию, то у поверхности арматуры кластеры магнетита выстроятся вдоль нее. Толстые стержни для этого не пригодны. Следует использовать тонкую проволоку класса В-II диаметром 3 - 5 мм, которую можно растянуть с большим усилием до границы пластической деформации.

Кластер карбоната кальция в данном случае взаимодействует с двумя кластерами магнетита и заполняет межкластерную пустоту. В результате диполь-дипольного взаимодействия энергия кластера карбоната кальция с основой возрастает почти в два раза. Соответственно и модуль Юнга возрастает в 1,85 раза по сравнению с железными стержнями в качестве арматуры. Учитывая, что карбонат кальция на поверхностях частиц песка заполняет разного рода трещины, то, уменьшая помол песка, достигают заметного увеличения модуля Юнга и соответственно увеличивается твердость бетона.

Чтобы получить высокопрочный бетон необходимо увеличить энергию связи на единицу массы. Выход был найден путем применения фибры. Вначале применялась мелко нарубленная проволока, а в настоящее время в качестве фибры используют нанотрубки. Плотность бетона уменьшается, а величина связи на единицу массы возрастает. В результате полученные экспериментальные данные по механическим свойствам бетона приблизились к теоретически найденным значениям.

Выводы: В проведенных исследованиях разработана модель формирования сложных молекул, внутрикластерных структур, межкластерных решеточных структур с применением двухчастичной квантовой механики.

Выяснены причины, при которых происходит переход от одного агрегатного состояния к другому.

Дано обоснование условий возникновения плотноупакованного состояния и определены механические свойства такого состояния.

Показано, что плотноупакованное состояние существенно увеличивает энергию связи бинарного взаимодействия между разными материалами в композиционных конструкциях, а на примере формирования высокопрочных бетонов продемонстрирована эффективность применения связующего материала в виде плотноупакованного состояния.

Список литертуры:

1. Гречихин Л. И. Явление образования монолитных упрочняющий слоев в строительных композитах. / Л. И. Гречихин, Э. Д. Подлозный // Наукові нотатки. Міжвузівський збірник (за галузями знань «Машинобудування та металообробка», «Інженерна механіка», «Металургія та матеріалознавство») – ЛНТУ. 2011. - Вип. 31. - С. 100-108.

2. Гречихин Л. И. Плотноупакованное состояние – основа нанотехнологий.

3. Гречихин Л. И. // Сб. трудов XIX международной научно-технической конференции в г. Севастополе 17-22 сентября 2012 г. В 3-х томах. – Донецк: ДонНТУ, 2012. - Т. 1. - С. 195 – 197.

4. Проектирование, изготовление и эксплуатация высокоресурсных конструкций из МПКМ. / В. И. Постнов, И. А. Казаков, П. А. Абрамов и др. // Современные научно-технические проблемы транспорта. Сб. научных трудов IV международной научно-технической конференции 11-13 октября 2007. – Ульяновск: УлГТУ, 2007. -С. 229 - 223.

5. Возможности метода вакуумной прокатки как способа получения многослойных композитов с нанометрическими толщинами слоев / М. И. Карпов, В. И. Внуков, К. Г. Внуков и др. // Материаловедение, 2004. - №1. - С. 48 - 53.

6. Многослойный композит Cu – Fe с нанометрической толщиной слоев / М. И. Карпов, В. И. Внуков, Н. В. Медведь, и др. // Материаловедение, 2005. - №1. - С. 36 – 39.

7. Подлозный Э. Д. Нанотехнология производства упрочненного композита на основ кремнезема и глинозема, армированных кластерами карбоната кальция. / Э. Д. Подлозный, Л. И. Гречихин //Машиностроение. Республиканский межведомственный сборник научных трудов. Мн. 2012. - Т.2. Вып. 26. - С. 259-264.

8. Витязь П. А. Нанотехнология производства упрочненного бетона с различной матрицей композита. / П. А. Витязь, Э. Д. Подлозный, Л. И. Гречихин // Вести Национальной академии наук Беларуси, 2010. - № 1. - С. 5-13.

9. Гречихин. Л. И. Анализ непрерывного армирования предварительно напряженных железобетонных конструкций на наноуровне. / Л. И. Гречихин, Э. Д. Подлозный // Сб. Механіка руйнування матеріалів і міцність конструкцій / Під заг. ред. В.В. Панасюка. – Львів: Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенко НАН України, 2009. С. 315-320.

10. Гречихин Л. И. Физика наночастиц и нанотехнологий. Общие основы, механические, тепловые и эмиссионные свойства / Л. И.Гречихин // Мн.: УП Технопринт, 2004. – 398 с.

11. Гречихин Л. И. Наночастицы и нанотехнологии / Л. И. Гречихин // Мн.: Право и экономика. 2008. – 406 с.

12. Коулсон Ч. Валентность / Ч. Коулсон // М.: Мир, 1965. – 426 с.

13. Гречихин Л. И. Наноуровень обоснования ОКГ конденсированных сред. /Л. И. Гречихин, Ю. Шмермбекк // Мн.: «Право и экономика». - 2010. – 75 с.

14. Еланский Г. Н. Строение и свойства металлических расплавов. / Г.Н.Еланский //М.: Металлургия. - 1991. – 160 с.

15. Пушенко А. С. Высокопрочный бетон в условиях воздействия высоких температур при пожаре / А. С. Пушенко // Автореф. дис. канд. техн. наук (05 23 05). Ростов на Дону. - 2008.

L.I. Grechikhin, E.D. Podlozny

CLOSE-PACKED STATE AND ITS ROLE IN THE HARDENING OF CONSTRUCTION MATERIALS

It is shown that the close-packed state increases the binding energy of the binary interaction between the different materials in composite structures, and using the example of high-strength concrete demonstrated the effectiveness of the binder in the form of a close-packed state.

Keywords: *construction materials close-packed state, Young's modulus, a binary relation, the mechanical properties*

Л.І. Гречихин, Е.Д. Подлозний

ЩІЛЬНОУПАКОВАНИЙ СТАН ТА ЙОГО РОЛЬ У ЗМІЦНЕННІ КОНСТРУКЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ

Показано, що щільноупакований стан збільшує енергію зв'язку бінарної взаємодії між різними матеріалами в композиційних конструкціях, а на прикладі формування високоміцних бетонів продемонстрована ефективність застосування сполучного матеріалу у вигляді щільноупакованого стану.

Ключові слова: *конструкційні матеріали щільноупакований стан, модуль Юнга, бінарний зв'язок, механічні властивості*

Надійшла до редколегії 14.06.2013 р.