

**ВЛИЯНИЕ ИСТИННОЙ ПЛОТНОСТИ
ЧАСТИЦ ПОРОШКОВЫХ СИСТЕМ
НА ИХ ФРАКТАЛЬНУЮ РАЗМЕРНОСТЬ**

М. Д. Мордасов, А. В. Фирсова, Д. М. Мордасов

*Кафедра «Материалы и технология», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия;
e-mail: mit@mail.nnn.tstu.ru*

Ключевые слова: истинная плотность; кластер; порошковая система; самоподобие; степень ионности; степень ковалентности; фрактальная размерность; химическая связь.

Аннотация: На основе фрактального анализа порошковых систем получена зависимость фрактальной размерности от истинной плотности материала их частиц. С позиций современных представлений о химических связях обоснован характер изменения фрактальной размерности металлических и неметаллических дисперсных систем в зависимости от плотности частиц твердой фазы. Показано, что повышение степени ковалентности химической связи приводит к уменьшению фрактальной размерности порошков гомоядерных соединений, а фрактальная размерность дисперсных систем из гетероядерных неметаллических соединений растет с увеличением степени ионности их химической связи.

При создании порошковых композиционных материалов с заранее заданными свойствами широко применяется моделирование с использованием аппарата фрактальной геометрии [1]. Фрактальные объекты характеризуются самоподобием в широком диапазоне масштабов, ограниченном снизу размерами молекул или атомов. Одной из основных характеристик фрактальных систем является фрактальная размерность, которая, как правило, имеет нецелочисленное значение.

Методы определения фрактальной размерности дисперсных систем основаны на гипотезе масштабной инвариантности их структуры [2 – 7]. В работах [2, 8, 9] показано, что сыпучие материалы представляют собой фрактальные объекты, моделирование которых может быть осуществлено либо с применением регулярных, построенных по детерминированным алгоритмам фракталов (монофракталов), либо исходя из предположения их мультифрактальности. Рассмотрение сыпучих материалов как мультифрактальных объектов с физической точки зрения является наиболее правильным. Мультифрактальность состоит в том, что в зависимости от размеров изучаемых кластеров, последние характеризуются спектром фрактальных размерностей. Обобщенная фрактальная размерность в данном случае, согласно современным представлениям о мультифракталах [10], будет больше, чем фрактальная размерность любого из фракталов, образующих

фрактальное подмножество. По большей части это связано с изменением концентрации твердой и газовой фаз в слое при увеличении размера кластера. Очевидно, что чем шире диапазон исследуемых объемов материалов, тем сильнее проявляется степень влияния на фрактальную размерность плотности упаковки (из-за увеличения давления вышележащих слоев на нижние), а влияние таких величин, как истинная плотность материала частиц, их форма и фактор неравноосности, не изменяющихся при изменении объемов кластеров, ослабевает.

Для определения фрактальной размерности D сыпучих материалов различной дисперсности проведены исследования в соответствии с методикой, основанной на экспериментальном установлении закона распределения агрегатов (кластеров) по размерам и массам [11 – 15]

$$D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(d + \ln \left(\frac{\rho_{кли}}{\rho_{и}} \right) / \ln \left(\frac{L_i}{d_{ч}} \right) \right),$$

где N – число кластеров; d – топологическая (евклидова) размерность физического пространства; $\rho_{кли}$ – плотность i -кластера; $\rho_{и}$ – истинная плотность материала частиц кластера; L_i – размер i -кластера; $d_{ч}$ – средний размер частиц.

Выделение однородных фрактальных подмножеств осуществлялось путем анализа характера зависимости концентрации твердой фазы кластера от его размера. Убывающий характер такой зависимости указывает на относительную однородность кластеров в исследуемом диапазоне масштабов.

Результаты определения фрактальной размерности металлических порошков и неметаллических сыпучих материалов различной дисперсности в соответствии с разработанной методикой [13 – 15] приведены в табл. 1. Массы насыпных объемов измерялись на электронных весах ВЛ-120С с погрешностью ± 1 мг. Для определения формы частиц из суспензии, полученной диспергированием материала

Таблица 1

**Характеристики исследуемых материалов
и результаты определения их фрактальной размерности**

Материал	$\rho_{и}$, г/см ³	$d_{ч}$, мкм	Фактор неравноосности	D
ПМС-1 (Cu)	8,93	100	2,30	2,699
ПНЭ-1 (Ni)	8,80	60	1,00	2,801
ПК-1У (Co)	8,75		2,00	2,747
ПЖРВ 2.200.26 (Fe)	7,85	160	1,00	2,793
ПОЭ (Sn)	7,28	100		2,907
Волластонит (Wo)	2,94	30	4,00	2,826
Песок (Sd)	2,65	100	1,36	2,871
Маршалит (M)	2,62	30	1,00	2,837
Тригидрат алюминия (Al(OH) ₃)	2,42	7	1,25	2,821
Графит ГС (G)	2,23	100	2,00	2,717
Шунгит (Sh)	2,10	1900	2,20	2,692
Уголь АГ (C1)	1,80	1950	2,37	2,555
Уголь БАУ-А (C2)		2000	2,50	2,423

в дисперсионной жидкости, на предметном стекле формировался монослой частиц, который изучался при помощи оптического микроскопа. Фактор неравноосности рассчитывался как отношение наибольшего линейного размера частицы к ее наименьшему размеру.

На рисунке 1 представлена зависимость изменения фрактальной размерности от истинной плотности металлических и неметаллических материалов, откуда видно, что с ростом истинной плотности фрактальная размерность неметаллов – увеличивается, металлов – уменьшается. Характер изменения фрактальной размерности полуметаллов (Ge, As, Te, At, Sb) в зависимости от их плотности определяется типом связи их атомов. Полученные закономерности могут быть объяснены с позиций современных представлений о химических связях [16, 17].

Конечные свойства материалов в значительной мере определяются энергией взаимодействия их отдельных структурных элементов (атомов, молекул) друг с другом [18]. Самоподобие материалов состоит в том, что в основе их базовой структуры лежат индивидуальные соединения с различными типами химической связи, определяющие строение последующих масштабных уровней структурной организации.

Плотность вещества в значительной мере определяется энергетическими характеристиками связи их отдельных структурных элементов (атомов, молекул) друг с другом. Любой тип химической связи всегда является смешанным и может быть охарактеризован соотношением основных компонент, отвечающих трем предельным типам связи (ковалентный, металлический, ионный) [16]. Фундаментальной компонентой любого типа химической связи является ковалентность. Под ковалентностью, согласно [16], следует понимать способность обобществленных электронов к локализации в межъядерном пространстве вдоль линии, соединяющей центры ядер или атомных остовов.

В таблице 2 приведены данные о величинах основных компонент гомо- и гетероядерных связей (C_k , C_m , C_i – степени ковалентности, металличности и ионности соответственно) [16]. Отсутствие данных о величинах компонент гетероядерных связей в таких неметаллических материалах, как $Al(OH)_3$, $Ca_3(Si_3O_9)$ – волластонит, шунгит, связано с тем, что их определение является сложной фундаментальной задачей, которая для некоторых минералов практически не разрешима в силу их сложного химического состава.

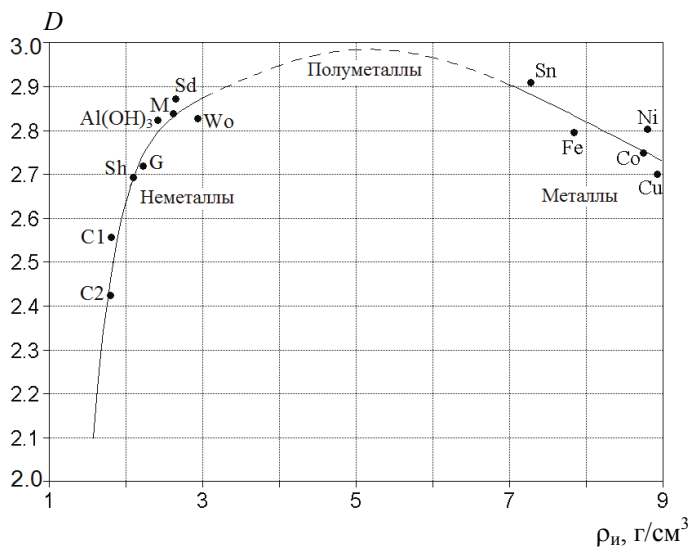


Рис. 1. Влияние истинной плотности материала частиц дисперсной фазы на фрактальную размерность

Характеристики связи гомо- и гетероядерных соединений

Компоненты связи, %	Материал						
	Sn	Fe	Co	Ni	Cu	SiO ₂	графит
C _к	42,00	44,00	46,67	46,80	49,33	51,73	62,00
C _м	58,00	56,00	53,33	53,20	50,67	22,34	38,00
C _и	0	0	0	0	0	25,93	0

С увеличением степени ковалентности повышается энергия связи атомных остовов, что на макроуровне вызывает увеличение плотности вещества. Вместе с тем повышение степени ковалентности химической связи вызывает повышение энергии связи атомных остовов, увеличение размеров кристаллической решетки (например, отношение параметров элементарной ячейки кристаллической решетки c/a для олова – 0,546, кобальта – 1,632, графита – 2,730) и, как следствие, уменьшение числа ядер в структуре и уменьшение плотности упаковки кристаллической решетки, что, учитывая самоподобие фрактальных кластеров на различных масштабных уровнях, в конечном итоге обуславливает уменьшение степени заполнения пространства на макроуровне и уменьшение фрактальной размерности кластеров металлических порошков. Анализ данных табл. 2 подтверждает вышесказанное.

Плотность неметаллических соединений определяется энергией кристаллической решетки, которая, в свою очередь, связана со степенью ионности химической связи. Наибольшую энергию кристаллической решетки имеют ионные кристаллы, с ростом степени ковалентности химической связи энергия уменьшается. Таким образом, уменьшение степени ковалентности и одновременное увеличение степени ионности химических связей неметаллов на макроуровне приводит к росту фрактальной размерности и увеличению их плотности. Например, согласно табл. 2, химическая связь в решетке SiO₂ характеризуется степенью ковалентности 51,73 %, ионности – 25,93 %, что обуславливает большую плотность и фрактальную размерность диоксида кремния (песка) по сравнению с графитом (степень ковалентности 62,00 %, ионная составляющая отсутствует).

Таким образом, в результате проведенных исследований доказана масштабная инвариантность структуры дисперсных систем от микро- до макроуровня. Дано объяснение зависимости фрактальной размерности от истинной плотности частиц сыпучих материалов. Полученные закономерности могут быть использованы при разработке композиционных порошковых материалов с заранее заданными свойствами, выборе оптимального количества вводимых модифицирующих добавок и наполнителей, кроме того, они могут быть положены в основу создания новых экспресс-методов [19, 20] контроля физико-механических свойств и структурных характеристик пористых материалов.

Список литературы

1. Шмидт, Ф. К. Фрактальный анализ в физико-химии гетерогенных систем и полимеров / Ф. К. Шмидт. – Иркутск : Изд-во Иркут. ун-та, 2001. – 180 с.
2. Федер, Е. Фракталы / Е. Федер. – М. : Мир, 1991. – 260 с.
3. Хлюпин, А. Н. Фрактальный анализ трехмерной микроструктуры пористых материалов / А. Н. Хлюпин, О. Ю. Динариев // Журн. техн. физики. – 2015. – Т. 85, № 6. – С. 17 – 22.

4. Поляков, В. В. Фрактальный анализ структуры пористых материалов / В. В. Поляков, С. В. Кучерявский // Письма в журн. техн. физики. – 2001. – Т. 27, № 14. – С. 42 – 45.
5. Bunde, A. Fractals and Disordered Systems / A. Bunde, S. Havlin. – Berlin: Springer, 1996. – 409 p.
6. Фрактальная размерность границ кластеров в пористых поликристаллических ВТСП-материалах / А. А. Быков [и др.] // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54, № 10. – С. 1825 – 1828.
7. Кульков, С. Н. Фрактальная размерность поверхностей пористых керамических материалов / С. Н. Кульков, Я. Томаш, С. П. Буякова // Письма в журн. техн. физики. – 2006. – Т. 32, № 2. – С. 51 – 55.
8. Синергетика и фракталы в материаловедении / В. С. Иванова [и др.] – М. : Наука, 1994. – 383 с.
9. Химия привитых поверхностных соединений : учеб. пособие для вузов / Г. В. Лисичкин [и др.]. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 590 с.
10. Божокин, С. В. Фракталы и мультифракталы : учеб. пособие / С. В. Божокин, Д. А. Паршин. – Ижевск : Регулярная и хаотическая динамика, 2001. – 128 с.
11. Кулак, М. И. Фрактальная механика материалов / М. И. Кулак. – Мн. : Выш. шк., 2002. – 304 с.
12. Шмалько, В. М. Фрактальные свойства углеродных отложений из коксовой камеры / В. М. Шмалько, О. И. Зеленский, А. М. Брагинский // Химия, физика и технология поверхности. – 2014. – Т. 5, № 2. – С. 152 – 157.
13. Мордасов, Д. М. Определение фрактальной размерности порошковых материалов / Д. М. Мордасов, А. В. Медведева // Материалы VIII Междунар. науч.-инновацион. молодеж. конф. : «Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент», 27–28 окт. 2016 г. – Тамбов, 2016. – С. 371 – 374.
14. Мордасов, М. Д. Влияние физико-механических свойств и структурных характеристик сыпучих материалов на их фрактальную размерность / М. Д. Мордасов, И. Г. Проценко, Д. М. Мордасов // Материалы II Всерос. науч.-практ. молодеж. конф. с междунар. участием : «Современные технологии композиционных материалов», 18 – 21 окт. 2016 г. – Уфа, 2016 – С. 98 – 102.
15. Мордасов, Д. М. Исследование структурных характеристик и физико-механических свойств реальных фрактальных кластеров / Д. М. Мордасов, А. В. Медведева, М. Д. Мордасов // Материалы Всерос. совещ. (с междунар. участием) зав. кафедрами материаловедения и технологий конструкц. материалов: «Инновационное направление учебно-методической и научной деятельности кафедр материаловедения и технологий конструкционных материалов», 26 – 29 окт. 2016 г. – Саранск, 2016. – С. 80 – 83.
16. Сироткин, О. С. Основы современного материаловедения : учеб. для студентов вузов, обучающихся в обл. техники и технологии / О. С. Сироткин. – М. : ИНФРА-М, 2015. – 363 с.
17. Паулинг, Л. Природа химической связи / пер. с англ. М. Е. Дяткиной ; под ред. Я. К. Сыркина. – М. ; Л. : Госхимиздат, 1947. – 440 с.
18. Сироткин, О. С. Единая парадигма химического и физического межмолекулярного взаимодействий / О. С. Сироткин, Р. О. Сироткин, П. Б. Шибяев // Вестн. Казан. технолог. университета. – 2011. – № 1. – С. 22 – 32.
19. Медведева, А. В. Аэродинамическое измерение пористости веществ / А. В. Медведева, Д. М. Мордасов // Вопр. соврем. науки и практики. Университет им. В. И. Вернадского. – 2012. – № 4(42). – С. 329 – 334.
20. Медведева, А. В., Классификация методов контроля пористости материалов / А. В. Медведева, Д. М. Мордасов, М. М. Мордасов // Вестн. Тамб. гос. техн. ун-та. – 2012. – Т. 18, № 3. – С. 749 – 754.

Effect of the True Particle Density of Powder Systems on Their Fractal Dimension

M. D. Mordasov, A. V. Firsova, D. M. Mordasov

*Department of Materials and Technology, TSTU, Tambov, Russia;
e-mail: mit@mail.nnn.tstu.ru*

Keywords: chemical bond; cluster; degree of covalence; degree of ionicity; fractal dimension; powder system; self-similarity; true density.

Abstract: On the basis of fractal analysis of powder systems, the dependence of the fractal dimension on the true density of material of their particles was obtained. From the standpoint of modern concepts of chemical bonds, the nature of change of fractal dimension of metallic and nonmetallic disperse systems is substantiated as a function of the density of particles of a solid phase. It is shown that an increase in the degree of covalence of a chemical bond leads to decrease in the fractal dimension of the powders of homonuclear compounds, and the fractal dimension of disperse systems from heteronuclear nonmetallic compounds increases with the degree of ionicity of their chemical bond. The obtained regularities can be used in the development of composite powder materials with predetermined properties, and also during creation of new methods for monitoring the physico-mechanical properties and structural characteristics of porous materials.

References

1. Shmidt F.K. *Fraktal'nyi analiz v fiziko-khimii geterogennykh sistem i polimerov* [Fractal analysis in the physico-chemistry of heterogeneous systems and polymers], Irkutsk: Irkutskii universitet, 2001, 180 p. (In Russ.)
2. Feder E. *Fraktaly* [Fractals], Moscow: Mir, 1991, 260 p. (In Russ.)
3. Khlyupin A.N., Dinariev O.Yu. Fractal analysis of the 3D microstructure of porous materials, *Technical Physics. The Russian Journal of Applied Physics*, 2015, vol. 60, no. 6, pp. 805-810.
4. Polyakov V.V., Kucheryavskii S.V. The fractal analysis of a porous material structure, *Technical Physics Letters*, 2001, vol. 27, no. 7, pp. 592-593.
5. Bunde A., Havlin S. *Fractals and disordered systems*, Berlin: Springer, 1996, 409 p.
6. Bykov A.A., Terent'ev K.Yu., Gokhfel'd D.M., Petrov M.I. Fractal dimension of cluster boundaries in porous polycrystalline HTSC materials, *Physics of the Solid State*, 2012, vol. 54, no. 10, pp. 1947-1950.
7. Kul'kov S.N., Tomash Ya., Buyakova S.P. [Fractal dimensionality of surfaces of porous ceramic materials], *Pis'ma v zhurnal tekhnicheskoi fiziki* [Technical Physics Letters], 2006, vol. 32, no. 2, pp. 51-55. (In Russ.)
8. Ivanova V.S., Balankin A.S., Bunin I.Zh., Oksogoev A.A. *Sinergetika i fraktaly v materialovedenii* [Synergetics and fractals in materials science], Moscow: Nauka, 1994, 383 p. (In Russ.)
9. Lisichkin G.V., Fadeev A.Yu., Serdan A.A. Nesterenko P. N. *Khimiya privitykh poverkhnostnykh soedinenii : uchebnoe posobie dlya vuzov* [Chemistry of grafted surface compounds: a textbook for high schools], Moscow: FIZMATLIT, 2003, 590 p. (In Russ.)
10. Bozhokin S.V., Parshin D.A. *Fraktaly i mul'tifraktaly: ucheb. posobie* [Fractals and multifractals: a tutorial], Izhevsk: Regul'yarnaya i khaoticheskaya dinamika, 2001, 128 p. (In Russ.)

11. Kulak M.I. *Fraktal'naya mekhanika materialov* [Fractal Mechanics of Materials], Minsk: Vysh. shk., 2002, 304 p. (In Russ.)
12. Shmal'ko V.M., Zelenskii O.I., Braginskii A.M. [Fractal properties of carbon deposits from the coke chamber], *Khimiya, fizika i tekhnologiya poverkhnosti* [Chemistry, Physics and Technology of Surface], 2014, vol. 5, no. 2, pp. 152-157. (In Russ.)
13. Mordasov D.M., Medvedeva A.V. *Materialy VIII Mezhdunarod-noi nauchno-innovatsionnoi molodezhnoi konferentsii : "Sovremennye tverdo-faznye tekhnologii: teoriya, praktika i innovatsionnyi menedzhment"* [Materials of the VIII International Scientific and Innovative Youth Conference: "Modern solid-phase technologies: theory, practice and innovative management"], 27–28 October 2016, Tambov, 2016, pp. 371-374. (In Russ.)
14. Mordasov M.D., Protsenko I.G., Mordasov D.M. *Materialy II Vserossiiskoi nauchno-prakticheskoi molodezhnoi konferentsii s mezhdunarodnym uchastiem : "Sovremennye tekhnologii kompozitsionnykh materialov"* [Materials of the II All-Russian scientific-practical youth conference with international participation: "Modern technologies of composite materials"], 18–21 October 2016, Ufa, 2016, pp. 98-102. (In Russ.)
15. Mordasov D.M., Medvedeva A.V., Mordasov M.D. *Materialy Vseros. soveshch. (s mezhdunar. ucha-stiem) zav. kafedrami materialovedeniya i tekhnologii konstruks. materialov : "Innovatsionnoe napravlenie uchebno-metodicheskoi i nauchnoi deyatel'nosti kafedr materialovedeniya i tekhnologii konstruksionnykh materialov"* [Materials of the All-Russian meeting (with international participation) of the heads of the departments of materials science and design technologies. materials: "Innovative direction of educational-methodical and scientific activity of the departments of materials science and technologies of construction materials"], 26–29 October 2016, Saransk, 2016, pp. 80-83. (In Russ.)
16. Sirotkin O.S. *Osnovy sovremennogo materialovedeniya : ucheb. dlya studentov vuzov, obuchayushchikhsya v oblasti tekhniki i tekhnologii* [Fundamentals of Modern Materials Science: Textbook. For university students studying in the field of technology and technology], Moscow: Infra-M, 2015, 363 p. (In Russ.)
17. Pauling L., Dyatkina M.E., Syrkin Ya.K. *Priroda khimicheskoi svyazi* [Nature of chemical bonding], Moscow; Leningrad: Goskhimizdat, 1947, 440 p. (In Russ.)
18. Sirotkin O.S., Sirotkin R.O., Shibaev P.B. [Unified paradigm of chemical and physical intermolecular interactions], *Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta* [Bulletin of Kazan Technological University], 2011, no. 1, pp. 22-32. (In Russ.)
19. Medvedeva A.V., Mordasov D.M. [Aerodynamic Measurement of Porosity Materials], *Voprosy sovremennoi nauki i praktiki. Uni-versitet im. V. I. Vernadskogo* [Problems of Contemporary Science and Practice. Vernadsky University], 2012, no. 4(42), pp. 329-334. (In Russ., abstract in Eng.)
20. Medvedeva A.V., Mordasov D.M., Mordasov M.M. [Classification of Methods of Control of Porous Materials], *Transactions of the Tambov State Technical University*, 2012, vol. 18, no. 3, pp. 749-754. (In Russ., abstract in Eng.)

Einfluss der wahrhaften Dichte der Teilchen der Pulversysteme auf ihre Fraktaldimension

Zusammenfassung: Aufgrund der Fraktalanalyse der Pulversysteme ist die Abhängigkeit der Fraktaldimension von der wahrhaften Dichte des Materials ihrer Teilchen erhalten. Von den Positionen der modernen Meinungen über die chemischen

Beziehungen ist der Charakter der Veränderung der Fraktaldimension der metallischen und nichtmetallischen dispersen Systeme je nach der Dichte der Teilchen der festen Phase rechtfertigt. Es ist gezeigt, dass die Erhöhung der Stufe der Kovalenz der chemischen Verbindung zur Verkleinerung der Fraktaldimension der Pulver der Homonuklearverbindungen bringt, und die Fraktaldimension der dispersen Systeme aus den heteronuklearen nichtmetallischen Verbindungen wächst mit der Erhöhung der Stufe des Ionengehaltes ihrer chemischen Verbindung.

Influence de la densité vraie des particules de systèmes en poudre sur leur dimension fractale

Résumé: A la base de l'analyse fractale des systèmes en poudre est obtenue la dépendance de la dimension fractale de la densité vraie de la matière de leurs particules. Dès positions des concepts modernes sur les liaisons chimiques est justifié la nature du changement de la dimension fractale des systèmes dispersés métalliques et non métalliques en fonction de la densité des particules de la phase solide. Est montré que l'augmentation du degré de la covalence de la liaison chimique conduit à une diminution fractale des poudres dans les composés homoatomiques et la dimension fractale des systèmes de dispersion à partir des composés hétéroatomiques non métalliques augmente avec le degré des ions de leur liaison chimique.

Авторы: *Мордасов Михаил Денисович* – студент; *Фирсова Александра Владимировна* – магистрант; *Мордасов Денис Михайлович* – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Материалы и технология», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия.

Рецензент: *Дмитриев Олег Сергеевич* – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Физика», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия.
