

УДК 621.762:539.2

А.М. Ніколенко, В.М. Кіндрачук<sup>1</sup>  
**Мезоскопічні аспекти проблематики структурної  
інженерії матеріалів**

*Українська інженерно-педагогічна академія,  
вул. Університетська, 16, Харків, 61003, Україна  
<sup>1</sup>Національний технічний університет України "КПІ",  
проспект Перемоги, 37, Київ, 04056, Україна, E-mail: [vitaly\\_k@i.com.ua](mailto:vitaly_k@i.com.ua)*

В роботі представлені основні підходи до вивчення мезоскопічної неупорядкованості як основи реалізації структурної інженерії матеріалів.

**Ключові слова:** мезоскопічно неупорядковані середовища, мезоскопічні ієрархічні платформи, субмезоструктура, мезоструктура, мезоелемент, субмезо- та макропараметри системи, мезодефект.

*Стаття постуила до редакції 15.01.2002; прийнята до друку 5.03.2002.*

1. Основу розв'язання проблеми створення перспективних матеріалів з бажаними фізико-механічними властивостями та експлуатаційними характеристиками складають результати досліджень з розробки принципово нових та трансформації відповідних традиційних технологій. Проте взаємозв'язок між технологією та властивостями не є безпосереднім, а розкривається виключно через структуру самих матеріалів, що відповідає центральній ланці ланцюга "технологія-структура-властивості". Останнє означає, що структура матеріалів та їх властивості є функціонально залежними від особливостей їх технології обробки, яку в даному контексті слід розглядати як регулювання та модифікацію внутрішньої структури з метою досягнення бажаних властивостей і експлуатаційних характеристик. Саме такий погляд на проблему розробки нових матеріалів обстоює концептуальна програма структурної інженерії матеріалів академіка НАН України В.В. Скорохода [1], в термінах якої матеріали розглядаються як складні і нерівноважні в процесах технологічної обробки сис-

теми, властивості яких можуть бути запропоновані шляхом керування процесами структуроутворення з погляду відповідних ієрархічних платформ їх внутрішньої архітектури.

На сьогодні наукова література має сотні публікацій з проблеми структурної інженерії матеріалів, однак вони стосуються, як правило, матеріалів мікроскопічно неупорядкованих (з погляду фізики твердого тіла – конденсованих систем). Переважна ж більшість сучасних матеріалів є консолідованими системами (кераміки; будівельні матеріали; вироби порошкової металургії та інші) та композити, що класифікуються як мезоскопічно неупорядковані середовища. Принципова особливість мезонепорядкованих середовищ полягає в тому, що їх внутрішній архітектурі притаманні мезоскопічні ієрархічні платформи, проміжні між мікро- та макроскопічними [2]. Сусідство мезоскопічних ієрархічних платформ з макроструктурою зумовлює домінуючий вплив їх на особливості поведінки відповідних систем в умовах технологічної обробки та експлуатації [3]. Останнє свідчить

на користь висновку про те, що вивчення мезоскопічної неупорядкованості складає важливий напрям в реалізації концептуальної програми В.В. Скорохода. Дана праця конкретизує основні аспекти цього напрямку досліджень.

2. Типовим прикладом мезонепорядкованого середовища є кераміка – матеріал, одержуваний з вихідної порошкової суміші шляхом технологічної обробки її у певній послідовності процесів (утрушування, пресування, спікання та ін.). Проаналізуємо якісно особливості еволюції структури порошкової суміші у процесах її ущільнення на моделі середовища хаотично пакованих тотожних сферичних частинок.

На початку ущільнення системи утрушуванням в ній будуть спостерігатися частинки, що характеризуються значеннями координативних чисел від 1 до 12. Це дозволяє ввести до розгляду окрему мезоскопічну платформу ієрархічної структури системи – субмезоструктуру, з погляду якої дана система є середовищем частинок, що розрізняються за координатією. З іншого боку, такий погляд на систему дозволяє розглядати її як множину частинок, що є об'єднанням окремих підмножин, які не перетинаються і кожна окрема з них містить частинки з цілком конкретним значенням координативного числа. Особливість частинок з високою координатією полягає у тім, що для того, щоб бути такими, вони повинні групуватися в кластери – області підвищеної відносної щільності. На початку процесу ущільнення ці області слід розглядати як флуктуації щільності, оскільки вони можуть з'являтися і розсмоктуватися (в результаті переходів частинок між зазначеними підмножинами). Проте з ущільненням системи флуктуації щільності у ній стабілізуються (параметри їх за значеннями зрівнюються з макроскопічними) і згодом починають домінувати в системі, являючись зародками репрезентативних елементів ієрархічної платформи, що виникла і розвивається – мезоструктури.

З погляду мезоструктури середовище можна репрезентувати множиною, що складається з двох підмножин – ущільне-

ної та розпушеної компонент системи відповідно; при цьому ущільнена компонента є статистичним ансамблем ущільнених кластерів, хаотично розподілених на тлі розпушеної компоненти. Ця репрезентація з необхідністю орієнтує на опис системи в термінах статистичного ансамблю мезоелементів – кластерів, кожен з яких складають ядро та оболонка (до складу ядра входить ущільнена компонента; ядро ж оточене оболонкою, що складається з розпушеної компоненти). Статистичний ансамбль мезоелементів розподіляє простір, зайнятий середовищем частинок, на поліедри Вороного, що розрізняються за геометричними характеристиками; в середньому ж мезоструктура може бути репрезентована так званим еталонним мезоелементом, фізичні та геометричні характеристики якого відображають середні значення відповідних характеристик ансамблю.

Отже, мезоструктура в системі хаотично пакованих частинок є продуктом самоорганізації в ній на субмезоструктурному рівні ієрархії в результаті формування відгуків на зовнішні впливи. Останнє свідчить про принципову різницю між зазначеними мезоскопічними платформами у реальній системі: субмезоструктура є ієрархічною платформою технологічного походження, а мезоструктура є когнітивною ієрархічною платформою [2], що є суттєвим в розробці методів керування процесами структуроутворення.

3. Розглянутий вище сценарій процесу ущільнення середовища хаотично пакованих частинок орієнтує на теоретичний опис структури системи в термінах так званої базової теоретико-множинної моделі [4]. Розглянемо зміст цієї моделі та суттєві аспекти її застосування.

Нехай об'єм системи хаотично пакованих  $N$  тотожних сфер, кожна з яких має об'єм  $W$ , становить  $V$ . З макроскопічної точки зору основними макропараметрами системи є середня відносна щільність  $\langle \rho \rangle$

$$\rho = \frac{NW}{V} \quad (1)$$

та середнє значення координативного числа  $\langle \lambda \rangle$ . За умови, що система є закритою ( $\delta N = 0$ ) і об'єм окремої частинки залиша-

ється незмінним ( $\delta W = 0$ ), еволюцію системи можна описати в термінах зміни макропараметра  $\langle \rho \rangle$ :

$$\delta \langle \rho \rangle = \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial V} \delta V, \quad (2)$$

або з урахуванням (1):

$$\delta \langle \rho \rangle = -\frac{\varepsilon(V)N}{V} \delta V, \quad (3)$$

де  $\varepsilon(V)$  – розмірний фактор системи:

$$\varepsilon \equiv \frac{W}{V}. \quad (4)$$

З мезоскопічної точки зору (підкреслюємо: з погляду субмезоструктурної ієрархічної платформи) кожна окрема частинка характеризується цілочисловим значенням координативного числа  $\lambda_i$  з деякої множини можливих значень від  $\lambda_{\min}$  до  $\lambda_{\max}$ . Це дозволяє ввести до розгляду поняття топологічної фази системи. Під  $i$ -ою топологічною фазою будемо розуміти нелокалізовану частку об'єму системи  $V_i \subset V$ , яка містить  $n_i \in N$  частинок, що характеризується конкретним значенням координативного числа  $\lambda_i$ . Далі, оскільки кожна окрема частинка системи повинна належати до однієї з топологічних фаз, є сенс переформулювати модель хаотично пакованих частинок у термінах об'єднання можливих топологічних фаз:

$$\bigcup_i V_i = V; \quad \bigcap_i V_i = \emptyset, \quad (5)$$

ці співвідношення відображають базову теоретико-множинну модель системи.

Структурними параметрами окремої  $i$ -ї топологічної фази є значення координативного числа  $\lambda_i$   $n_i$  частинок, що входять до її складу, та відносна щільність  $\rho_i$ :

$$\rho_i = \frac{n_i W}{V}. \quad (6)$$

Відповідними мезоскопічними параметрами (підкреслюємо: параметрами субмезоструктури) структури системи будуть, по-перше, множина ймовірностей реалізації окремих топологічних фаз  $\{p_i\}$ , де

$$p_i = \frac{V_i}{V}, \quad (7)$$

а, по-друге, слід ввести множину ймовірностей належності окремої частинки до  $i$ -ї топологічної фази  $\{p_i'\}$ :

$$p_i' = \frac{n_i}{N}; \quad (8)$$

при цьому параметри  $\lambda_i$  та  $\rho_i$  слід розглядати як структурні фазові параметри, що визначають особливості структури множини топологічних фаз системи.

Таким чином, проблема субмезоструктурного аналізу системи зводиться до пошуку функціональних залежностей між макропараметрами  $\langle \rho \rangle$  і  $\langle \lambda \rangle$  та субмезопараметрами  $\{p_i\}$  і  $\{p_i'\}$  системи при заданих значеннях структурних фазових параметрів  $\{\lambda_i\}$ ,  $\{\rho_i\}$  та зовнішніх факторів  $V$ ,  $N$ ,  $W$ . Розв'язання цієї задачі на основі застосування методу максимальної ентропії [4] дозволяє одержати аналітичні вирази для ймовірностей (7) та (8):

$$p_i = \frac{\exp(-\beta \rho_i)}{\sum_i \exp(-\beta \rho_i)}; \quad p_i' = \frac{\rho_i}{\langle \rho \rangle} p_i, \quad (9)$$

та співвідношення, що пов'язують між собою субмезо- та макропараметри:

$$\langle \rho \rangle = \sum_i \rho_i p_i; \quad \langle \lambda \rangle = \sum_i \lambda_i p_i', \quad (10)$$

де  $\beta$  – невизначений множник Лагранжа.

Звернемося тепер до іншого типу мезоскопічної репрезентації середовища хаотично пакованих частинок – опису з погляду мезоструктурної ієрархічної платформи. В цьому випадкові систему репрезентує статистичний ансамбль мезоеlementів, кожен з яких складають ущільнена (ядро) та розпушена (оболонка) компоненти. Це означає необхідність трансформації базової теоретико-множинної моделі (5) з метою опису мезоструктури, в результаті чого вона набуває вигляду:

$$V_c \cup V_s = V; \quad V_c \cap V_s = \emptyset, \quad (11)$$

де  $V_c$  та  $V_s$  – об'єми ущільненої та розпушеної компонент системи відповідно. Ці об'єми є об'єднаннями відповідних топологічних фаз

$$V_c = \bigcup_i V_i; \quad V_s = \bigcup_{i'} V_{i'}, \quad (12)$$

де  $i$  та  $i'$  – індекси топологічних фаз, що характеризуються підвищеними та пониженими значеннями координативного числа, які входять до їх складу відповідно.

Роль репрезентативного елемента мезоструктури відіграє так званий еталонний

мезоелемент, що представляє статистичний ансамбль мезоелементів системи в середньому. Отже, еталонний мезоелемент характеризується середньою відносною щільністю, що дорівнює середній відносній щільності системи  $\langle \rho \rangle$ , а середні відносні щільності його ядра  $\rho_c$  та оболонки  $\rho_s$  дорівнюють відповідно значенням, що характеризують ущільнену та розпушену компоненти системи:

$$\rho_c = \frac{N_c W}{V_c}; \quad \rho_s = \frac{N_s W}{V_s}, \quad (13)$$

де  $N_c$  та  $N_s$  – число частинок, що входять до складу ущільненої та розпушеної компонент відповідно ( $N_c + N_s = N$ ). Окрім того, ядро та оболонка еталонного мезоелемента характеризуються середніми значеннями координаційних чисел частинок ( $\lambda_c$  та  $\lambda_s$  відповідно), що входять до їх складу. В довільний момент еволюції структури системи в процесі її ущільнення мезоскопічні параметри  $\rho_c$  і  $\rho_s$  та  $\lambda_c$  і  $\lambda_s$  є функціями середньої відносної щільності  $\langle \rho \rangle$  і можуть бути розраховані на основі попереднього розрахунку субмезопараметрів (9).

4. Зауважимо тепер, що наявність у внутрішній архітектурі дисперсних систем мезоскопічних ієрархічних платформ свідчить також і про наявність у відповідних матеріалах специфічних мезоскопічних дефектів структури. З іншого боку, без перебільшення можна сказати, що саме вивчення процесів дефектоутворення в матеріалах з метою керування ними і є ключем до розв'язання багатьох проблем, що стосуються структурної інженерії матеріалів. Розглянемо особливості генезу та еволюції мезоскопічних дефектів дисперсних систем в процесах їх технологічної обробки.

На початку ущільнення порошкового середовища в ньому присутньою є лише субмезоструктура; в цьому випадкові мезоскопічними дефектами середовища є лише міжчастинкові пори. З першого погляду, зазначена множина дефектів є однорідною сумішшю пор, що розрізняються розмірами та можуть бути описані в термінах деякого статистичного ансамблю. Але така апроксимація буде адекватною лише за умови, що ущільнена компонента є при-

сутньою в системі у вигляді флуктуацій щільності. У випадкові ж зародження та еволюції мезоструктури, є сенс розрізнявати пори, що належать ущільненій та розпушеній компонентам; тобто в цьому випадку мезоскопічна структура системи характеризується дефектами двох типів. За умови ущільнення системи утрушуванням різниця між мезодефектами різних типів полягає лише в розмірах та в темпі їх еволюції і, отже, є майже несуттєвою. Проте ситуація принципово змінюється, коли ущільнення системи обумовлюється деформацією частинок (розмова ведеться про пересування вихідної утрушеної порошкової суміші в процесі її технологічної обробки). При достатньому ущільненні пори першого типу взагалі можуть зникнути, трансформувались у поверхні розділу між частинками (що набувають поліедричної форми), але ансамбль пор другого типу стає джерелом спектру якісно нових дефектів: тривимірних (відокремлені пори; скупчення пор в кутах мезоелементів; ланцюгові пори); двовимірних (результат трансформації граней мезоелементів); лінійних (результат трансформації ребер мезоелементів). Такі дефекти слід класифікувати як мезоструктурні дефекти на відміну від дефектів субмезоструктурних. Субмезоструктурні та мезоструктурні дефекти репрезентують собою мезоскопічні дефекти структури матеріалів, а відповідні матеріали визначаються як мезоскопічно невпорядковані.

5. Як уже зазначалося, сусідство мезоскопічних ієрархічних платформ з макроструктурою мезоневпорядкованих середовищ зумовлює домінуючий вплив цих платформ на макроскопічні властивості відповідних матеріалів. Яскравий приклад такого впливу демонструє явище зонального відокремлення [5]. Показовим є те, що навіть у високодисперсних системах інтенсифікація процесів зонального відокремлення породжує ранню рекристалізацію [6], що теж легко пояснити в термінах аналізу поведінки наноматеріалів з погляду мезоструктури [7]. Наведемо ще один приклад: в процесах прокатки грубодисперсних порошків в них спостерігають заро-

дження та розвиток поверхонь ковзання і виникнення блочної структури, яка суттєво впливає на подальший хід процесу [8]. Наведені та подібні їм приклади свідчать про одне: одним з важливих напрямків розв'язання проблеми створення перспективних матеріалів є пошук шляхів керування їх мезоструктурою.

Підкреслимо наостанок, що реалізація програми структурної інженерії матеріалів В.В. Скорохода передбачає комплексні дослідження особливостей еволюції структури матеріалів і в умовах технологічної обробки їх і в умовах експлуатації. Тому слід

звернути увагу на наступну обставину: поведінка мезоневпорядкованих систем в умовах зовнішніх впливів суттєво відрізняється від поведінки так званих компактних матеріалів [3,9]. І ця обставина аргументує ще один важливий напрямок в дослідженнях структури та властивостей мезоневпорядкованих середовищ.

*А.М. Ніколенко – д.ф.-м.н., професор кафедри загальної та експериментальної фізики.  
В.М. Кіндрачук – магістрант фізико-технічного факультету;*

- [1] В.В. Скороход. Принципы микроструктурной инженерии в порошковой металлургии // *Программа XVII Всесоюз. конф. по порошковой металлургии (Киев, 21-25 окт. 1991 г.)*. – Киев: Институт проблем материаловедения АН УССР, с. 1 (1991).
- [2] А. Ніколенко. Ієрархічна структура матеріалів // *Вісник НАН України*, **9**(10), сс. 21- 28 (1996).
- [3] М.С. Ковальченко, А.Н. Ніколенко. Мезоструктурные дефекты и механические свойства спеченных карбидных материалов // *Карбиды и материалы на их основе*, ИПМ НАН Украины, Киев, сс. 21-28 (1995).
- [4] А.М. Ніколенко. Статистичний аналіз середовищ хаотично пакованих частинок. Теорія. // *Український фізичний журнал*, **2**, сс. 243-246 (1996).
- [5] М.Ю. Бальшин. *Порошковое металлостроение*. Металлургиздат, М. 332 с (1948).
- [6] В.В. Паничкина. Возможности использования дисперсных порошков для получения спеченных высокоплотных материалов. // *Журн. Всесоюз. Хим. О-ва им. Д.И. Менделеева*, **36**, сс. 170-173 (1991).
- [7] В.В. Скороход, І.В. Уварова, А.В. Рагуля. *Фізико-хімічна кінетика в наноструктурних системах*. Академперіодика, Київ. 180 с. (2001).
- [8] В.П. Каташинский. Закономерности формирования зон сдвига и уплотнения при прокатке металлических порошков // *Порошковая металлургия*, **1**, сс. 10-15 (1981).
- [9] М.С. Ковальченко. *Динамика механических воздействий на материальные тела*. Киев (2000). (Препр. НАН Украины. Ин-т пробл. материаловедения им. И.Н. Францевича, **1**, (2000)).

А.М. Nikolenko, V.M. Kindrachuk<sup>1</sup>  
**Mesoscopical aspects of problems for the  
structural material engineering**

*Ukrainian Engineering-Pedagogical Academy,  
University, Str.16, Kharkiv, 61003, Ukraine  
<sup>1</sup>National Technical University of Ukraine "KPI",  
Peremogy pr., 37, Kyiv, 04056, Ukraine, E-mail: [vitaly\\_k@i.com.ua](mailto:vitaly_k@i.com.ua)*

This article is devoted to fundamental approach in studying mesoscopic disordered media as the basis to complete structural material engineering.