

УДК 691: 6620.1

## **Методология «структурного подхода» в строительном материаловедении**

**В.С.Грызлов**

Череповецкий государственный университет, Череповец, Россия

Статья посвящена разработке методологических основ материаловедческой теории. Приводятся: структурная схема построения модели «структура – свойство», формулировка общей задачи оценки свойств материалов, математическая интерпретация общей задачи.

Формирование научного строительного материаловедения непосредственно связано с созданием единой теории структурообразования и свойств материалов, обеспечивающей количественную связь в классической цепочке «состав - структура - свойство». Условия для этого появляются на этапе «научного владения производством», когда знания о технологии на основе все более широкого привлечения фундаментальных наук получают дальнейшее развитие и обобщение в направлении формирования совокупности законов, количественно отражающих определяющие процессы превращения исходного сырья в конечный продукт. Практическая реализация данной концепции требует формирования представлений о структуре материалов и привлечения развивающихся в физико-химии инструментальных методов наблюдения и измерения ее параметров. С появлением этой концепции постепенно складывается так называемый «структурный подход» в материаловедении.

Дальнейшее развитие методологии «структурного подхода» предопределяется требованиями количественного описания процессов структурообразования как необходимого условия решения задач управления и оптимизации производства. Становится очевидно, что свойства материала определяются структурой, то есть видом, взаиморасположением и взаимосвязью составных частей этого материала.

Одним из основных способов создания материалов остается комбинирование различных компонентов. Во многих случаях это двух-, трехкомпонентные системы разных материалов, каждый из которых имеет свое конкретное назначение, но при их объединении на интеграционном уровне взаимодействия образуют искусственные композиты с требуемыми физическими свойствами. Современные информационные технологии открывают новые возможности создания эффективных строительных материалов, позволяют виртуально отображать сложные процессы, моделировать структуру материалов, изучать общие принципы ее формирования. Информационный аспект

решения материаловедческой задачи предполагает создание и развитие предметной области путем чередования познавательного - прагматических моделей с переходом от общего - универсального уровня представления информации к конкретному. Конечной целью такого перехода является наиболее полное представление о материале и процессе его получения. Роль объекта моделирования для управления свойствами композиционных материалов отводится структуре. Непрерывный анализ состояния компонентов структуры позволяет корректировать свойства материала от начала проектирования состава до конца процесса получения материала с заданными свойствами.

Методологической основой современных материаловедческих теорий является системный анализ - совокупность методов и средств, используемых при исследовании и конструировании сложных объектов. К числу важнейших задач системного анализа относятся: постановка общей задачи и разработка средств представления исследуемого объекта как системы; построение обобщенной модели системы; исследование структуры системы.

Большинство свойств строительных материалов относится к категории структурно-чувствительных, поэтому их формирование не заканчивается на стадии интенсивного структурообразования, а в той или иной степени продолжается в процессе эксплуатации, вследствие чего они нелинейно и интегрально зависят от множества взаимообуславливающих и дополняющих факторов. В общем виде свойства материала в условиях эксплуатации можно выразить:

$$P(t) = P_0 - \Delta P(t) \quad (1)$$

где  $P(t)$  - свойства в фиксированный момент времени  $t$ ;  $P_0$  - свойство при завершении в основном процесса структурообразования (например, для бетона 28 суток твердения;  $\Delta P(t)$  - приращение, которое возникает в результате эксплуатационных действий за время  $t$ .

Знак (-) перед  $\Delta P(t)$  указывает, что релаксация свойств связана с уравниванием конструктивных и деструктивных процессов, происходящих в материале, которые в целом приводят к уменьшению внутреннего напряжения и развитию необратимых деформаций. В термодинамическом аспекте можно предположить, что скорость изменения свойств пропорциональна их отклонению от равновесного значения ( $P$ ), следовательно, получаем:

$$P = P_0 - \Delta P_0 e^{-\frac{(t-t_0)}{\tau}} \quad (2)$$

где  $t_0$  - время интенсивного структурообразования,  $\tau$  - время релаксации.

Зависимость (2) представляет общую задачу свойств в материаловедении. Решение данной задачи сводится к оптимизации  $P_0$  и  $\tau$ .

Как видно из (2)  $P_0$  представляет собой структурно-технологический аспект свойства и решается на стадии выбора и формирования структуры,  $\tau$  — зависит не только от внутренних параметров  $P$ , но и от характера нарушения его равновесного значения. Поэтому  $\tau$  - связанное с деструктивными процессами будет одно, с влажностными - другое, с температурными - третье; в следствии этого второе слагаемое в (2) примет вид:

$$\sum_i^n \Delta P_i e^{-\frac{(t_i-t_0)}{t_i}} \quad (3)$$

Для построения обобщенной модели "структура - свойство" можно использовать структурную схему представленную в таблице.

Таблица.

Свойство (P)	
Структурно-формирующие факторы	Технологические параметры (C <sub>i</sub> )
Структурные элементы	На уровне макроструктуры (K <sub>i</sub> )
Внутриэлементные составляющие	На уровне микроструктуры (k <sub>i</sub> )
Физико-химические и др. процессы	Кристаллизационные, деструктивные, деформативные, сорбционные, фазовые, термические и др.

Это позволяет представить пути формирования свойств материалов в виде функциональных связей трех параметрических составляющих: C<sub>i</sub> - структурно-формирующих факторов, K<sub>i</sub> -структурных элементов, k<sub>i</sub> - внутриэлементных составляющих, через физико-химические и другие процессы, которые происходят в ходе формирования и фиксирования структуры материала на всех уровнях.

Для развертывания схемы системно-структурного анализа существенно знать как будут изменяться k<sub>i</sub> в связи с изменением C<sub>i</sub>. Предполагая, что экспериментально можно определить эти изменения в виде коэффициентов структурной чувствительности как отношение частных производных данных параметров и учитывая, что влияние структурно формирующих факторов обусловлено временем (t) окончательно имеем:

$$\frac{dP_0}{dt} = \sum_i^n \frac{\partial P_0 \partial k_i(c_i)}{\partial k_i \partial C_i} dC_i(t) \quad (4)$$

При исследовании структур материалов часто базируются на их оптимальности, однако при одинаковой технологии изготовления материала и других одинаковых условиях можно получить неограниченное количество неоптимальных структур и, теоретически, одну - две оптимальные. Практически гораздо чаще имеют дело с рациональными структурами, т.е. с такими при которых материал в полной мере соответствует заданным показателям качества в реальных условиях производства. Рациональные структуры как раз подтверждают практическую недостижимость однородного строения материала и равномерного распределения частиц.

В настоящее время неоднородность строения выдвигается как фундаментальная характеристика строительных композитов. Неоднородность строения материалов есть следствие неоднородности пространства как фундаментального закона природы. Неоднородность - динамическая, находящаяся во времени в постоянном изменении, движении характеристика. В этом смысле она соотносится с понятием "неравновесности систем" и взаимосвязана с процессами самоорганизации в этих системах. Непосредственное отношение к неоднородности композита имеет введение понятия "мегаструктура материала". Использование этого масштабного уровня закладывает возможность перехода от структуры материала как таковой к структуре в конструкции и обеспечивает возможность учета и регулирования параметров макро- и микроструктуры непосредственно в работе конструкции из этого материала.

Становится ясно, что в постановке задачи конструирования структуры материала, следует "отталкиваться" от "структуры и функций конструкции", оптимизируя ее по критериям материалоемкости и способности сопротивляться воздействию среды, то есть функционировать в эксплуатационных условиях.

## **The methodology of the structural approach in building materials technology**

**V.S.Gryzlov**

The article is dedicated to mining of the methodological basis science of materials. The skeleton diagram of construction of model "structure-property", formulation of a general problem of an estimation of properties of materials, mathematical interpretation of a general problem are resulted.