

2. Остапенко М.А. Моделирование процессов уплотнения сыпучих и порошковых материалов. В сб.н.тр.ДонГТУ.Серия: Химия и химическая технология. Выпуск 13/ гл.ред. Башков Е.А.:Донецк: ДонГТУ.- с. 174-178.

3. Остапенко М.А., Нестеров А.Н. Универсальный прибор и методика комплексного исследования физико-механических свойств бурого угля // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія "Хімія і хімічна технологія". Випуск 95 – Донецьк: ТОВ фірма "Друк-Інфо", 2005. – С. 157 – 162.

УДК 662.741

КЛАССИФИКАЦИЯ ВИДОВ ВНУТРЕННЕГО И ВНЕШНЕГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМПОНЕНТОВ ВВ

Бован Д.В., Веретельник С.П.

(ДонНТУ, Донецк, Украина)

В последние годы участились случаи чрезвычайных ситуаций, связанные с утилизацией и хранением взрывчатых веществ (ВВ). Это в определенной степени обусловлено недостаточным учетом опасностей в обращении с ВВ в том числе и недостаточной изученностью изменения свойств ВВ в процессах производства, переработки и хранения.

На наш взгляд такое положение требует большего внимания к теоретическим и экспериментальным исследованиям на молекулярном уровне именно в области физико-химических и физико-механических свойств ВВ и предотвращения или, по мере возможностей, снижения опасности нежелательных изменений и проявлений этих свойств в различных технологических процессах связанных с ВВ.

В данной работе предпринята попытка систематизировать представления о характеристиках межатомного и межмолекулярного взаимодействия, что безусловно является основой проявления свойств веществ в общепринятом виде технологических или технических характеристик, применяемых в инженерной практике.

В дисперсных системах, которые являются многие ВВ или их компоненты каждая частица находится под действием системы внешних и внутренних сил и возбуждаемых ими энергетических полей. Внешние поля возникают за счет действия прикладываемой к материалу нагрузки и гравитационных сил. Внутренние поля возбуждаются межатомным и межмолекулярным взаимодействием, источниками которых являются сами структурные элементы материала – отдельные частицы, формирующие массив вещества.

В общем случае могут в той или иной степени проявиться следующие виды физических и химических связей между частицами: силы химической природы, молекулярные силы, ионно–электрические силы, капиллярные, электростатические, магнитные и силы механического сцепления. Проявление указанных сил может вызвать следующие механизмы взаимодействия между частицами дисперсных композиций.

1. Межатомное взаимодействие.
2. Межмолекулярное взаимодействие.
3. Взаимодействие между твердыми частицами.
4. Образование твердых мостиков между частицами.
5. Соединения за счет связующего.
6. Механические связи зацепления между частицами.

Преимущественное проявление того или иного из указанных факторов или механизмов взаимодействия частиц сыпучих материалов зависит от их состава, свойства структуры, а также определяется перестройкой и изменением структуры в процессах истечения из сосудов, движения в транспортных системах и компактирования при воздействии внешнего давления технологических машин и устройств [1].

Межатомное взаимодействие, взаимодействие между атомами, как свободными, так и входящими в состав одной или разных молекул, кристаллов и т. д. межатомное взаимодействие может быть ковалентным, ионным, металлическим, типа водородной связи и Ван-дер-Ваальсовым. Первые три типа межатомных взаимодействия являются причиной

образования химических связей в молекулах, атомных и ионных кристаллах, металлах и сплавах. Водородные связи могут образовываться внутри молекул и между разными молекулами в случае, когда между двумя электроотрицательными атомами располагается электроположительный атом водорода. Ван-дер-Ваальсовы межатомные взаимодействия обуславливают межмолекулярное взаимодействие, а также ответственны за некоторые свойства молекул. Энергия ковалентного, ионного и металлического межатомного взаимодействия ~ 102 кДж/моль, энергия водородной связи $\sim 10\text{—}50$ кДж/моль и энергия Ван-дер-Ваальсова межатомного взаимодействия $\sim 0,1\text{—}1$ кДж/моль.

Ковалентное межатомное взаимодействие возникает в результате обобществления валентных электронов парой соседних атомов. Понижение энергии в этом случае выражается в обменных интегралах, поэтому ковалентное межатомное взаимодействие часто называют обменным. Ковалентное межатомное взаимодействие является причиной существования молекул простых газов (H_2 , Cl_2 и пр.), различных соединений (H_2O , NH_3 и пр.), многочисленных органических молекул (CH_4 , $\text{H}_3\text{C—CH}_3$ и пр.).

Ионное межатомное взаимодействие обусловлено переносом валентных электронов с одного атома на другой и электростатическим взаимодействием образовавшихся в результате этого переноса ионов. Оно характерно для соединений металлов с наиболее типичными металлоидами (например, NaCl , CaCl_2 , Al_2O_3), а также для ионных кристаллов (NaCl , CsCl и пр.).

Металлическое межатомное взаимодействие характерно для чистых металлов и их соединений между собой и связано с наличием электронной проводимости, свободно движущихся в решётке металла. Эти электроны электростатически взаимодействуют с положительно заряженными атомами металлов, скрепляя их между собой.

Ван-дер-Ваальсово межатомное взаимодействие складывается из отталкивания атомов, обусловленного перекрыванием их электронных оболочек, и дисперсионного притяжения. При сближении атомов электроны, имеющие противоположно направленные спины, отталкиваются. В результате межэлектронного отталкивания электронная плотность в пространстве между ядрами двух взаимодействующих атомов уменьшается, что приводит к увеличению энергии межъядерного отталкивания. Таким образом, Ван-дер-Ваальсово отталкивание атомов при их сближении складывается из отталкивания электронов и электростатического отталкивания ядер, дезэкранированных вследствие взаимодействия электронов. Ван-дер-Ваальсово межатомное взаимодействие ответственно за отклонение свойств реальных газов от свойств идеальных газов, за относительную стабильность различных конформеров, за структуру и свойства молекулярных кристаллов и жидкостей и т.д.

Межмолекулярное взаимодействие, взаимодействие электрически нейтральных молекул или атомов; определяет существование жидкостей и молекулярных кристаллов, отличие реальных газов от идеальных и проявляется в различных физических явлениях. Межмолекулярное взаимодействие зависит от расстояния r между молекулами и, как правило, описывается потенциальной энергией взаимодействия $U(r)$, т. к. именно средняя потенциальная энергия взаимодействия определяет состояние и многие свойства вещества.

Ориентационные силы действуют между полярными молекулами, т. е. молекулами, обладающими дипольными и квадрупольными электрическими моментами. Сила притяжения между двумя полярными молекулами максимальна в том случае, когда их дипольные моменты располагаются по одной линии и зависит от их взаимной ориентации. Хаотическое тепловое движение непрерывно меняет ориентацию полярных молекул, но, как показывает расчёт, среднее по всем ориентациям значение силы имеет конечную, не равную нулю, величину. Потенциальная энергия ориентации межмолекулярного взаимодействия $U_{op}(r) \sim p_1 p_2 r^{-6}$, где p_1 и p_2 — дипольные моменты взаимодействующих молекул. Соответственно сила взаимодействия $F_{op} = -\partial U_{op} / \partial r \sim r^{-7}$, т. е. F_{op} убывает с расстоянием значительно быстрее, чем кулоновская сила взаимодействия заряженных частиц ($F_{кул} \sim r^{-2}$).

Индукционные (поляризационные) силы действуют между полярной и неполярной молекулами, а также между полярными молекулами. Полярная молекула создаёт электрическое поле, которое поляризует другую молекулу — индуцирует в ней дипольный момент. Потенциальная энергия межмолекулярного взаимодействия в этом случае пропорциональна дипольному моменту p_1 полярной молекулы и поляризуемости α_2 второй молекулы $U_{инд} \sim p_1 \alpha_2 r^{-6}$. Индукционные силы $F_{инд} \sim r^{-7}$.

Дисперсионное межмолекулярное взаимодействие действует между неполярными молекулами. В атомах и молекулах электроны сложным образом движутся вокруг ядер. В среднем по времени дипольные моменты неполярных молекул оказываются равными нулю, но мгновенное значение дипольного момента может быть отлично от нуля. Мгновенный диполь создаёт электрическое поле, поляризующее соседние молекулы, — возникает взаимодействие мгновенных диполей. Энергия взаимодействия неполярных молекул есть средний результат взаимодействия таких мгновенных диполей. Потенциальная энергия дисперсионного межмолекулярного взаимодействия $U_{дисп}(r) \sim \alpha_1 \alpha_2 r^{-6}$ где α_1 и α_2 — поляризуемости взаимодействующих молекул. Дисперсионные силы $F_{дисп} \sim r^{-7}$ действуют между всеми молекулами и атомами, т. к. механизм их появления не зависит от наличия у молекул (атомов) пост. дипольных моментов. Обычно эти силы превосходят по величине как ориентационные, так и индукционные. Только при взаимодействии молекул с большими дипольными моментами, например молекул воды, $F_{ор} > F_{дисп}$ (в 3 раза для H_2O). При взаимодействии же таких полярных молекул, как CO , HI , HBr и др., $F_{дисп}$ в десятки и сотни раз превосходят все остальные. Существенно, что все три типа межмолекулярного взаимодействия одинаковым образом убывают с расстоянием [2]

$$U = U_{ор} + U_{инд} + U_{дисп} \sim r^{-6}.$$

В состав некоторых ВВ входит аммиачная селитра, она существует в нескольких кристаллических модификаций, каждая из которых стабильна лишь в определенных температурных условиях. Переход из одной модификации в другую происходит при следующих температурах: $-18\text{ }^\circ\text{C}$; $+32,3\text{ }^\circ\text{C}$; $+84,2\text{ }^\circ\text{C}$; $+125,8\text{ }^\circ\text{C}$, $169,6\text{ }^\circ\text{C}$. При переходе из одной модификации в другую изменяются не только форма кристаллов, но и их размер и плотность вещества. Так при температуре $+32,3\text{ }^\circ\text{C}$ происходит полиморфное превращение, которое сопровождается уменьшением объема на 3,3 % и выделением тепла 4,99 ккал/кг, что также усложняет технологические операции с ВВ [1].

Список литературы:

1. Генералов М.Б. Механика твердых дисперсных сред в процессах химической технологии - Калуга: Издательство Н. Бочкаревой, 2002-592с.
2. Физический энциклопедический словарь / Гл. ред. А.М. Прохоров . — М. : Сов. энциклопедия, 1984 . — 944 с. : ил

УДК 551.510.4

АНАЛИЗ СОСТОЯНИЯ ЗЕЛЕННЫХ ЗОН НА ТЕРРИТОРИИ ГОРОДА ДОНЕЦКА

Аверин Е.Г., Парфенюк А.С.

(ДонНТУ, Донецк, Украина)

На основе данных дистанционного зондирования Земли выполнена оценка площади зеленых насаждений и изучено состояние зеленых зон на территории города Донецка.

Территория Донецкого горсовета принадлежит к тем районам Украины, где воздействие человека на природу сказалось наиболее сильно. Большая часть земель застроена жилыми массивами и промышленными предприятиями, часть земель представлена распаханymi сельскохозяйственными полями. Рост урбанизации и интенсивная хозяйственная деятельность человека зачастую наносят значительный вред зеленым