

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ЭНЕРГИИ СВЯЗИ В БИОЛОГИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

Проанализированы модели объектов селективной дезинтеграции растительного происхождения, получены зависимости для определения адгезионной прочности поверхностного взаимодействия в двухкомпонентных моделях. Аналитически определена энергия адгезионного взаимодействия в биологических структурах.

Селективная дезинтеграция, структурные модели, адгезионная прочность, энергия поверхностного слоя.

Введение

Теоретическое определение энергии (работы), затрачиваемой на селективную дезинтеграцию [1] объектов биологического происхождения, необходимо для точной настройки оборудования, определения кинетической энергии рабочих органов, воздействующих на растительное сырье с целью получения продукта разрушения высокого качества, максимально разделяемого по составу.

Объект исследований – сырье селективной дезинтеграции растительного происхождения.

На первом этапе проанализируем модели объектов селективной дезинтеграции, находящиеся в напряженном состоянии под действием внешней нагрузки. Модели двухкомпонентных тел созданы на основе литературных данных и экспериментальных исследований строения растительных тканей – стеблей, плодов, корневищ. Все морфологические части растений имеют определенные геометрические формы, которые можно обобщить и классифицировать. На рис. 1 представлена такая классификация. Рассмотрим напряженное состояние деформированного двухкомпонентного сферического тела при различном положении границы раздела по отношению линии действия нагрузки P . Будем считать, что компоненты тела проявляют упругие свойства, но обладают различными модулями упругости первого и второго рода, соответственно E_1, G_1 и E_2, G_2 . Тело деформируется нагрузкой P на величину относительной деформации ξ . Условимся, что деформирование не приводит к разрушению каждого из компонентов, а напряжения адгезионного взаимодействия при разрушении меньше предельных напряжений каждого из компонентов.

Адгезионная прочность W_n , проявляющаяся как напряжения, возникающие при действии нагрузки P вдоль границы взаимодействия компонентов (рис. 1а), определится выражением

$$W_n = \sigma_{p_1} + \sigma_{p_2} = \xi(E_1 + E_2). \quad (1)$$

Когда нагрузка P прилагается перпендикулярно границе раздела компонентов (рис. 1б), то возникают касательные напряжения отрыва (сдвига), вызванные разницей относительного удлинения компонентов ξ_1 и ξ_2 , которые по своей сути являются адгезионной прочностью при сдвиге:

$$W_\tau = \sigma_{p_2} - \sigma_{p_1} = E_2 \xi_2 - E_1 \xi_1, \quad (2)$$

причем чем ближе к центру тела, тем меньше будет величина относительной деформации и, следовательно, касательных напряжений отрыва W_τ . Такой характер нагружения является наименее

эффективным, и создание высоких значений W_τ возможно только при значительной разности прочностных и деформационных характеристик компонентов, как, например, для гигротермически обработанного зерна. В то же время такое

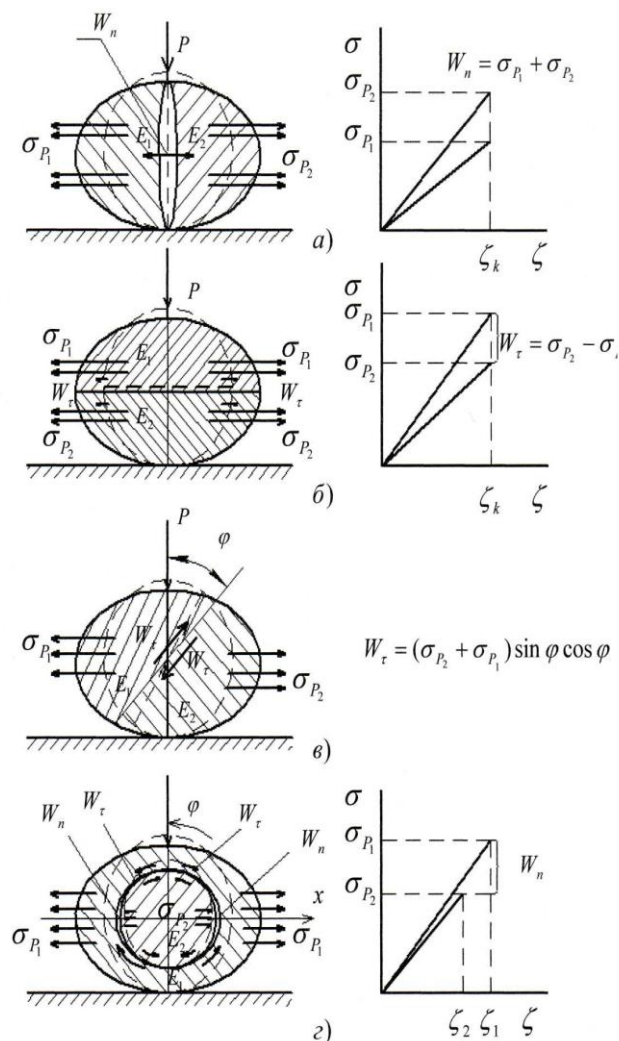


Рис. 1. Модели двухкомпонентных биологических структур в напряженном состоянии

нагружение совершенно не гарантирует образование новой поверхности, если адгезионная связь носит биополимерный характер. Действующее во времени давление приведет к образованию новых адгезионных связей, не менее прочных, чем прежние.

Третий случай нагружения, наиболее часто встречаемый в практике дробления и измельчения, характеризуется направлением действия нагрузки P под углом φ к поверхности контакта (рис. 1б). Деформирование тела при таком приложении нагрузки носит упруговязкий характер. Упругость обусловлена прочностными свойствами компонентов, а вязкость – сдвиговым течением на границе их взаимодействия. Для определения касательных напряжений отрыва W_τ по поверхности адгезионного взаимодействия компонентов воспользуемся критерием Келли-Девиса [2] для анизотропных полимерных материалов:

$$W_\tau = \sigma_\varphi \sin \varphi \cos \varphi,$$

где σ_φ – напряжения растяжения в плоскостях, прилегающих к границе раздела компонентов.

С учетом (1) запишем:

$$W_\tau = (\sigma_{p_1} + \sigma_{p_2}) \sin \varphi \cos \varphi,$$

или

$$W_\tau = \xi(E_1 + E_2) \sin \varphi \cos \varphi. \quad (3)$$

Далее перейдем к рассмотрению двухкомпонентного тела, для которого границей раздела является сфера или цилиндр (рис. 1з). Такая модель тела наиболее приближена к реальным формам многих природных объектов (например, семена злаковых и других видов растений, обладающих оболочками). В областях адгезионного контакта, максимально удаленных от линии действия силы P , возникают напряжения нормального поверхностного взаимодействия, причем возможны три варианта изменения начального равновесного состояния:

1) $\xi_1 \rangle \xi_2$ – относительное удлинение внешнего компонента больше, чем внутреннего. Тогда

$$W_n = \sigma_{p_1} - \sigma_{p_2} = E_1 \xi_1 - E_2 \xi_2; \quad (4)$$

2) $\xi_1 \approx \xi_2$ – относительные удлинения примерно равны. Тогда $W_n \approx 0$;

3) $\xi_1 \langle \xi_2$ – в этом случае внутренний компонент оказывает давление на внешний и никакого разрыва в границе контакта не возникает.

В областях поверхностного контакта участков, равноудаленных от линии действия силы, возникают касательные (сдвиговые) напряжения, причем они будут иметь место только при соблюдении условия $\xi_1 \neq \xi_2$ и определяются выражением

$$W_\tau = (\sigma_{p_1} - \sigma_{p_2}) \sin \varphi \cos \varphi. \quad (5)$$

Напряжения отрыва или сдвига по границе контакта двух твердых фаз направлены на преодоление сил межмолекулярного взаимодействия разнородных материалов.

На втором этапе теоретически определим энергию взаимодействия двух морфологических структур в растительной ткани на основе термодинамического метода исследований. Биологические структуры, содержащие в своем составе макромолекулы и большое количество разнообразных связей друг с другом, представляются весьма сложными для какой-либо идеализации. Тем не менее математик Фрэнк Рамсей еще в 1928 году доказал, что полная неупорядоченность невозможна. Каждое достаточно большое множество чисел, точек или объектов обязательно содержит высокоупорядоченную структуру. В общем виде теорему Рамсея можно сформулировать следующим образом: если число объектов в совокупности достаточно велико и каждые два из них связывает одно из набора отношений, то всегда существует подмножество данной совокупности, содержащее заданное число объектов, связанных отношением одного типа [3]. Отсюда можно сделать вывод: понятия аморфного и кристаллического состояний вещества являются идеализированными абстракциями, помогающими строить определенные структурные модели. Природные же материалы в большинстве своем содержат в той или иной пропорции как упорядоченные области, так и те, в которых заметная упорядоченность отсутствует. С этой позиции представим два взаимодействующих поверхностно друг с другом насыщенных биополимерами вещества трехмерными упорядоченными структурами, принимая во внимание преимущественно силы межмолекулярного (дипольного и дисперсионного) взаимодействия, водородные и прочие типы «слабых» связей.

Поверхность их взаимодействия представляет собой границу раздела двух веществ (рис. 2), при образовании которой на каждую молекулу вещества 2 приходится N молекул вещества 1. Молекулы этих веществ взаимодействуют главным образом со своими ближайшими соседями, средние расстояния до которых равны r_1 и r_2 соответственно. Изменение свободной энергии системы, которое соответствует изменению площади этой поверхности

$$\Delta S = \pi r^2,$$

определяется выражением

$$\Delta E_{12} = \frac{1}{2} (N n_1 V_1 + n_2 V_2) - U_{12}, \quad (6)$$

где n_1 и n_2 – число ближайших соседей (координационное статистическое число) молекулы внутри вещества 1 и вещества 2 соответственно; V_1 и V_2 – средние энергии парного взаимодействия молекул вещества 1 и 2 соответственно; U_{12} – средняя энергия взаимодействия поверхностных

молекул вещества 2 с поверхностным слоем, образованным N молекулами вещества 1,

$$N = \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^2, \quad (7)$$

и их ближайшими соседями. Таким образом, выражение для удельной поверхностной энергии взаимодействия двух веществ имеет вид

$$\sigma_{12} = \frac{r_2^2 n_1 V_1 + r_1^2 n_2 V_2 - 2r_1^2 U_{12}}{2\pi r_1^2 r_2^2} \quad (8)$$

и может быть вычислено на основе микроскопических величин, относящихся к рассматриваемой системе.

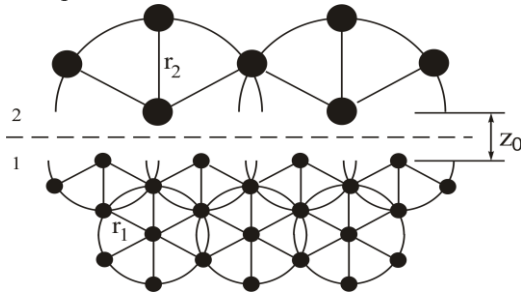


Рис. 2. Модель поверхностного взаимодействия конденсированных тел

Рассмотрим случай образования поверхности двумя однородными веществами с близкими концентрациями молекул. В этом случае следует ожидать, что средние расстояния между молекулами и координационные статистические числа молекул этих веществ будут примерно одинаковыми, $N = 1$ и выражение (8) принимает вид

$$\sigma_{12} \approx \frac{n(V_1 + V_2 - 2V_{12})}{2\pi r^2}, \quad (9)$$

где V_{12} – средняя энергия парного взаимодействия молекулы 1 с молекулой 2.

Ясно, что энергии взаимодействия молекул подобных веществ друг с другом будут тоже близкими, поэтому поверхностное натяжение на границе их раздела, как следует из формулы (9), должно быть мало. В частности, в тривиальном случае, когда вещества 1 и 2 состоят из одинаковых молекул, поверхностное натяжение (9) обращается в ноль. Этого и следовало ожидать: внутри однородного вещества никаких поверхностей, на образование которых затрачивалась бы энергия, не существует.

С технической точки зрения коэффициент поверхностного натяжения является одной из важнейших характеристик системы веществ, имеющих общую поверхность раздела, так как он отражает энергетическое состояние этой поверхности, а следовательно и ее физико-химические свойства. Еще одной важной характеристикой подобных систем является работа, необходимая для разделения поверхности контакта веществ единичной площади на две свободные поверхности типа «конденсированное вещество –

газ», то есть работа адгезии (изменение энергии Гиббса в системе) w_{12} [4, 5]:

$$w_{12} = \sigma_1 + \sigma_2 - \sigma_{12}. \quad (10)$$

Работу адгезии на границе раздела «конденсированное тело – конденсированное тело» можно выразить через среднюю энергию U_{12} взаимодействия приповерхностных молекул веществ 1 и 2:

$$w_{12} = \frac{U_{12}}{\pi r_2^2}. \quad (11)$$

Расчет этой энергии представляет собой центральную проблему при исследовании адгезионных свойств веществ.

Возвращаясь к рис. 2 и учитывая взаимодействие только между соседними молекулами веществ 1 и 2, которые образуют один-два приповерхностных слоя на границе площадью ΔS , среднюю энергию взаимодействия U_{12} можно представить в следующем виде:

$$U_{12} = \frac{n_1}{r_1^3} \cdot \int_0^{r_1} dz' \cdot \int_0^{r_2} dx \cdot x \cdot V_{12} \left(\sqrt{x^2 + (z_0 + z')^2} \right) + \frac{n_2}{r_2^3} \cdot \int_0^{r_2} dz' \cdot \int_0^{r_1} dx \cdot x \cdot V_{12} \left(\sqrt{x^2 + (z_0 + z')^2} \right) \quad (12)$$

где $V_{12}(r)$ – потенциальная энергия парного взаимодействия молекул 1 с молекулами 2, а величина z_0 имеет смысл среднего расстояния между поверхностными молекулами веществ 1 и 2 (см. рис. 2) и может быть найдена как решение уравнения $U'(z) = 0$, где $U(z)$ – функция, стоящая в правой части равенства (12).

Первое слагаемое в выражении (12) определяет среднюю энергию взаимодействия поверхностной молекулы вещества 2 с $Nn_1/2$ приповерхностными молекулами вещества 1, второе – среднюю энергию взаимодействия N поверхностных молекул вещества 1 с $n_2/2$ приповерхностными молекулами вещества 2. В том случае, когда $r_1 \ll r_2$, основной вклад в суммарную энергию U_{12} будет вносить первое слагаемое равенства (12), в котором интегрирование по поверхности можно распространить до бесконечности ($N \gg 1$). Если, кроме того, $r_1 \ll z_0$, в этом слагаемом можно пренебречь усреднением по глубине z залегания приповерхностных молекул вещества 1 и выражение для средней энергии U_{12} приобретает вид

$$U_{12} \approx \frac{n_1}{r_1^2} \cdot \int_0^\infty V_{12} \left(\sqrt{x^2 + z_0^2} \right) \cdot x \cdot dx. \quad (13)$$

Проведенные аналитические исследования поверхностного взаимодействия конденсированных тел можно проиллюстрировать следующим графиком (рис. 3).

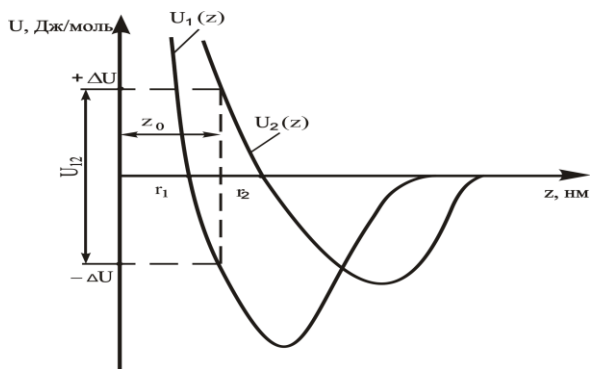


Рис. 3. Графическая интерпретация энергии поверхностного слоя и расстояния между адгезионно взаимодействующими телами

Выводы

Энергия поверхностного слоя U_{12} является суммой энергий отталкивания и притяжения, которые по величине равны между собой только на расстоянии z_0 , обеспечивающем термодинамическое равновесие в поверхностном слое, а энергия U_{12} является определяющей при расчете W_n и W_τ в выражениях (1)–(5) для расчета адгезионной прочности и является работой образования новой поверхности при селективной дезинтеграции.

Список литературы

1. Руднев, С.Д. О селективном измельчении, селективности измельчения и селективной функции / С.Д. Руднев, А.М. Попов, О.Е. Рыбина // Известия вузов. Пищевая технология. – 2006. – № 5. – С. 42–44.
2. Нарисава, И. Прочность полимерных материалов. – М.: Химия, 1987. – 400 с.
3. Грэм, Р.Л. Теория Рамсея / Р.Л. Грэм, Д.Х. Спенсер // В мире науки. – 1990. – № 9. – С. 70–76.
4. Зимон, А.Д. Адгезия пищевых масс / А.Д. Зимон. – М.: Агропромиздат, 1985. – 272 с.
5. Дерягин, Б.В. Адгезия твердых тел / Б.В. Дерягин, Н.А. Кротова, В.П. Смигла. – М.: Наука, 1973. – 279 с.

ГОУ ВПО «Кемеровский технологический институт пищевой промышленности»,
650056, Россия, г. Кемерово, б-р Строителей, 47.
Тел./факс: (3842) 73-40-40
e-mail: office@kemtipp.ru

SUMMARY

S.D. Rudnev

Theoretical Account of Binding Energy in Biological Structures

Models of plant tissue selective disintegration objects have been analyzed. Formulae for detection of surface interaction adhesive strength in two-component models have been obtained. The energy of adhesive interaction in biological structures has been analytically determined.

Selective disintegration, structural models, adhesive strength, surface energy.

Kemerovo Institute of Food Science and Technology
47, Boulevard Stroiteley, Kemerovo, 650056, Russia
Phone/Fax: +7(3842) 73-40-40
e-mail: office@kemtipp.ru

