

II. Секция естественных наук

Явление квантования деформаций и возникновение деформационных волн в твердых телах

Н.А. Рязанцев (КФ ДонГТУ)

В физике твердого тела и в физике горных пород, в частности, сложилось мнение, что под воздействием внешних физических воздействий горные породы и другие твердые тела испытывают в общем случае нелинейные изменения размеров, объема и формы. Связь между внешней нагрузкой и деформацией при механическом воздействии изображается в виде кривой, на которой выделяют ряд областей: упругую, пластическую, разрушающую деформации и др. При этом под деформацией понимается любое изменение равновесного расстояния между атомами, молекулами, изменение размеров, объема и формы твердого тела. Принято считать, что деформация в твердом теле возникает со скоростью звука, однородна по объему и, что однородность и степень достигнутой деформации может регулироваться экспериментатором. Изменениями деформаций в пространстве и времени, локализацией пластической деформации часто пренебрегают, а под пластической деформацией упрощенно понимают многократный разрыв и образование химических связей с их ослаблением или упрочнением без потери твердым телом сплошности на макроуровне. Сложилось также мнение, что с увеличением давления всестороннего сжатия прочность и пластичность твердых тел возрастают, а какой-либо четкой зависимости прочности и пластичности от схемы нагружения до сих пор не установлено.

Вместе с тем, в разные годы отдельными исследователями высказывались интересные новые идеи и приводились нетривиальные экспериментальные данные. Так в работе /1/ Дж. Белл приводит данные о квантованном распределении деформаций и модулей упругости в моно и поликристаллических металлах и сплавах. К сожалению он не объяснил физику этого процесса, поэтому для многих специалистов его результаты были сочтены недостаточно убедительными.

В работах А.А. Преснякова /2/ утверждается, что пластическая деформация - это последовательный ряд структурных переходов в твердом теле. Идеи Преснякова А.А. хорошо согласуются с данными Дж. Белла, так как квантование модулей упругости есть не что иное, как последовательный ряд структурных (фазовых) переходов II рода со скачкообразным изменением модулей упругости.

В последние годы появилось также много работ с данными о дискретных свойствах горного массива, о дискретном и волноподобном изменении параметров горных пород /3-5/. Обнаружено подобие процессов деформирования и разрушения горных пород на различных масштабных уровнях /6/. В ряде работ указывается на распространение деформационных волн со сверхнизкими (километры в год) скоростями /7/. Однако до настоящего времени физическая суть указанных выше закономерностей не раскрыта.

Предлагаемая работа является попыткой теоретического и экспериментального обоснования явления квантования деформаций в твердых телах, как единого для всех веществ закона, не зависящего от химической природы и

обусловленного изменениями при внешнем воздействии электронной конфигурации атомов и симметрии орбиталей.

При механическом воздействии на твердое тело нарушается равновесное состояние его отдельных атомов и молекул. Если отвлечься от поступательного движения молекулы как целого, то для нее характерны три вида движения: электронное (движение электронов в поле ядер), колебательное (колебание ядер около положения равновесия) и вращательное (вращение молекул вокруг оси, проходящей через центр масс). Энергия всех этих видов движения подчиняется квантовым законам, однако ввиду значительно большей массы ядра атома по сравнению с электроном, энергетические уровни колебательного и вращательного движений находятся очень близко друг к другу. Электронные переходы всегда сопровождаются изменениями в колебательном и вращательном движении. Энергия твердого тела, как сумма энергий всех составляющих его частиц, также квантована.

Квантование колебательных уровней атомов и молекул можно представить в виде:

$$E_{\text{кол}} = h\nu (n + 1/2),$$

где ν - собственная частота колебаний атома;

h - постоянная Планка;

n - целое число, которое часто трактуют как число фононов.

Максимальная амплитуда колебаний, определяющая характерный размер области локализации атома, который в силу соотношения неопределенностей связан с минимальным импульсом, составит:

$$X_{\text{max}} = (2E / m\nu^2)^{1/2}$$

Относительное изменение амплитуды колебаний в процессе возбуждения не зависит от массы атомов и составляет:

$$\varepsilon = \frac{\Delta X}{X} = \left(\frac{n - n_0}{n_0 + 1/2} \right)^{1/2}$$

где n_0 и n - число фононов до и после возбуждения.

Поскольку число фононов очень велико (10^{20}), то дискретностью значений энергии и деформации часто пренебрегают, т.е. считают непрерывными. Нетрудно показать, что механическое возбуждение фононов при обычных температурах дает деформации порядка 1%, которые из-за отсутствия взаимодействия фононов принято считать упругими.

Фундаментальной закономерностью, отражающей связь между процессами деформирования и разрушения твердого тела на микро- и макроуровнях является связь между энергией активации процесса разрушения и энергией атомизации, а также теплотой образования кристаллической решетки. Очевидно, что разрыв химических связей в твердом теле сопровождается возбуждением, перераспределением и переходами электронов (в первую очередь наружных). Энергия квантов переходов наружных электронов - $4,2 (10^4 \dots 10^7)$ Дж/моль. В результате переходов с ростом давления в горных породах увеличивается проводимость на два порядка и более. При степенях деформации все-

го (1,5...6)% в полупроводниках обнаружены электрон-вибронные переходы, в проводниках за счет перехода электронов из области с большей плотностью их энергии в область с меньшей плотностью энергии обнаружен бароэлектрический эффект /8-10/. В валентных полупроводниках, к которым относится большинство горных пород, существуют глубокие метастабильные экситоны (возбуждение валентной связи, бегущее по кристаллу), вследствие чего возникают деформации и дефекты решетки (автолокализация экситона и образование междуузельных атомов).

В реальных твердых телах имеется значительное количество различного рода дефектов, благодаря которым отдельные электроны оказываются сильно возбужденными. Локальные нарушения поля решетки в виде примесных атомов, вакансий, дислокаций обуславливают появление в запрещенной зоне разрешенных состояний, связанных с областью возмущения. С ростом концентрации локальных возмущений волновые функции локализованных состояний могут перекрываться и дискретный уровень энергии расщепляется. Энергия ионизации примеси уменьшается по сравнению с энергией ионизации водорода на величину, зависящую от относительной диэлектрической проницаемости и равна по модулю энергии основного состояния. Вблизи примесных центров энергия активации возбужденных состояний составляет $(0,64...0,96)10^{-19}$ Дж, а ширина запрещенной зоны в породах $(0,16...3,0)10^{-19}$ Дж.

Дополнительное внешнее механическое возбуждение меняет квазимпульс частицы, ее энергию, сообщает электрону ускорение, приводит к волнообразным колебаниям ширины запрещенной зоны, к увеличению вероятности перехода электронов одного дискретного энергетического уровня на другой и в зону проводимости. Независимо от схемы приложения внешних механических нагрузок энергия электрона возрастает и он либо переходит на более высокий энергетический уровень, либо с подуровня с меньшей энергией на подуровень с большей энергией внутри одного и того же энергетического уровня.

Поскольку электронные волны - это волны вероятности нахождения электрона в той или иной области пространства, то внешнее воздействие, изменяя распределение вероятности, меняет электронную конфигурацию атомов и симметрию орбиталей.

В возбужденном состоянии атом или молекула находятся $(10^{-5}...10^{-8})$ с, после чего электрон возвращается в предыдущее состояние. Обратные переходы сопровождаются либо излучением кванта света (электромагнитный спектр), либо электрон передает свою энергию колебаниям окружающих атомов (акустический спектр). В первом случае переходы наружных электронов дают видимый свет и УФ -излучение, внутренних электронов - УФ- и рентгеновское излучение. При колебательно-вращательных переходах возникает видимый свет и ИК-лучи, либо рождается сразу несколько фононов / 11/.

Атомы, молекулы, кристаллы твердых тел - многоэлектронные системы. Свойства их обусловлены строением электронных оболочек и энергией связи электронов с ядром. Для определения приближенных волновых функций многоэлектронных оболочек предложен метод Слейтера. В этом случае угловая составляющая волновой функции имеет известную симметрию s-p-d-f- и т.д. орбиталей, а радиальная составляющая имеет вид:

$$R(r) = A r^{n_*-1} \cdot e^{-z_*/n_*},$$

где z_* - эффективный заряд, действующий на заданный электрон;

$z_{\text{эф}} = z - \gamma$; γ - коэффициент экранирования; $n_{\text{эф}}$ - эффективное главное квантовое число; $n_{\text{эф}} = n - \sigma_c$; σ_c - квантовый дефект.

В этом случае в многоэлектронном атоме можно выделить один рассматриваемый электрон, а остальные электроны вместе с ядром составляют атомный остов. Энергия такого водородоподобного атома будет зависеть от эффективного главного квантового числа и азимутального квантового числа.

Если к радиальной составляющей волновой функции предъявить требования регулярности (конечности, непрерывности, однозначности), то среднее расстояние электрона от ядра в любом квантовом состоянии будет:

$$r = \frac{n_{\text{эф}}^2 a_0}{z_{\text{эф}}} \left(3/2 - \frac{l(l+1)}{2n_{\text{эф}}^2} \right)$$

где l - азимутальное квантовое число; a_0 - первый борковский радиус.

Если материал не имеет дефектов, то в качестве исходного состояния принимают основное состояние атома или молекулы. Если материал имеет дефекты, то электроны сильно активизированы и их энергетические состояния соответствуют гораздо большим квантовым числам. Для указанных выше энергий активации возбужденных состояний и ширины запрещенных зон в породах главное квантовое число составит 20...25. Такие высоковозбужденные уровни энергии атомных частиц называют ридберговскими. Очевидно, что при наличии в твердых телах микротрещин и объемных дефектов, степень возбуждения электронов еще выше. Характерно, что относительная деформация не зависит от заряда ядра, т.е. от химического состава твердого тела, а зависит только от квантовых чисел (по сути от степени дефектности материала).

Для сильно возбужденных электронов при переходах с уровня на уровень, деформация не превышает 1% и сопоставима с упругими деформациями колебательного движения. Для ридберговских электронов переходы между отдельными уровнями возможны лишь при степенях деформации порядка 10%, поэтому для них следует ожидать s-p-d-f- и т.д. переходы внутри одного энергетического уровня. При этом величины нормальной и угловой деформации определяются изменениями радиальной и угловой составляющей волновых функций и при $n = \text{const}$ зависят только от азимутальных чисел.

Для ридберговских электронов с $n=25$ при изменении азимутального квантового числа от 1 до 19 имеем следующий дискретный ряд деформаций: 0,11; 0,32; 0,64; 1,06; 1,6; 2,24; 3,0; 3,8; 4,8; 5,9; 7,0; 8,3; 9,7; 11,2; 12,8; 14,5; 16,3; 18,3; 20,3%.

Для объяснения эффектов упрочнения и разупрочнения материалов в процессе деформирования необходимо помнить, что молекулярные орбитали подразделяются на связывающие, несвязывающие и разрыхляющие. На связывающей молекулярной орбитали энергия электрона ниже, чем она была на соответствующей атомной орбитали, а на разрыхляющей - выше. Удаление всех электронов со связывающей орбитали и переход электрона на разрыхляющую орбиталь приводит к распаду, дестабилизации, разрыхлению химической связи. При переходе на связывающую орбиталь связь между атомами упрочняется или возникает, если ее не было. То есть электронные переходы могут как залечивать дефекты, так и порождать их. При внешнем механическом воздействии рост величины всестороннего сжатия приводит как к упрочнению, так и ослаблению химических связей, в целом же, за счет образования π -связей

прочность должна возрастать. Девиатор напряжений (сдвиговая компонента тензора) за счет изменения симметрии орбиталей должен приводить к ослаблению или полному распаду химических связей. Распад связей должен наблюдаться как критический переход, в результате которого возникают микро- и макродефекты, дилатансионное разрыхление. При этом возбуждение критического числа дефектов может привести к катастрофическому макроразрушению.

В отсутствие внешних нагрузок количество возбужденных молекул можно выразить в виде:

$$N = N_0 \cdot e^{-Q_0/bT}$$

где Q_0 - энергия активации, Дж

При возбуждении в неравнокомпонентном поле сжимающих напряжений энергия активации снижается и количество активированных молекул возрастает. Так как вид деформационного состояния является периодической функцией вида напряженного состояния и времени $/12/$, следует ожидать и периодического изменения энергии активации, а также всех физико-технических параметров горных пород и характера разрушения.

Квантование и периодическое изменение деформаций и других параметров горных пород в пространстве и времени можно интерпретировать как макропроявление электронных волн и называть, по аналогии, деформационными волнами, подразумевая при этом волны вероятности проявления той или иной деформации, того или иного параметра физико-технических свойств. Скорость этих волн определяется скоростью колебательного движения частиц в волне возмущения, определяется частотой возмущающей силы, величиной максимальной деформации, вызываемой этой силой и может быть много меньше скорости звука в среде.

Экспериментальные исследования деформаций в горных породах, проведенные на установке неравнокомпонентного трехосного сжатия конструкции ДонФТИ АН Украины в режиме заданных нагрузок и непосредственно в горном массиве шахты им. А.Г. Стаханова, подтвердили, что на диаграммах "напряжение-деформация" наблюдается ряд характерных точек, в промежутках между которыми связь напряжений и деформаций подчиняется прямолинейному закону. Величина деформаций в характерных точках для угля, песчаника, алевролита и аргиллита имеют очень близкие, а в большинстве случаев строго определенные значения, приведенные на рис.1. Характерные деформации при этом составили: 0,64; 1,0; 1,6; 2,25; 2,6; 3,7; 4,6; 5,0; 5,8; 6,3; 7,0; 8,3; 9,7%. Ряд других экспериментальных данных для угля, песчаника и аргиллита, представленных в координатах "объемная деформация - максимальная линейная деформация" (рис.2), позволяют дополнить ряд характерных деформаций следующими значениями: 1,8; 3,0; 11,2; 12,7; 13,7; 14,5; 16,3%. Наблюдаемый ряд хорошо описывается теоретической зависимостью для деформации электронных оболочек, предложенной выше. Сдвиговые деформации при этом составляют 1,618 величины нормальных (1,618 - "золотое сечение"). Указанные данные также хорошо совпадают с экспериментальными данными и эмпирической зависимостью Дж. Белла для металлов и сплавов, если показателем степени считать азимутальное квантовое число:

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{2}{3} \right)^{1/2} ; \quad \gamma_1 = \sqrt{\pi} \left(\frac{2}{3} \right)^{1/2}$$

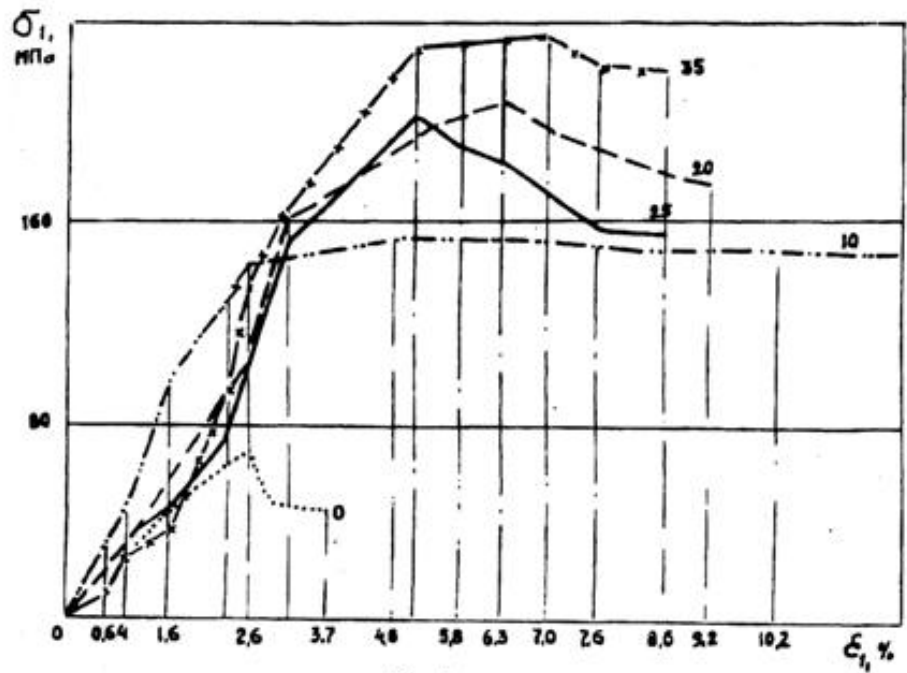


Рис.1

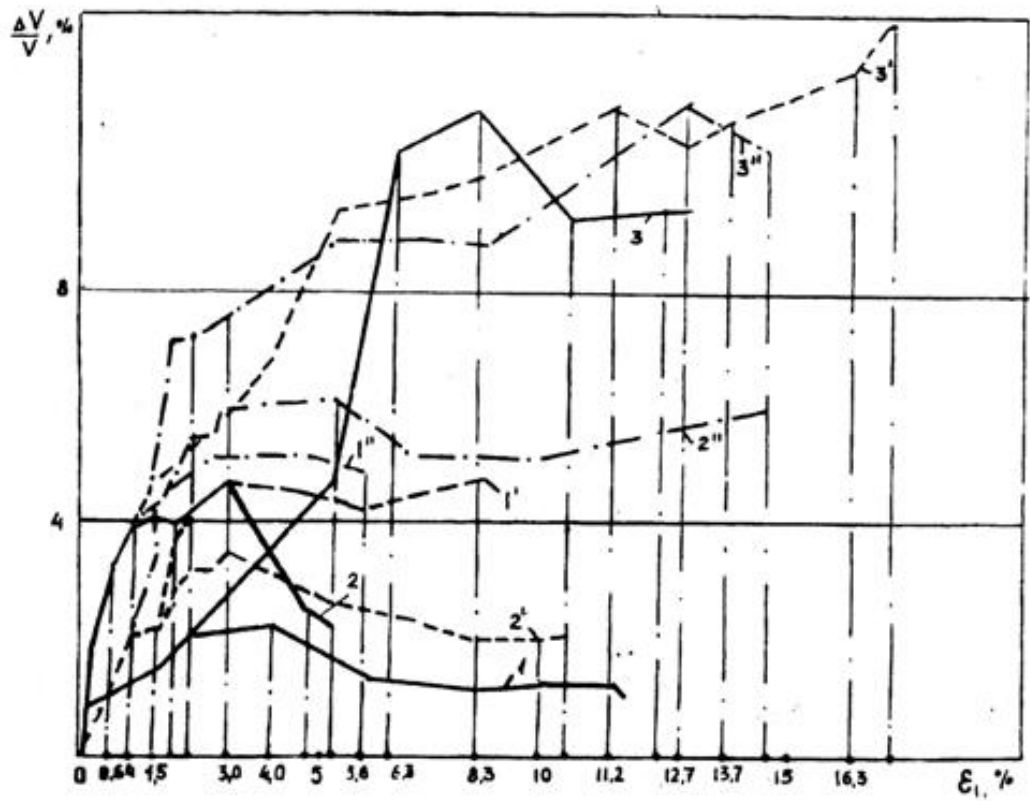


Рис.2

В ряде экспериментов лучшее соответствие наблюдается при меньших значениях главного квантового числа (21,22), однако дискретность сохраняется.

Наличие одного и того же ряда характерных деформаций и для горных пород, и для металлов, а также для различных видов напряженного состояния подтверждает вывод о независимости величины деформации от химической природы вещества и схемы приложения нагрузки. Деформации как бы продолжают один и тот же дискретный ряд, соответствующий изменению конфигурации орбиталей (атом скачком изменяет форму распределения электронного облака). Схема нагружения и величина давления оказывают влияние лишь на уровень достигнутых деформаций из этого ряда. Отмечается также строгая периодичность в изменении деформаций при увеличении бокового давления через каждые 11-12 МПа и через каждые 45 градусов поворота вектора напряжений (изменение параметра Надаи-Лоде на 0,5). Однако в целом с ростом бокового давления степень достигнутой деформации уменьшается, а при изменении схемы нагружения от обобщенного сжатия до обобщенного сдвига - увеличивается по экспоненте (рис.3). Приведенные данные подтверждают обоснованную выше периодичность деформаций от указанных параметров.

Величина деформации и вид деформационного состояния меняются также во времени и пространстве (рис. 4 и 5), что подтверждает существование деформационных волн. Указанные данные получены по наблюдениям за глубинными реперами в вентиляционном квершлага №2 горизонта 1136м шахты им. А.Г. Стаханова. Имеются данные о периодическом изменении в пространстве и времени скорости звука, модулей упругости, прочности, энергоемкости разрушения, пористости, влажности, начальной скорости газовыделения, уровня воды в скважинах, электропроводности и других параметров горных пород (рис.6).

Экспериментальным подтверждением квантования деформаций и электронных переходов является обнаружение практически во всех материальных средах электромагнитных явлений при деформировании.

Результаты исследований показывают, что процессы деформирования и разрушения твердых тел сопровождаются излучением практически во всем спектре электромагнитных волн: от долей герц до гамма-излучения, а также некоторыми видами корпускулярных эмиссий /13/. Дискретное расширение горных пород обнаружено также при тепловом воздействии (как при нагреве, так и при охлаждении) /14/.

Наличие мультizonной проводимости, подобие зонных структур различных элементов и т.п. /15,16/ позволяет утверждать, что процессы, происходящие в электронных оболочках всех химических элементов подобны и именно это приводит к одному и тому же дискретному ряду относительных деформаций.

Таким образом, имеющиеся теоретические предпосылки и экспериментальные данные позволяют считать твердо установленным факт квантования деформаций и наличия деформационных волн в твердых телах как макропроявления электронных переходов и электронных волн. Данное явление подтверждает диалектическую взаимосвязь отдельных разделов физики, вносит коренные изменения в существующие представления о свойствах твердых тел, как ответной реакции на воздействие физическими полями, излучением и веществом, может быть основой создания физически обоснованной теории деформирования и разрушения твердых тел, открывает широкую перспективу использования результатов исследований на практике.

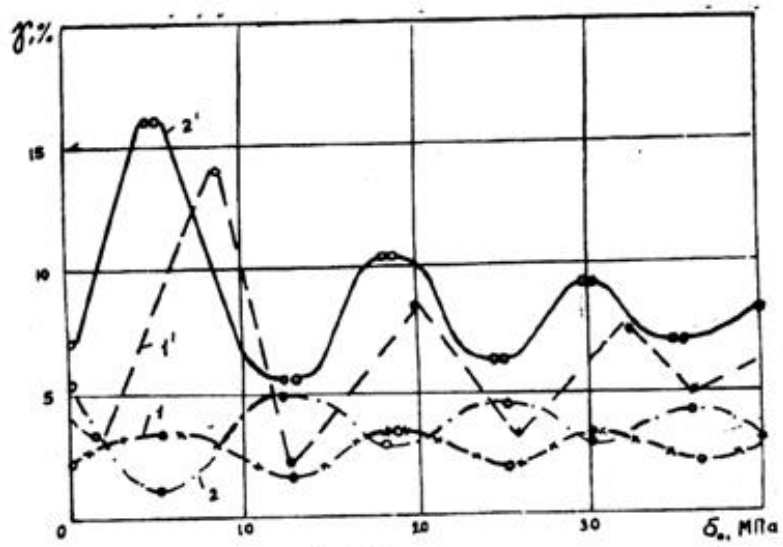


Рис. 3а

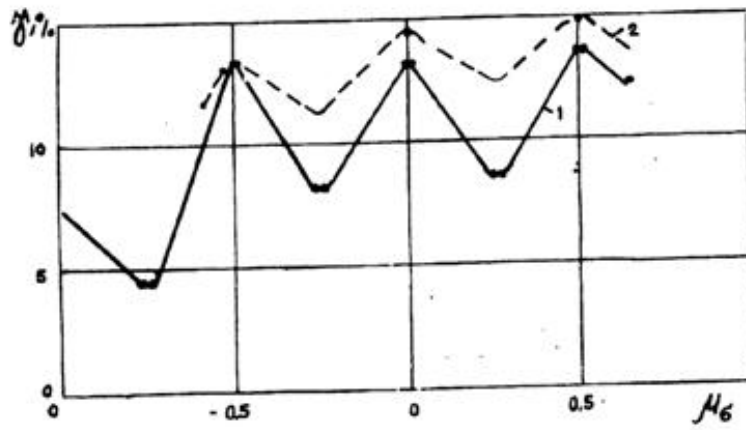


Рис. 3б

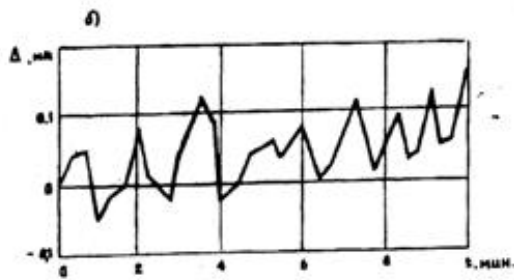
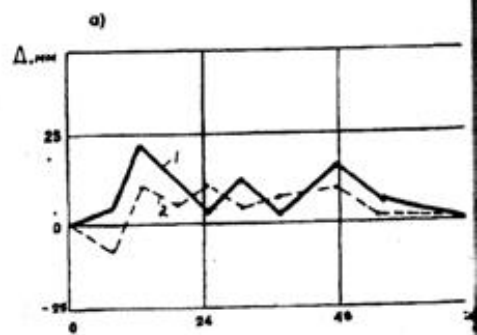


Рис. 4



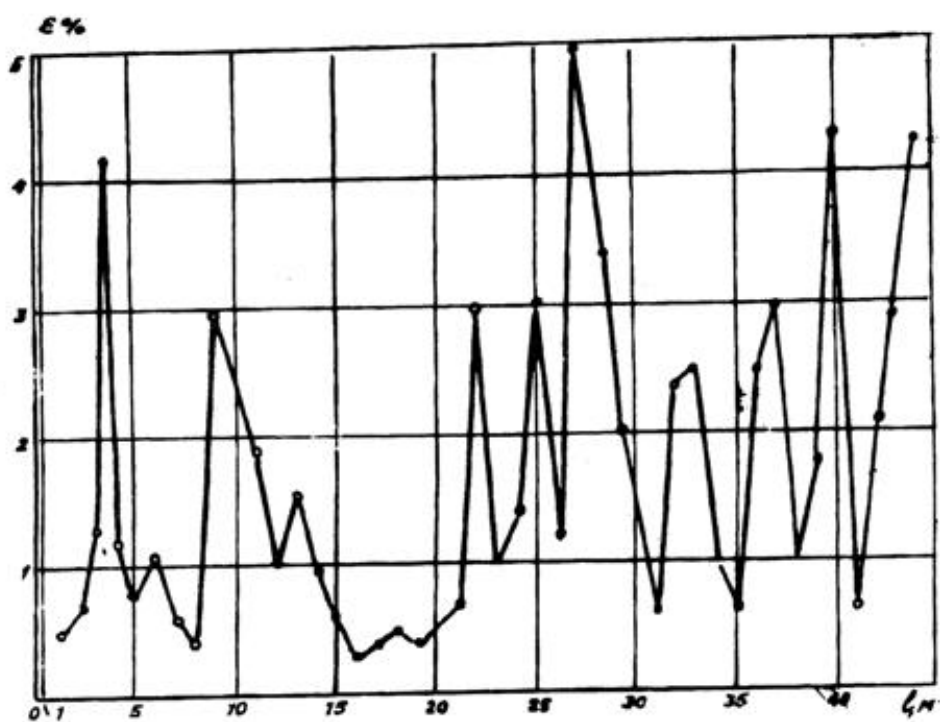


Рис. 5

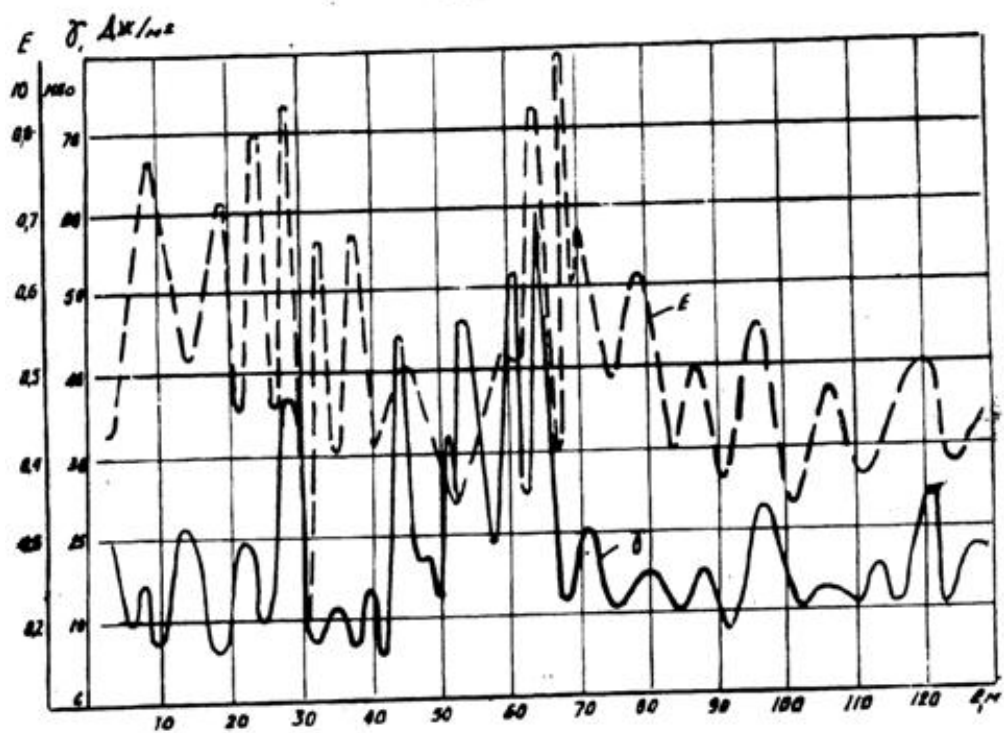


Рис. 6

Литература

1. Белл Дж. Экспериментальные основы механики деформируемых твердых тел.- М.: Наука, 1984. В 2-х частях.
2. Пресняков А.А. Локализация пластической деформации.- Алма-Ата: Наука, 1981.- 122с.
3. Рязанцев Н.А., Носач А.К., Нестеренко В.Н. Характер изменения физико-технических параметров горных пород в массиве //Разраб. мест. полезн. ископ.- Киев: Техника, 1991.- Вып.90.- С.41-45.
4. Курленя М.В., Опарин В.Н. О явлении знакопеременной реакции горных пород на динамические воздействия // Физ.-техн. пробл. разраб. полезн. ископ., 1990.- N4.- С.3-13.
5. Дискретные свойства геофизической среды.- М.: Наука, 1989.174с.
6. Куксенко В.С., Мансуров В.А., Манжиков Б.И., Томилин Н.Г., Фролов Д.И., Станчиц С.А., Инжеваткин И.Е. Подобие в процессе разрушения горных пород на различных масштабных уровнях //Физика Земли. Изв. АН СССР, 1990.- N6.- С.66-70.
7. Нерсесов И.Л., Лукк А.А., Журавлев В.И., Галаганов О.Н. О распространении деформационных волн в земной коре Юга Средней Азии //Физика Земли. Изв. АН СССР, 1990.-N5.- С.102-112.
8. Григорьев В.И., Григорьева Е.В., Ростовский В.С. Бароэлектрический эффект и магнитные поля планет и звезд//Физика Земли. Изв. АН СССР, 1990.- N4.- С.3-14.
9. Музафар Х. Бакиев, Дж. Байерли, В.С. Куксенко. Электрические явления при скольжении горных пород в условиях действия высокого гидростатического давления //Докл. АН СССР, 1982.- Т.266.- N6.С.1347-1346.
10. Волошин В.А. Электрон-вибронный переход в редкоземельных диэлектриках//Физика и техника высоких давлений, 1989.- Вып.30.С.27.
11. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. Введение в квантовую физику.-М.:Наука, 1988.- 328с.
12. Алексеев А.Д., Рязанцев Н.А. Напряженное и деформационное состояние в горных породах при неравнокомпонентном сжатию //Физика и техника высоких давлений, 1988.- Вып.28.- С.35-39.
13. Марков Г.П., Станко В.И. Об электромагнитном излучении горных пород //Физика Земли. Изв. АН СССР, 1990.- N3.- С.94-95.
14. Дмитриев А.П., Гончаров С.А. Термодинамические процессы в горных породах.- М.: Недра, 1990.- 360с.
15. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников.-М.: Наука, 1978.- 616с.
16. Киреев П.С. Физика полупроводников.- М.: Высшая школа, 1975.-584 с.

Определение сильной экстремали для частицы в потоке однородной гранулированной среды

Л.Г. Дашковский (КФ ДонГТУ)

Рассмотрена математическая модель истечения однородного гранулированного материала в выпускное отверстие в стационарном режиме: основанная на использовании однородной конечной марковской цепи [1]. Показано, что после продолжения на непрерывное вероятное пространство