

УРАХУВАННЯ МІЦНОСТІ МОЛЕКУЛЯРНИХ ЗВ'ЯЗКІВ ГІРСЬКИХ ПОРІД ПРИ ЇХ РУЙНУВАННІ

О. М. Терентьев, докт. техн. наук (НТУУ «КПІ»)

Ураховано вплив міцності молекулярних зв'язків породного масиву при виборі динамічних робочих органів, які здатні забезпечувати руйнування масиву з мінімальними енергетичними витратами.

Ключові слова: руйнування породи, молекулярний зв'язок, міцність зв'язку, внутрішня енергія, взаємозв'язок молекул.

Учтено влияние прочности молекулярных связей породного массива при выборе динамических рабочих органов, которые способны обеспечивать разрушение массива с минимальными энергетическими затратами.

Ключевые слова: разрушение пород, молекулярная связь, прочность связи, внутренняя энергия, взаимосвязь молекул.

Influence of strength of molecular linkage in rock massif for a choice of dynamic working members that are capable to destruct the massif with the minimum power expenses is considered.

Key words: rock destruction, molecular linkage, strength of linkage, internal energy, interaction of molecules.

Постановка проблеми та зв'язок її з важливими науковими програмами. Законом України про Загальнодержавну комплексну програму розвитку високих наукоємних технологій на 2005–2013 роки від 09.04.2004 р. № 1676-IV визначено проблему, на розв'язання якої спрямована ця робота. Завдання подальшого розвитку гірничої науки, поряд з теоретичними дослідженнями, вимагають ширшого застосування методів математичного моделювання [1–3]. Перевірка передпроектних розрахунків методами математичного моделювання дає суттєве скорочення часу і вартості встановлення адекватності математичних моделей фізичним зразкам обладнання та технологічних процесів. Постановою Кабінету Міністрів України від 18 квітня 2006 р. № 516 затверджено Державну програму розвитку машинобудування (код програми 397). Згідно з цією програмою особлива увага надається дослідженням функціонування гірничих систем. У даній роботі розглядаються питання, що сприяють створенню гірничих систем класу породний масив–робочий орган–привід з погляду квантово-механічного підходу на молекулярно-хвильовому рівні. Основою такого функціонування системи є руйнування міжмолекулярних зв'язків гірських порід.

Аналіз досліджень і публікацій, в яких започатковано розв'язання даної проблеми, дозволив виділити нерозв'язані питання загальної проблеми, яким присвячується ця стаття. Відомі і загально визнані моделі взаємозв'язку між молекулами – моделі Максвелла, Фойгта, Кельвіна, Пойнтінга, Томпсона, Вінера, Бургаса та інших. Автори розглядають цю взаємодію як сукупність сил пластичності й пружності [3, 4]. Потрібно віддати їм належне і подякувати за надану можливість вивчати складні гірські процеси і створювати на цій базі

передову енергозберігаючу техніку. Вони припускають сталість фізико-механічних констант породних масивів, що руйнуються. Однак останні в різних умовах поведуться по-різному. Прикладом цього є зміна фізико-механічних властивостей реологічних структур в умовах негативних температур. Тому робляться спроби розглядати фізико-механічні константи гірських порід не як емпіричні уявлення з набором констант, а як функціональні аналітичні моделі, що змінюються в залежності від зовнішніх умов.

Мета роботи – вивчення впливу міцності молекулярних зв'язків породного масиву для вибору динамічних робочих органів, які здатні забезпечувати руйнування масиву з мінімальними енергетичними витратами, та підготовка практичних рекомендацій з використання гідроімпульсних робочих органів.

Виклад основного матеріалу дослідження та обґрунтування отриманих наукових результатів. Для моделювання процесів руйнування породних масивів на молекулярно-хвильовому рівні межа міцності гірських порід при руйнуванні представлена як

$$\sigma_p = 2\gamma / \delta, \quad (1)$$

де γ – поверхнева енергія молекули гірської породи, Дж/м²; δ – коефіцієнт, що визначає максимальну відстань між молекулами, при якій руйнуються електромагнітні зв'язки між ними, м.

Поверхнева енергія молекули породного масиву:

$$\gamma = 2m \cdot V^2 / (\pi \cdot d_m^2), \quad (2)$$

де m – маса молекули породи, кг; V – швидкість впливу на породу робочим органом, м/с; d_m – діаметр молекули, м.

$$V = \lambda \cdot \nu = \hbar \cdot \sqrt{1 - (V^2 / c^2)} \cdot \nu / (2\pi \cdot m_0 \cdot V), \quad (3)$$

де $\lambda = h / (m \cdot c)$ – довжина хвилі коливань молекули, м; $\hbar = h / 2\pi = 6,626 \cdot 10^{-34} / (2 \cdot 3.14) = 1,055 \cdot 10^{-34}$ – стала Планка, Дж·с [5]; $m = m_0 / \sqrt{1 - (V / c)^2}$ – маса (релятивістська) молекули, що рухається, кг; m_0 – маса молекули в стані спокою, кг; ν – власна частота коливання молекули, Гц; c – швидкість світла, м/с.

Вираз (3) справедливий за умови, що V значно менша від швидкості світла c .

З урахуванням вищенаведеного (3) приймає вигляд:

$$V^2 = \hbar \cdot \nu / (2\pi \cdot m). \quad (4)$$

Підставивши останній вираз у (2) отримаємо:

$$\gamma = \hbar \cdot \nu / (\pi^2 \cdot d^2). \quad (5)$$

Вираз (5) підставимо у (1), тоді:

$$\sigma_p = 2\hbar \cdot \nu / (\pi^2 \cdot d^2 \cdot \delta), \quad (6)$$

де $\delta = 2b = 1$ – коефіцієнт, що визначає максимальну відстань між молекулами, при якій руйнуються електромагнітні зв'язки між ними; b – коефіцієнт, що визначає відстань між молекулами у стійкому стані.

Для визначення величини відстані між двома сусідніми взаємодіючими молекулами було використано рівняння Шредінгера, яке дає можливість виразити рух мікрочастинки комплексною функцією координат і часу, названою хвильовою функцією ψ [6]:

$$(-\hbar/(2m) \cdot \Delta^2 \cdot \psi + U \cdot \psi) = i \cdot \hbar(\partial\psi/\partial t), \quad (7)$$

де m – маса частки, кг; i – уявна комплексна одиниця, в.о.; Δ – оператор Лапласа, результат дії якого на деяку функцію являє собою суму других частинних похідних по координатах, в.о.

$$\Delta^2 \cdot \psi = (\partial^2\psi/\partial x^2) + (\partial^2\psi/\partial y^2) + (\partial^2\psi/\partial z^2), \quad (8)$$

де U – функція координат і часу, градієнт якої узятий зі зворотним знаком.

Функція координат і часу визначає силу, що діє на частинку у випадку, коли функція U не залежить явно від часу. Вона відбиває потенціальну енергію частинки. У цьому випадку рівняння Шредінгера розпадається на два множники. Один залежить тільки від координат, іншої – тільки від часу:

$$\psi(x, y, z, t) = (\varphi(x, y, z) \cdot \phi(t)). \quad (9)$$

Перепишемо рівняння (7) з урахуванням (8) і (9), тоді:

$$\hbar i \frac{\partial(\varphi \cdot \phi)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(\varphi \cdot \phi) + U \cdot \varphi \cdot \phi. \quad (10)$$

Диференціюємо рівняння по t і розділимо результат на $\varphi \cdot \phi$.

$$\frac{\hbar \cdot \varphi}{i \cdot \varphi \cdot \phi} \cdot \frac{\partial(\phi)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi \frac{\phi}{\varphi \cdot \phi} - U \frac{\varphi \cdot \phi}{\varphi \cdot \phi},$$

або

$$\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{1}{\phi} \cdot \frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi \frac{1}{\varphi} - U. \quad (11)$$

$$\text{Позначимо } (\hbar/i) \cdot (1/\phi) \cdot (\partial\phi/\partial t) = -W. \quad (12)$$

Перепишемо (11) з урахуванням (12):

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi \frac{1}{\varphi} - U = -W, \quad (13)$$

помноживши (13) на $2m \cdot \varphi / (\hbar^2)$, одержимо:

$$\Delta\varphi + 2m \cdot (W - U) \cdot \varphi / \hbar^2 = 0. \quad (14)$$

При розриві зв'язку потенціальна енергія молекули $U = 0$ з урахуванням цього рівняння (14) приймає вигляд

$$\Delta\varphi + 2m \cdot W \cdot \varphi / \hbar^2 = 0. \quad (15)$$

Позначимо $2m \cdot W \cdot \varphi / \hbar^2 = \beta^2$, тоді (15) запишеться як:

$$\Delta\varphi + \beta^2 \cdot \varphi = 0. \quad (16)$$

За умови розбіжності молекул по осі $x/y = z = 0$ одержимо:

$$\varphi + \beta^2 \cdot \varphi = 0. \quad (17)$$

Оскільки корені характеристичного рівняння диференціального рівняння другого порядку: $k^2 + \beta^2 = 0 \Rightarrow k_{1,2} = \pm\beta i$, то розв'язок рівняння (17) в загальному вигляді:

$$\varphi = \cos \beta \cdot x + i \cdot \sin \beta \cdot x. \quad (18)$$

Щільність імовірності того, що молекула перебуває в даній точці, визначається виразом

$$|\varphi^2| = \varphi \cdot \varphi^*, \quad (19)$$

де φ^* – функція сполучення φ , тобто

$$\varphi^2 = (\cos(\beta x) + \sin(\beta x))^2 = (\cos(\beta x))^2 + (\sin(\beta x))^2 + 2\cos(\beta x)\sin(\beta x) = 1 + \sin(2\beta x). \quad (20)$$

Ймовірність того, що молекула перебуває на деякій ділянці $[-b, b]$, визначається виразом

$$\int_{-b}^b \varphi^2 dx = 1. \quad (21)$$

Підставивши (20) в (21), знаходимо коефіцієнт, що визначає відстань, при якому зв'язок між молекулами руйнується:

$$\begin{aligned} \int_{-b}^b (1 + \sin(2\beta x)) dx &= 1; \\ \left(x - \frac{1}{2\beta} \cos(2\beta x) \right)_{-b}^b &= 1; \\ b - \frac{1}{2\beta} \cos(2\beta b) + b + \frac{1}{2\beta} \cos(-2\beta b) &= 1; \\ \cos(2\beta b) &= \cos(-2\beta b); \quad 2b = 1, \end{aligned} \quad (22)$$

де b – коефіцієнт, що визначає відстань між молекулами породного масиву, які перебувають у стійкому (рівноважному) стані.

Для електромагнітних зв'язків коефіцієнт $\delta = 2b$ є критичним. При його збільшенні зв'язок між молекулами порушується.

З урахуванням цього виразу (6) приймає вигляд

$$\sigma_p = m \cdot v^2 \cdot \hbar^2 / (\pi d_m^2 \cdot m \cdot (mV^2/2) 2b \cdot N), \quad (23)$$

де N – загальне число атомів (іонів) в упакуванні кристалів середовища.

Для перевірки виразу (23) проведено чисельний розрахунок міцності на розрив міжмолекулярних зв'язків. Механізм взаємодії молекул породного масиву при руйнуванні розглянуто на прикладі кристалів кам'яної солі, що входять до складу багатокомпонентних пластових структур. У структурі кам'яної солі великі за розміром аніони Cl мають кубічне упакування, у якому всі октаедричні порожнини (частини простору між щільно упакованими парами аніонів Cl) заселені катіонами Na. При такому упакуванні в 1-му ряді іонів Cl довжиною в 1 м упаковується $n = 1/2 \cdot 82 \text{ E}^{-10} = 3.54 \text{ E}^9$ аніонів Cl [7]. З огляду на симетричність розташування в упакуванні аніонів Cl і катіонів Na кількість катіонів Na у ряді буде такою ж. Кількість рядів на ділянці довжиною 1 м трохи більша, тому що ряди упаковані між собою щільніше, ніж аніони Cl. Лінії між центрами щільно упакованих куль утворюють рівносторонній трикутник з кутами 60° , а суміжний з ними кут дорівнює 60° . Із прямокутного трикутника знайдено прилеглий катет, довжина якого дорівнює відстані між центрами куль у сусідніх рядах: $l = a \cdot \cos 30^\circ = 2,8 \cdot 10^{-10} \cdot \sqrt{3}/2 = 2,44 \cdot 10^{-10}$, м. Кількість рядів на ділянці: $n_p = 1/2,44 \cdot 10^{-10} = 4,1 \cdot 10^9$. Перемноживши кількість рядів на кількість іонів у ряді, отримаємо кількість іонів на площі 1 м^2 :

$$N_{cl} = 3.54 \cdot 10^9 \cdot 4.1 \cdot 10^9 = 1.45 \cdot 10^{19}.$$

Кристалічні грати кам'яної солі симетричні, тому число іонів Cl дорівнює числу іонів Na = $1,45 \text{ E}^{19}$, що відповідає числу молекул NaCl. Тоді загальне число всіх іонів: $N = 2 \cdot 1.45 \cdot 10^{19} = 2.9 \cdot 10^{19}$.

Підставивши кількість молекул в (23) з урахуванням, що $\delta = 2b$, одержимо межу міцності на розрив міжмолекулярного зв'язку двох окремо взятих молекул NaCl:

$$\sigma_p = \frac{v^2 \cdot \hbar^2}{\pi d^2 m V^2 b N} = \frac{(1,43 \cdot 10^{13})^2 (1,055 \cdot 10^{-34})^2}{3,14 \cdot (5,3 \cdot 10^{-13})^2 \cdot 6,65 \cdot 10^{-27} \cdot 6^2 \cdot 1 \cdot 10^{-20} \cdot 2,9 \cdot 10^{19}} = 48,96 \text{ МПа},$$

де $v = 1,43 \cdot 10^{13}$ – власна частота коливань молекули, Гц [5, 7]; $\hbar = 1,0546 \cdot 10^{-34}$ Дж·с = $1,12 \cdot 10^{-34}$ кг/м²/с² – стала Планка [3]; $d = 5,3 \cdot 10^{-13}$ – діаметр іонів натрію, м [5; 7]; $m = 4,003$ а.о. м = $1,66 \cdot 10^{-27} \times 4,003 = 6.65 \cdot 10^{-27}$ – маса молекули NaCl, кг [5]; $V = 6$ – швидкість навантаження породного масиву гідромолотом ГПМ-120, м/с [8]; $b = 1 \cdot 10^{-20}$ – відстань стійкої дії міжмолекулярних зв'язків кам'яної солі, м [5]; $N = 2.9 \cdot 10^{19}$ – загальне число всіх іонів у молекулі NaCl [5].

Руйнування гірських порід обумовлене рухом магістральної тріщини на відкриту поверхню. Накопичення енергії у вершині тріщини відбувається за рахунок стікання енергії джерельцевих тріщин (направлений рух фотонів до вершини тріщини). Зростаюча кількість електромагнітної енергії послабляє (розпушує) зв'язки сусідніх з розділеними молекулами. Не враховувати такого

ослаблення зв'язків при складанні математичних моделей σ_p не можна, оскільки воно істотно впливає на показники міцності порід.

Розрив міжмолекулярних зв'язків у породному масиві досягається при зовнішньому навантаженні гідроімпульсними ударними органами. При цьому власна частота коливань молекул для різних швидкостей навантаження породного масиву прийнята згідно з [6] і наведена в таблиці.

Власна частота коливань молекул для різних швидкостей навантаження зовнішнього середовища

Гідроімпульсна ударна система	Швидкість навантаження вибою, м/с	Власна частота коливань молекули при розриві міжмолекулярних зв'язків, 1/с	Межа міцності розриву міжмолекулярних зв'язків, МПа
ГПМ-120	6	$1,43E^{13}$	48,6
ГПМ-300	7	$2,21E^{13}$	85,91
ГПМ-300	8	$2,92E^{13}$	114,83
СП-72	10	$4,65E^{13}$	186,36

Підставимо вихідні дані в (23) і отримаємо:

$$\sigma_p = \frac{6,65 \cdot 10^{-27} \cdot (1,12 \cdot 10^{-34})^2}{3,14 \cdot (3 \cdot 10^{-13})^2 \cdot ((6,65 \cdot 10^{-27})^2 / 2)} \cdot \frac{v^2}{V^2} = 1,334 \cdot 10^{-17} \frac{v^2}{V^2} \quad (24)$$

Значення маси і діаметр молекули, а також фізичні та математичні сталі прийняті незмінними для конкретних умов [5]:

$$V_{120} = 6 \text{ м/с}, \quad \sigma_p = 1,334 \cdot 10^{-17} \cdot (1,43 \cdot 10^{13})^2 / 6^2 = 48,96 \cdot 10^6, \text{ Па};$$

$$V_{300} = 7 \text{ м/с}, \quad \sigma_p = 1,334 \cdot 10^{-17} \cdot (2,21 \cdot 10^{13})^2 / 7^2 = 85,91 \cdot 10^6, \text{ Па};$$

$$V_{300} = 8 \text{ м/с}, \quad \sigma_p = 1,334 \cdot 10^{-17} \cdot (2,92 \cdot 10^{13})^2 / 8^2 = 114,83 \cdot 10^6, \text{ Па};$$

$$V_{120} = 10 \text{ м/с}, \quad \sigma_p = 1,334 \cdot 10^{-17} \cdot (4,65 \cdot 10^{13})^2 / 10^2 = 186,36 \cdot 10^6, \text{ Па}.$$

Висновки та практичні рекомендації

1. Проведений розрахунок показує достатню схожість експериментальної та аналітичної оцінки межі міцності на розрив міжмолекулярних зв'язків для основних порід.

2. Для руйнування пористого вапняку з межею міцності на стиснення (20...50) МПа рекомендується використовувати гідромолот ГПМ-120, що випускається АТ «Борекс», при швидкості навантаження масиву 6 м/с. Для руйнування пісковика з межею міцності на стиснення (70...90) МПа рекомендується використовувати гідромолот ГПМ-120 (ПО «Борекс») або ГПМ-300 (АТ «АТЭК») при швидкості навантаження масиву зі швидкістю 7 м/с. Для руйнування щільного вапняку з межею міцності на стискання (100...150) МПа

рекомендується використовувати гідромолот, що випускається АТ «Борекс», при швидкості навантаження масиву 8 м/с. Для руйнування гранітів з межею міцності на стискання (120...260) МПа перевагу треба віддавати потужнішим гідромолотам, енергія одиничного удару яких перевищує 3000 Дж, наприклад СП-72 виробництва Воронежського екскаваторного заводу, при швидкості навантаження породного масиву від 9,0 до 10,0 м/с.

1. *Насонов И. Д.* Моделирование горных процессов / Насонов И. Д. – М.: Машиностроение, 1998. – 361 с.
2. *Максимей И. В.* Математическое моделирование больших систем / Максимей И. В. – М.: Машиностроение, 1995. – 119 с.
3. *Петров А. А.* Принципы построения моделей / Петров А. А. – М.: Наука, 2001. – 191 с.
4. *Калинин О. П.* Математические методы оптимизации и управления в системах: Справочное пособие / Калинин О. П. – М.: Наука, 1999. – 559 с.
5. *Спиридонов О. П.* Фундаментальные физические постоянные / Спиридонов О. П. – М.: Высшая школа, 2001. – 238 с.
6. *Вихман Э.* Квантовая механика / Вихман Э. [Пер. с англ. А. Казарина]. – М.: Наука, 1996. – 390 с.
7. *Пилипенко Н. И.* Справочник по элементарной химии / Пилипенко Н. И. – М.: Наука, 1995. – 296 с.
8. *Экскаватор одноковшовый универсальный гусеничный гидравлический ЭО-4321/Формуляр 4121-00.00.000ФС.* Формуляр. – К.: ТКЄ 1988. – 104 с.