

Решение задачи теплопроводности в виде (11) для одномерных и двухмерных нестационарных температурных полей от эндогенного пожара по сравнению с решением задачи термоупругости значительно проще при рассмотрении конкретных задач управления, исходя из того, что теплофизические параметры горных пород во многих случаях являются известными или определяются исследованиями в лабораторных условиях.

Таким образом, с помощью известных теплофизических параметров можно решить задачи управления термоупругими напряжениями и перемещениями в деформируемом массиве горных пород при эндогенном пожаре и предотвратить опасность подземного пожара.

1. Боли Б., Уэйнер Дж. Теория температурных напряжений. – М.: Мир, 1964. – 517 с.
2. Коваленко А. Д. Основы термоупругости. – Киев.: Наук. думка, 1970. – 307 с.
3. Hand E. I., Arora I. S. Applied Optimal Design: Mechanical and Structural systems. – N.Y.: Wiley, 1979. – 506 p.
4. Mangeron D., Poterasu V. F., Vulpe A. Teoria optimizarii structurilor cu aplicatii. – Jasi: Tunimea, 1980. – 204 p.
5. Rozvany G. I. N. Optimal Design of Flexural Systems. – Oxford: Pergamon press, 1976. – 297 p.
6. Владимиров В. С. Обобщенные функции в математической физике. – М.: Наука, 1976. – 280 с.

УДК 622.231

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАЗРУШЕНИЯ СКАЛЬНОЙ ПОРОДЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ

А. И. Крючков, канд. техн. наук (НТУУ "КПИ")

Розглянуто квантово-механічний підхід до моделювання процесу руйнування гірської породи, що базується на рівнянні Шредінгера та методі ефективної маси.

Скальная порода представляет собой более или менее упорядоченную смесь кристаллов отдельных минералов. Простейшей пространственной моделью такой породы является кристаллическая решетка твердого тела со средним расстоянием между атомами в узлах решетки 3...5 Å.

При приложении к горному массиву внешней нагрузки внутри массива образуются пространственные зоны уплотнения и разрежения вещества, которые по-разному взаимодействуют с фононами.

Для описания поведения внешних электронов (орбиталей) атомов в узлах решеток необходимо использовать методы квантовой механики для твердых тел. Для описания поведения отдельных атомов, групп атомов и тела в целом при внешних нагрузках в квантовой механике используется понятие волновой функции.

Волновая функция $\psi(\vec{r})$ свободного электрона, движущегося в поле с потенциалом $V(\vec{r}) = \text{const}$, описывает плоскую монохроматическую волну

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (1)$$

где \vec{k} – волновой вектор $\left(|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$; λ – длина волны де Бройля [1, 2].

При этом импульс свободного электрона пропорционален волновому вектору

$$\vec{p} = m\vec{V} = \hbar\vec{k}, \quad (2)$$

а кинетическая энергия квадратично связана с импульсом

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (3)$$

где m – масса свободного электрона; \hbar – постоянная Планка.

Спектр \vec{k} -векторов непрерывен, а энергия свободного электрона не квантуется и может принимать любые значения.

Масса ионов, расположенных в узлах решетки кристалла, намного больше массы электронов, поэтому в основу теории твердого тела положено адиабатическое приближение. В соответствии с этим приближением считается, что валентные электроны движутся в эффективном потенциальном поле $U(\vec{r})$, образованном периодической последовательностью тяжелых ионов и удовлетворяющем условию трансляционной симметрии.

Электронные волновые функции кристалла $\psi_k(\vec{r})$ удовлетворяют уравнению Шредингера с периодическим потенциалом [2]:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Это уравнение сводится к известному уравнению Хилла, а для гармонического потенциала – к уравнению Матье. Решением их являются функции, которые в квантовой механике называют функциями Блоха

$$\psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (4)$$

и представляют собой плоские волны типа (1), но с амплитудами, промодулированными с периодом решетки.

Особенность поведения валентных электронов в твердом теле заключается в том, что при некоторых значениях импульса электрона в результате его взаимодействия с периодической структурой решетки наблюдается интерференция электронных волн. Это объясняется тем, что когда начальная волна, распространяющаяся в периодической решетке кристалла, проходит через систему потенциальных барьеров, расположенных на одинаковом расстоянии a друг от друга, она испытывает частичное отражение на каждом из этих барьеров. В общем случае отраженные волны не согласованы по фазе и в результате их наложения не возникает отраженной волны с заметной амплитудой. Однако, если разность хода двух соседних отраженных волн $2a$ оказывается равной целому числу длин волн начальной волны

$$2a = n\lambda, \quad (5)$$

то волны оказываются в фазе и при значениях волнового числа

$$k = \pm \left(\frac{\pi}{a}\right), \pm \left(\frac{2\pi}{a}\right), \dots, \pm \left(\frac{n\pi}{a}\right), \dots \quad (6)$$

происходит полное отражение электронных волн, препятствующее движению электронов. При этом в сплошном энергетическом спектре возникают разрывы и образуются энергетические щели. Следовательно, энергетическая кривая $E(k)$ для электрона в периодическом поле кристалла изображается участками разорванной параболы с искривленными концами (рисунок, а).

Для свободного электрона второй закон Ньютона можно записать в виде

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{m} F, \quad (7)$$

где F – сила, действующая на электрон; v – скорость.

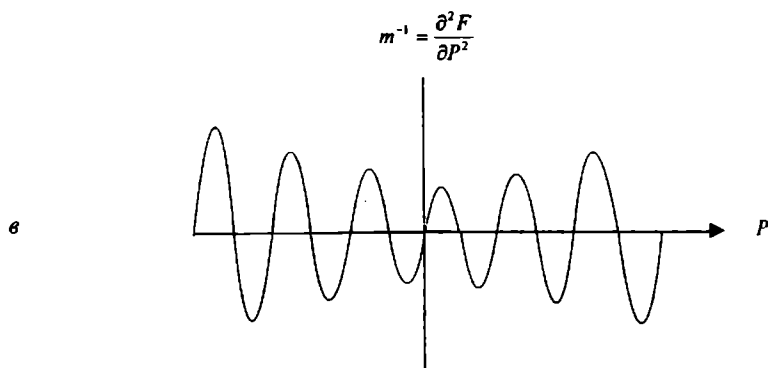
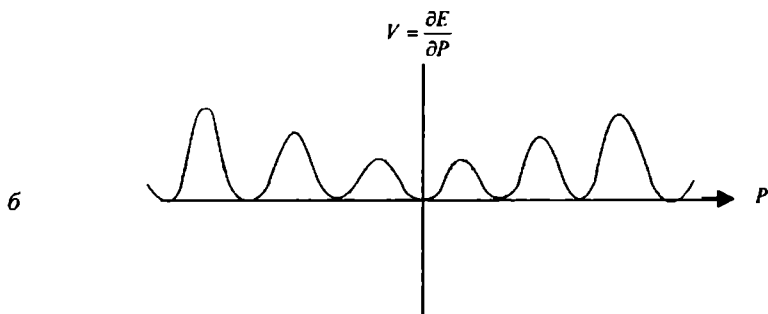
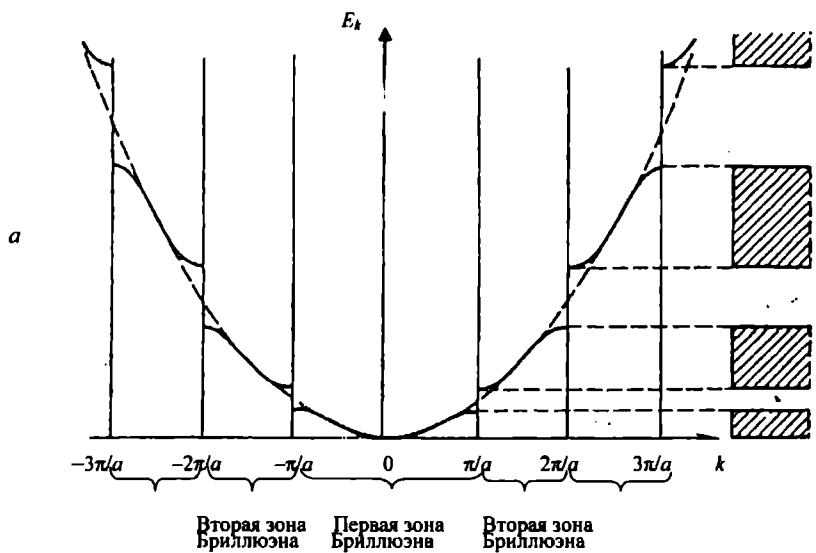
Найдем аналогичное соотношение для валентного электрона в периодическом поле кристалла с учетом волновых свойств электрона.

В этом случае скорость v – это групповая скорость волнового пакета, определяемая из выражения (рисунок, б).

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{dE}{\hbar dk}. \quad (8)$$

С другой стороны

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\hbar dk}{dt} = F, \quad (9)$$



Энергетическая диаграмма (а) и параметры электронов кристаллической решетки (б, в)

$$dt = \frac{\hbar dk}{F}. \quad (10)$$

Тогда

$$\frac{dv}{dt} = \frac{d^2 E}{\hbar \partial k \partial t}, \quad (11)$$

или после подстановки (10) окончательно получим

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F. \quad (12)$$

Сравнение выражений (7) и (12) показывает, что электрон в кристалле можно рассматривать как свободный, если ему приписать эффективную массу m^* , определяемую формулой

$$m^* = \hbar^2 \left/ \frac{d^2 E}{dk^2} \right. . \quad (13)$$

Следовательно, эффективная масса электрона определяется отклонением кривизны энергетической кривой $E(k)$ от кривизны параболы. В середине разрешенных зон кривизна обеих кривых совпадает, то есть периодическое поле решетки не оказывает существенного влияния на валентные электроны и $m^* = m$. Наибольшие различия между массами наблюдаются вблизи дна и потолка для каждой зоны, то есть вблизи области возникновения энергетических разрывов вследствие отражения электронных волн. Знак кривизны энергетических характеристик для состояний электрона вблизи нижней границы (min) положителен, тогда как для верхней границы (max) знак кривизны меняется. Это значит, что эффективная масса становится отрицательной, то есть электрон вблизи максимума энергетической зоны ведет себя как положительно заряженная частица (рисунок, в) [3].

Для любой из энергетических зон выражение для энергии может быть записано в виде

$$E(\vec{P}) = E_0 + \frac{1}{2m^*} (\vec{P} - \vec{P}_0)^2, \quad (14)$$

что по форме подобно выражению для свободной частицы, но с эффективной массой m^* .

В общем случае эффективная масса может быть представлена тензором второго ранга

$$\frac{1}{m^*} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ m_{xx} & m_{xy} & m_{xz} \\ 1 & 1 & 1 \\ m_{yx} & m_{yy} & m_{yz} \\ 1 & 1 & 1 \\ m_{zx} & m_{zy} & m_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial P_x \partial P_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial P_x \partial P_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial P_x \partial P_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial P_y \partial P_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial P_y \partial P_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial P_y \partial P_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial P_z \partial P_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial P_z \partial P_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial P_z \partial P_z} \end{bmatrix}. \quad (15)$$

Для случая, когда внешнее воздействие формирует в кристаллической горной породе внешнее поле $V(\vec{r})$, уравнение Шредингера может быть записано в виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}). \quad (16)$$

Чтобы решить это уравнение прямыми методами, необходимо знать поле $U(\vec{r})$, которое для реальных горных пород, как правило, неизвестно. Поэтому рассмотрим вновь уравнение Шредингера для идеального кристалла (3), решением которого является функция Блоха (4). Энергия электрона в окрестности экстремума \vec{k}_0 является квадратичной функцией волнового вектора (квазимпульса):

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2. \quad (17)$$

Если рассматривать гамильтониан свободной частицы, масса которой совпадает с эффективной массой электрона

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta, \quad (18)$$

то методами квантовой механики [4] можно доказать, что гамильтонианы в выражениях (3) и (18) имеют одинаковые спектры энергии. Таким образом, движение электрона в кристалле сходно с движением свободной частицы. Различие между действительно свободной частицей и частицей в кристалле заключается в различии масс: вместо массы свободной частицы m необходимо использовать эффективную массу m^* (15).

В этом случае при наложении внешних полей $V(\vec{r})$ исходное уравнение Шредингера (16) может быть записано в виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}). \quad (19)$$

Метод решения задач на основе уравнений типа (19) получил название метода эффективной массы. Его преимущество по сравнению с методом решения уравнения (16) заключается в том, что вместо неизвестного поля решетки $U(\vec{r})$ используют экспериментально определенную эффективную массу m^* частицы.

Выводы

1. Метод эффективной массы наиболее применим для состояний электрона с энергией, близкой к экстремальному значению при наложении на кристалл внешних полей $V(\vec{r})$. Этот метод позволяет исключить из уравнения (16) неизвестную величину $U(\vec{r})$ введением экспериментально измеримой величины эффективной массы m^* .

2. Понятие эффективной массы m^* в общем случае определяется как тензор через вторую производную от энергии по квазиимпульсу (13).

3. В окрестности экстремума \vec{P}_0 энергия является квадратичной функцией от \vec{P} , поэтому вблизи минимума энергии компоненты массы $m^* > 0$, а вблизи максимума $m^* < 0$.

4. Средняя в квантово-механическом смысле скорость электрона в поле кристалла определяется как $v = \frac{dE}{d\vec{p}} = \frac{\vec{P} - \vec{P}_0}{m^*}$.

5. Средний импульс электрона \vec{p} связан с квазиимпульсом \vec{P} соотношением $\vec{p} = m/m^* (\vec{P} - \vec{P}_0)$.

6. Электрон в кристалле испытывает ускорение только под действием внешней силы $F_a = -\nabla V(\vec{r})$, а внутренние силы F_i поля решетки $U(\vec{r})$ действуют на движущийся электрон только через изменение эффективной массы m^* .

7. Для описания движения электрона в кристалле, на который наложено внешнее поле $V(\vec{r})$, используют уравнение Шредингера (19), в которое переходит уравнение (16) при замене оператора периодического поля оператором свободной частицы с массой, равной эффективной массе электрона в кристалле (13).

8. При наложении на кристалл внешнего поля $V(\vec{r})$ и действии на электрон внешней силы \vec{F}_a квазиимпульс электрона меняется:

$$\vec{P}(t) = \vec{P}(0) + \int_0^t \vec{F}_a(t) dt.$$

Это приводит к переходу электрона с одного энергетического уровня на другой, изменению перекрытия электронных орбиталей и к разрушению связи между соседними атомами. Такой процесс и является элементарным актом разрушения твердого тела.

1. *Рунов Н. Н.* Строение атомов и молекул. – М.: Просвещение, 1987. – 143 с.
2. *Анималу А.* Квантовая теория кристаллических твердых тел. – М.: Мир, 1981. – 574 с.
3. *Косевич А. М.* Теория кристаллической решетки (Физическая механика кристаллов). – Харьков: Вища школа, 1988. – 304 с.
4. *Киреев П. С.* Физика полупроводников. – М.: Высшая школа, 1969. – 590 с.