

2. Астахов, А.Г. Справочник агломератчика [Текст] / А.Г. Астахов, В.И. Мачковский, А.И. Никитин, Н.В. Федоровский. – Киев: Техніка, 1964.
3. Вегман, Е.Ф. Процесс агломерации [Текст] / Е.Ф. Вегман. – М.: Metallurgy, 1963.
4. Сигов, А.А. О роли регенерации тепла и зажигания в агломерационном процессе [Текст] / А.А. Сигов // Известия вузов. Черная металлургия. – №2. - 1959.
5. Ростовцев, С.Т. Зажигание в процессе спекания Криворожских железных руд [Текст] / С.Т. Ростовцев, С.М. Мееров // Теория и практика металлургии. – №3 (79), 1936.
6. Кучер, В.Г. Способ спекания агломерационной шихты СССР, [Текст] / В.Г. Кучер, Ю.С. Рудь // Авторское свидетельство №258328. – М., 1966.
7. Кучер, В.Г. Способ спекания агломерационной шихты СССР, [Текст] / В.Г. Кучер, Ю.С. Рудь // Авторское свидетельство №336345. – М., 1970.
8. Рудь, Ю.С. Способ спекания агломерационной шихты СССР, [Текст] / Ю.С. Рудь, В.Г. Кучер, А.З. Крижевский, Е.Я. Стольберг // Авторское свидетельство СССР, №948208. – М., 1970.

Рукопись поступила в редакцию 19.03.14  
УДК 552.12:622

Ю.С. РУДЬ, д-р техн. наук, проф., И.С. РАДЧЕНКО, канд. физ.-мат. наук, доц.,  
В.Ю. БЕЛОНОЖКО, ст. преподаватель, С.Ю. ОЛЕЙНИК, преподаватель  
Криворожский национальный университет

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГОРНЫХ ПОРОД НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ ВЕЩЕСТВА

Эффективность бурения горных пород пневматическими перфораторами зависит от их физико-механических свойств: прочности, пористости, твердости, абразивности.

Проблеме исследования физико-механических свойств горных пород посвящены работы Ржевского В.В., Новика Г.Я., Барона Л.И., Глатмана Л.Б. и других ученых. В их работах рассмотрен комплекс вопросов о физических свойствах горных пород и физических явлениях, происходящих в них при воздействии различных полей. Однако в этих работах не ставилась задача определения физико-механических свойств горных пород на основе предыдущих теоретических исследований. В работе поставлена задача разработать метод определения физико-механических свойств горных пород на основе модели кристаллического строения вещества.

Определены постоянные упругой жесткости, объемного модуля упругости и сжимаемости кристаллов. Принято во внимание, что реальные кристаллы горной породы состоят из дискретных частиц – атомов. Для случая исследования упругих свойств кристаллов породы их можно считать однородной непрерывной средой. Данное приближение в физике твердого тела называют континуальным приближением. В таком приближении используется закон Гука и второй закон Ньютона. Вычисление предела прочности кристалла.

Определена величина сил связи в ионных кристаллах. Порядок величины сил связи можно найти, исходя из предположения, что ионы взаимодействуют согласно закону Кулона.

**Ключевые слова:** горная порода, физико-механические свойства, модель кристалла, упругая жесткость, объемный модуль упругости, объемный модуль сжимаемости.

**Проблема и ее связь с научными и практическими задачами.** Физико-механические свойства горных пород, как твердого тела, непосредственно связаны с их структурой, молекулярными силами сцепления. Структура породы характеризуется распределением зерен и цемента кристаллов по размерам, условиям их срастания и взаимного расположения. Эффективность бурения горных пород пневматическими перфораторами зависит от их физико-механических свойств - способности породы сопротивляться внешней нагрузке; пористости - наличия в породе пространства, не заполненного твердым веществом; твердости - способности горной породы сопротивляться проникновению в нее другого более жесткого твердого тела; абразивности - способности породы изнашивать разрушающий ее инструмент в процессе трения.

**Анализ литературных данных и постановка проблемы.** Проблеме исследования физико-механических свойств горных пород посвящено ряд исследований. В работе [1] рассмотрен комплекс вопросов о физических свойствах горных пород и физических явлениях, происходящих в них. Дана классификация физических свойств пород, методов их определения и основных факторов, обуславливающих эти свойства. В работе [2] горные породы подразделяют по видам деформаций и вызвавшими их напряжениями на: упругие - их основные показатели модуль Юнга, коэффициент Пуассона и др., пластические - их основные показатели модуль полной деформации, коэффициент пластичности и др., прочностные - их основные показатели пределы прочности при сжатии, растяжении и др. Важными являются горнотехнологические параметры горных пород такие как крепость, твердость, буримость, взрываемость, дробимость.

В [3] рассматриваются методы и средства контроля состояния и свойств горных пород в массиве, прежде всего - твердости. В горном деле применяют показатель твердости, определяемый по методу Л.А. Шрейнера путем выкола лунки в шлифованной поверхности породы под действием нагрузки, приложенной к штампу с плоским круглым основанием. Аналогичным путем определяют контактную прочность по методу Л.И. Барона и Л.Б. Глатмана. Показатели твердости используют при оптимизации режимов эксплуатации породоразрушающих органов, обосновании нормативов производительности различных конструкций инструментов и т.п.

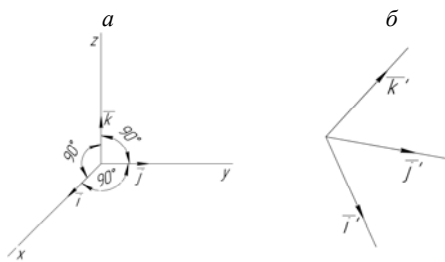
**Цель и задачи исследования.** В работе поставлена задача определения физико-механических свойств горных пород на основе модели кристаллического строения вещества. Планируется определить теоретическим путем постоянные упругой жесткости, объемный модуль упругости, сжимаемость кристаллов горной породы и энергию связи.

**Изложение материала и результаты.** *Определение постоянных упругой жесткости, объемного модуля упругости и сжимаемости кристаллов.* Реальные кристаллы горной породы состоят из дискретных частиц - атомов. Для случая исследования упругих свойств кристаллов породы их можно считать однородной непрерывной средой. Данное приближение в физике твердого тела называют континуальным приближением. В таком приближении используется закон Гука и второй закон Ньютона.

Обозначим через  $e_{xx}, e_{yy}, e_{zz}, e_{xy}, e_{xz}, e_{yz}$  компоненты тензора деформаций. Поместим в недеформированный кристалл ортогональную систему координат  $x, y, z$ , с единичными векторами  $\bar{i}, \bar{j}, \bar{k}$  (рис. 1). Создадим малую однородную деформацию, в результате которой все элементарные ячейки кристалла деформируются одинаково.

Предположим, что в результате такой малой деформации тройка векторов  $\bar{i}, \bar{j}, \bar{k}$  изменила свою ориентацию. Обозначим новую тройку векторов через  $\bar{i}', \bar{j}', \bar{k}'$ . «Новые» вектора связанные со «старыми» следующими соотношениями

**Рис. 1.** Координатные оси для описания упруго деформированного кристалла: *a* - недеформированное состояние. Единичные векторы  $\bar{i}, \bar{j}, \bar{k}$  взаимно перпендикулярны; *b* - деформированное состояние. Единичные векторы  $\bar{i}', \bar{j}', \bar{k}'$  занимают произвольное положение



$$\left. \begin{aligned} \bar{i}' &= (1 + \varepsilon_{xx}) \cdot \bar{i} + \varepsilon_{xy} \cdot \bar{j} + \varepsilon_{xz} \cdot \bar{k}, \\ \bar{j}' &= \varepsilon_{yx} \cdot \bar{i} + (1 + \varepsilon_{yy}) \cdot \bar{j} + \varepsilon_{yz} \cdot \bar{k}, \\ \bar{k}' &= \varepsilon_{zx} \cdot \bar{i} + \varepsilon_{zy} \cdot \bar{j} + (1 + \varepsilon_{zz}) \cdot \bar{k}. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

В равенствах (1) коэффициенты  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  характеризуют деформацию. Они не имеют размерности и при малых деформациях их величина много меньше единицы. Вектор смещения частицы кристалла определяется равенством

$$\bar{R} = \bar{r}' - \bar{r} = x \cdot (\bar{i}' - \bar{i}) + y \cdot (\bar{j}' - \bar{j}) + z \cdot (\bar{k}' - \bar{k}). \quad (2)$$

Выражение для вектора смещения можно записать в более общем виде

$$\bar{R} = u(\bar{r}) \cdot \bar{i} + v(\bar{r}) \cdot \bar{j} + w(\bar{r}) \cdot \bar{k}. \quad (3)$$

В случае неоднородной деформации величины  $u, v, w$  обозначают локальные деформации. Используя разложение функции  $\bar{R}$  в ряд Тейлора, получим

$$x = x \frac{\partial u}{\partial x}, \quad y \cdot \varepsilon_{yx} = y \frac{\partial u}{\partial y} \text{ и т.д.} \quad (4)$$

Обозначим независимые компоненты напряжения через показатели  $X_x, Y_y, Z_z, Y_z, Z_x, Z_y$ . Согласно закону Гука деформации пропорциональны напряжениям, т.е. компоненты деформаций являются линейными функциями компонент напряжений

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= S_{11} \cdot X_x + S_{12} \cdot Y_y + S_{13} \cdot Z_z + S_{14} \cdot Y_z + S_{15} \cdot Z_x + S_{16} \cdot X_y, \\ \varepsilon_{yy} &= S_{21} \cdot X_x + S_{22} \cdot Y_y + S_{23} \cdot Z_z + S_{24} \cdot Y_z + S_{25} \cdot Z_x + S_{26} \cdot X_y, \\ \varepsilon_{zz} &= S_{31} \cdot X_x + S_{32} \cdot Y_y + S_{33} \cdot Z_z + S_{34} \cdot Y_z + S_{35} \cdot Z_x + S_{36} \cdot X_y, \\ \varepsilon_{yz} &= S_{41} \cdot X_x + S_{42} \cdot Y_y + S_{43} \cdot Z_z + S_{44} \cdot Y_z + S_{45} \cdot Z_x + S_{46} \cdot X_y, \\ \varepsilon_{zx} &= S_{51} \cdot X_x + S_{52} \cdot Y_y + S_{53} \cdot Z_z + S_{54} \cdot Y_z + S_{55} \cdot Z_x + S_{56} \cdot X_y, \\ \varepsilon_{xy} &= S_{61} \cdot X_x + S_{62} \cdot Y_y + S_{63} \cdot Z_z + S_{64} \cdot Y_z + S_{65} \cdot Z_x + S_{66} \cdot X_y. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

С другой стороны, компоненты напряжений являются линейными функциями компонент деформаций

$$\left. \begin{aligned} X_x &= C_{11} \cdot \varepsilon_{xx} + C_{12} \cdot \varepsilon_{yy} + C_{13} \cdot \varepsilon_{zz} + C_{14} \cdot \varepsilon_{yz} + C_{15} \cdot \varepsilon_{zx} + C_{16} \cdot \varepsilon_{xy}, \\ Y_y &= C_{21} \cdot \varepsilon_{xx} + C_{22} \cdot \varepsilon_{yy} + C_{23} \cdot \varepsilon_{zz} + C_{24} \cdot \varepsilon_{yz} + C_{25} \cdot \varepsilon_{zx} + C_{26} \cdot \varepsilon_{xy}, \\ Z_z &= C_{31} \cdot \varepsilon_{xx} + C_{32} \cdot \varepsilon_{yy} + C_{33} \cdot \varepsilon_{zz} + C_{34} \cdot \varepsilon_{yz} + C_{35} \cdot \varepsilon_{zx} + C_{36} \cdot \varepsilon_{xy}, \\ Y_z &= C_{41} \cdot \varepsilon_{xx} + C_{42} \cdot \varepsilon_{yy} + C_{43} \cdot \varepsilon_{zz} + C_{44} \cdot \varepsilon_{yz} + C_{45} \cdot \varepsilon_{zx} + C_{46} \cdot \varepsilon_{xy}, \\ Z_x &= C_{51} \cdot \varepsilon_{xx} + C_{52} \cdot \varepsilon_{yy} + C_{53} \cdot \varepsilon_{zz} + C_{54} \cdot \varepsilon_{yz} + C_{55} \cdot \varepsilon_{zx} + C_{56} \cdot \varepsilon_{xy}, \\ X_y &= C_{61} \cdot \varepsilon_{xx} + C_{62} \cdot \varepsilon_{yy} + C_{63} \cdot \varepsilon_{zz} + C_{64} \cdot \varepsilon_{yz} + C_{65} \cdot \varepsilon_{zx} + C_{66} \cdot \varepsilon_{xy}. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Величины  $S_{11}, S_{12}, \dots$  называются постоянными упругой податливости или упругими постоянными; величины  $C_{11}, C_{12}, \dots$  называются постоянными упругой жесткости или модулями упругости [4].

Зная постоянные упругой жесткости, можно определить плотность энергии.

Например, для кубического кристалла плотность энергии равна [4]  $u = (C_{11} + 2C_{12}) \cdot \delta^2 / 6$ .

В кристаллах горных пород наблюдается ионная связь между положительными и отрицательными ионами.

Кулоновское отталкивание ионов одного знака меньше кулоновского притяжения ионов противоположного знака. Структура наиболее характерного ионного кристалла - хлористого натрия показана на рисунках 2,3.

Пространственной решеткой хлористого натрия является гранецентрированная кубическая решетка - решетка Браве.



Рис. 2. Кристаллическая структура хлористого натрия

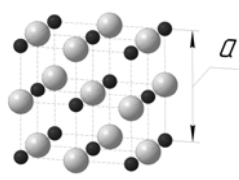


Рис. 3. Модель структуры хлористого натрия

Из рис. 4 можно судить о некоторых особенностях сил межатомного взаимодействия, а именно:

1. Между атомами одновременно действуют силы притяжения и силы отталкивания. Сумма этих сил определяет результирующую силу межатомного взаимодействия.

2. При уменьшении расстояния между атомами силы отталкивания нарастают значительно быстрее, чем силы притяжения.

Существует некоторое расстояние  $r_0$ , при котором силы притяжения и силы отталкивания уравниваются. Результирующая сила межатомного взаимодействия становится равной нулю. В кристалле, который представлен самому себе, ионы располагаются именно на расстоянии  $r_0$  друг от друга. Если расстояние между атомами меньше равновесного  $r < r_0$ , то преобладают силы отталкивания, если  $r > r_0$ , то преобладают силы притяжения.

Эти свойства межатомных сил позволяют в первом приближении рассматривать частицы, которые образуют кристалл, например, ионы Na и Cl в кристалле поваренной соли, как твердые упругие шарики, которые взаимодействуют между собой. В этом случае деформация растяжения кристалла приводит к увеличению расстояния между центрами соседних шариков и преобладанию сил притяжения, а деформация сжатия - к уменьшению этого расстояния и преобладанию сил отталкивания.

*Вычисление предела прочности кристалла.* При растяжении образца предел прочности определяется максимальной величиной результирующей силы межатомного притяжения, приходящегося на единицу площади сечения, перпендикулярного направлению растяжения.

Обозначим через  $r_1$  расстояние между центрами атомов, при котором результирующая сила

Оценим величину силы единичной межатомной связи, которая в ионных кристаллах определяется силой взаимодействия между двумя ионами.

На рис. 4 показана зависимость сил межатомного взаимодействия от расстояния между центрами атомов в твердых телах [5].

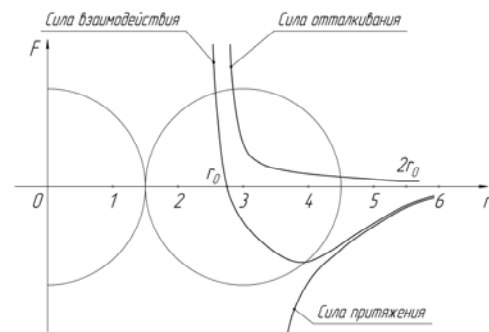


Рис. 4. Зависимость сил межатомного взаимодействия от расстояния между центрами атомов

межатомного взаимодействия достигает максимального значения (см. рис. 4). При дальнейшем увеличении расстояния между атомами, силы взаимодействия становятся настолько малыми, что связи между атомами обрываются. Величину наибольшей силы притяжения между двумя атомами обозначим через  $F_{\max}$ , а число связей на единицу площади сечения, перпендикулярного направлению внешней силы, - через  $N_{\text{св}}$ . Тогда предел прочности кристалла будет определяться равенством

$$\sigma = F_{\max} \cdot N_{\text{св}} \quad (7)$$

Согласно рис. 2 и 3 кристалл поваренной соли состоит из ионов натрия Na, заряженных положительно, и ионов хлора Cl, заряженных отрицательно. У каждого иона шесть ближайших соседей с противоположным знаком заряда. При разрыве такого кристалла у каждого атома обрывается по одной связи. Следовательно, в рассматриваемой модели число связей, разрываемых на каждом квадратном сантиметре, равно числу атомов, приходящихся на эту площадь, т.е.  $N_{\text{св}} = N_{\text{ат}}$ . В первом приближении пренебрежем взаимодействием между ионами, которые находятся друг от друга на расстояниях, больших  $r_0$ . Остальные ионы удалены на расстояния не меньше, чем  $r_0 \cdot \sqrt{2}$ . Их взаимодействие незначительно. Для оценки предела прочности  $\sigma$  достаточно умножить наибольшее значение силы взаимодействия между двумя атомами на число атомов, которые приходятся на единицу площади в плоскости разрыва

$$\sigma = F_{\max} \cdot N_{\text{ат}} \quad (8)$$

*Определение величины сил связи.* Величину сил связи в ионных кристаллах можно найти, исходя из предположения, что ионы взаимодействуют согласно закону Кулона. В модели кристалла NaCl наблюдается чередование ионов противоположных знаков. Равновесное расстояние между ними равно при  $r_0 = 2,814 \text{ \AA} = 2,814 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ , т.е.  $r \approx 3,0 \text{ \AA}$  ( $1 \text{ \AA} = 1 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ ). В первом приближении можно считать, что деформация остается упругой вплоть до разрыва межатомной связи, что соответствует напряжению, равному пределу прочности.

Предположим, что коэффициент относительной деформации  $\varepsilon_{\max} = 1/6 \approx 17\%$ , чему соответствует смещение атомов от положения равновесия на расстояние  $\Delta r = \varepsilon_{\max} \cdot r_0 = 1/6 \cdot 3 \text{ \AA} = 0,5 \text{ \AA}$ . Следовательно, при расчете сил межатомного притяжения для рассматриваемого кристалла за расстояние между ионами необходимо брать величину  $r = r_0 + \Delta r = 3 \text{ \AA} + 0,5 \text{ \AA} = 3,5 \text{ \AA} = 3,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ .

Для простоты дальнейших расчетов предположим, что заряд каждого иона равен заряду электрона  $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ К}$ . При этом максимальная сила притяжения  $F_{\max}$  между двумя атомами (ионами) будет равна

$$F_{\max} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}, \quad (9)$$

где  $\varepsilon_0 = 1 \cdot 10^7 / 4\pi c^2 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}$  – электрическая постоянная,  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}$  – скорость света в вакууме.

Подставим численные значения коэффициентов в формулу (10) и получим

$$F_{\max} = 9 \cdot 10^9 \cdot \frac{(1,6 \cdot 10^{-19})^2}{(3,5 \cdot 10^{-10})^2} \approx 2 \cdot 10^{-9} \text{ Н}. \quad (10)$$

Полученное значение  $F_{\max}$  определяет величину максимальной силы взаимодействия между двумя атомами кристалла NaCl.

Далее оценим примерное число атомов, которые находятся на единице поверхности разрыва кристалла NaCl. Можно считать, что диаметр иона равен приблизительно расстоянию между соседними ионами.

Как указано выше, это расстояние можно считать равным  $r_0 = 3 \text{ \AA} = 3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ . В таком случае число атомов на каждом квадратном метре поверхности разрыва кристалла равно

$$N_{\text{ат}} \approx \frac{1}{(3 \cdot 10^{-10})^2} = 1,1 \cdot 10^{19} \approx 10^{19} \text{ 1/м}^2. \quad (11)$$

В нашей модели кристалла число связей, которые приходятся на единицу площади, равно

числу атомов ( $N_{ce} = N_{am}$ ), следовательно  $N_{ce} \approx 10^{19} \text{ 1/м}^2$ .

Зная величину максимальной силы взаимодействия между ионами  $F_{\max}$  (см. (10)) и число атомов на каждом квадратном метре поверхности разрыва кристалла  $N_{am}$  (см. (11)), по формуле (8) можно оценить теоретическую величину предела прочности кристалла NaCl

$$\sigma = 2 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2. \quad (12)$$

При известных значениях единичной межатомной связи и, следовательно, предела прочности кристалла, можно оценить величину модуля упругости.

Согласно закону Гука в пределах упругой деформации напряжение  $\sigma$  пропорционально коэффициенту относительной деформации при растяжении  $\varepsilon$ .

Коэффициент пропорциональности между величиной деформации  $\varepsilon$  и напряжением  $\sigma$  равен модулю упругости  $E$ . Следовательно,

$$\sigma = E \cdot \varepsilon; E = \sigma / \varepsilon. \quad (13)$$

Подставим в формулу (4) вычисленные ранее значения величин  $\sigma$  и  $\varepsilon$  и получим

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{2 \cdot 10^{10}}{1/6} \approx 1 \cdot 10^{11} \text{ Н/м}^2. \quad (14)$$

Отметим, что полученный результат оценочного расчета величины  $E$  соответствует экспериментальным данным. Например, модуль упругости стали равен  $2 \cdot 10^{11} \text{ Н/м}^2$ , алюминия -  $0,7 \cdot 10^{11} \text{ Н/м}^2$ , каменной соли -  $0,4 \cdot 10^{11} \text{ Н/м}^2$  [6].

*Вычисление энергии связи.* В первом приближении, среднее значение силы взаимодействия между двумя атомами кристалла, при изменении расстояния между ними от  $r_0$  до  $2r_0$ , равно  $0,5F_{\max}$ . В таком случае энергия связи между ионами в расчете на одну связь равна

$$E_1 = A = F \cdot l \approx F_{cp} \cdot (2r_0 - r_0) \approx 0,5F_{\max} \cdot r_0 = 0,5 \cdot 2 \cdot 10^{-9} \cdot 3 \cdot 10^{-10} = 3 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}. \quad (15)$$

При известном значении энергии одной связи атомов в кристалле можно найти энергию связи для всего кристалла, т.е. ту энергию, которую необходимо затратить, чтобы разделить кристалл на отдельные атомы.

На опыте величина энергии связи кристаллического состояния вещества равна теплоте испарения твердого тела. Энергия связи одного моля кристалла равна

$$E_{св} = E_1 \cdot N_1 \cdot N_A, \quad (16)$$

где  $E_1$  - энергия одной связи, Дж;  $N_1$  - число связей, которые приходятся на один атом;  $N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$  - число Авогадро.

В нашем случае  $N_1 = 1$ , поэтому энергия связи кристалла равна  $E_{св} = 3 \cdot 10^{-19} \cdot 1 \cdot 6,02 \cdot 10^{23} \approx 18 \cdot 10^4 \text{ Дж/моль} \approx 40 \text{ ккал/моль}$ .

**Выводы.** Авторами разработан метод определения физико-механических свойств горных пород на основе модели кристаллического строения вещества.

Использование предложенного авторами метода позволяет определять параметры физико-механические свойств пород без длительных экспериментальных исследований, на научной основе проектировать основные процессы горного производства в т.ч. разрушение и транспортирование горных пород, управление состоянием массива, обогащение и др.

#### Список литературы

1. Ржевский, В.В. Основы физики горных пород // Серия: "Классика инженерной мысли: горное дело" [Текст] / В.В. Ржевский, Г.Я. Новик. - Издательство «Ленанд», 2014.
2. Ржевский, В.В. Свойства горных пород и методы их определения [Текст] / В.В. Ржевский, Г.Я. Новик. - М., 1969.
3. Барон, Л.И. Методы и средства контроля состояния и свойств горных пород в массиве [Текст] / Л.И. Барон Л.Б., Глатман. - М., 1989.
4. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела [Текст] / Ч. Киттель. - М.: «Наука», 1978. - 790 с.
5. Жданов, Г.С. Физика твердого тела [Текст] / Г.С. Жданов. - М.: Издательство МГУ, 1962. - 560 с.
6. Писаренко, Г.С. Справочник по сопротивлению материалов [Текст] / Г.С. Писаренко, А.П. Яковлев, В.В. Матвеев. - Киев: «Наукова думка». 1988. - 734 с.