

## КВАНТОВАЯ МОДЕЛЬ МИКРОТРЕЩИНЫ

*д.т.н. проф. Стоянов В.В. (Одесская Государственная Академия Строительства и Архитектуры)*

## QUANTUM MODEL OF THE MICROCRACK

*Dr.Sci.Tech. Stoyanov V.V. (The Odessa State Academy of Building and Architecture)*

**Аннотация.** В работе предлагается использовать в исследованиях трещиностойкости различных конструкций квантовую модель трещины, что позволяет уточнить некоторые моменты развития микротрещины и произвести оценку прочности с учетом концентрации напряжения вблизи вершины трещины. Развитие этой темы позволит уточнить некоторые проблемы исследования трещиностойкости различных материалов и конструкций.

**Ключевые слова:** квантовая модель, межмолекулярная связь, электронное облако, концентрация напряжений, энергия, релаксация.

**The summary.** In work it is offered to use in researches crack stability various designs quantum model of a crack that allows to specify some instants of progress of a microcrack and to make an assessment of strength in view of concentration of a pressure near to top of a crack.

Progress of this subject matter will allow to specify some problems of research crack stability various materials and designs.

**Keywords:** quantum model, intermolecular communication, an electronic cloud, concentration of pressure, energy, a relaxation.

### Введение.

Анализируя в работе [1] уравнение долговечности С.Н. Журкова [2] для установления времени разрушения металлических конструкций при циклическом нагружении мы обратили внимание на используемую методику моделирования атомно-молекулярной структуры [2,3,4,5], когда атомы или молекулы рассматриваются как некие твердые частицы [3][5]. Очевидно, что это не так, и в работе [1] указали на известный квантовый характер атомно-молекулярной теории, который необходимо применить при моделировании микротрещин. В настоящей работе квантовая модель микротрещины рассмотрена подробнее, но все же это только начало и предстоит решить в каком объеме, и до какого уровня необходима квантовая постановка модели трещины.

## 1. Анализ некоторых известных атомно-молекулярных моделей микротрещин.

Термофлуктуационная теория разрушения достаточно подробно представлена в работе Г.М. Бартенова [3], как молекулярная модель процесса разрушения, согласно которой происходит последовательный разрыв или восстановление химических связей (рис.1). Здесь атомы рассматриваются как частицы сплошности находящиеся в объеме тела (1-6) и на свободных поверхностях (7-11). На рис.1 на очереди разрыв связи по атомам 6-6.

Несмотря на весьма упрощенное представление о процессе развития микротрещин на базе представления атомов как частиц сплошности изложенные в [3], такая модель получила широкое распространение.

Встречаются и более упрощенные модели микротрещин (рис.2) [2] в виде конкретных микрочастиц (атомов или молекул) и вполне заметных связей между ними.

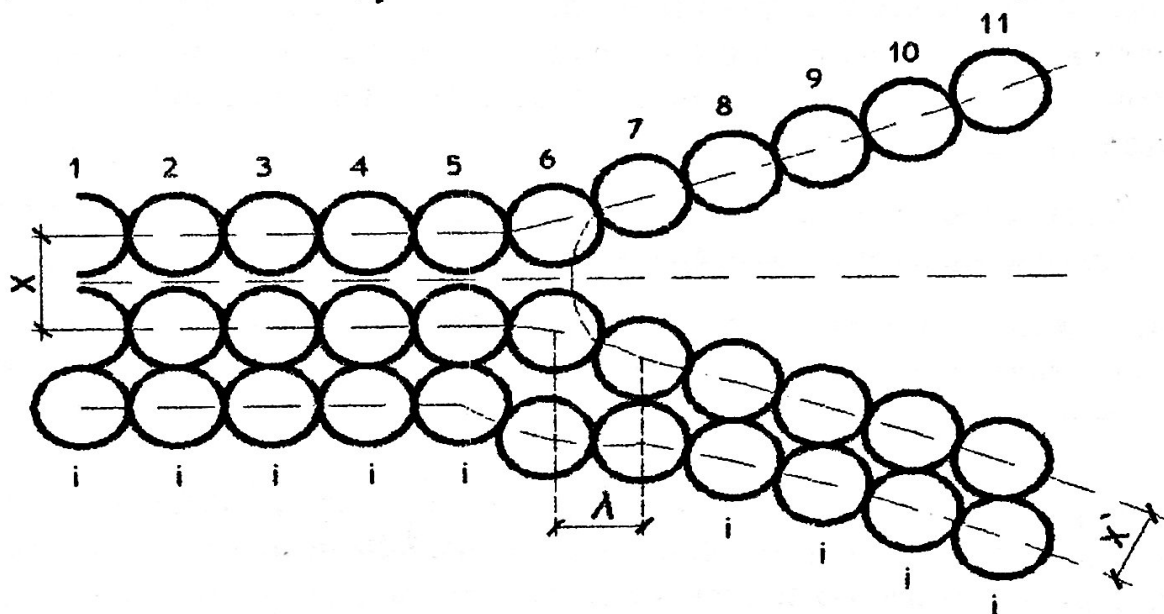


Рис. 1. Молекулярная модель микротрещин в хрупком материале [3].

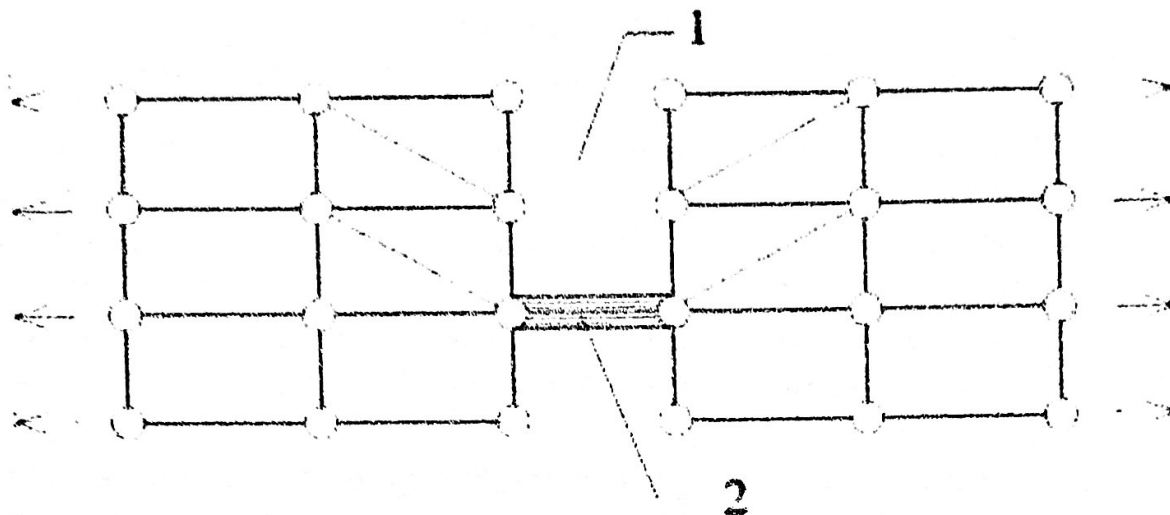


Рис. 2. Упрощенная схема атомно-молекулярной модели трещины [5]\*.  
1 – трещина; 2 – перегруженная связь.

Представленные выше атомно-молекулярные модели микротрещин (Рис.1 и Рис.2) носят научно-популярный характер и не отражают уже давно известные понятия о строении атомов, молекул и связей между ними, а потому не могут быть основой для научных исследований касающихся развития микротрещин.

## 2. Некоторые общие основы современной квантовой механики электрона, атома, молекул и их взаимодействия между собой.

Основой квантовой механики является положение о том, что сплошность не является соединением частиц, а частиц-волн (квантов). В полной мере это относится к электронам, атомам и молекулам (Рис.3).

Подробности о квантовой механике можно найти в любом учебнике физики, в т.ч. в блестящей книге Дж. Орира «Физика» [6], а предельно сжатую информацию в сравнительно свежем справочнике «Физика» Е. Платонов [7] и др. [8].

Для критически настроенного читателя заметим, что квантовые подходы в теории трещины следует использовать ровно столько, насколько размеры микротрещин соответствуют размерам атомов, молекул и связям между ними. Например, электронное облако вокруг ядра атома или молекулы может уплотняться или расширяться [6], но это никак не мешает квантовому подходу по рассмотренной трещине.

---

\*Заметим, что Рис.2 известен из научно-популярной книги (1971 г.) английского ученого Дж. Гордона «Почему мы не проваливаемся сквозь пол».

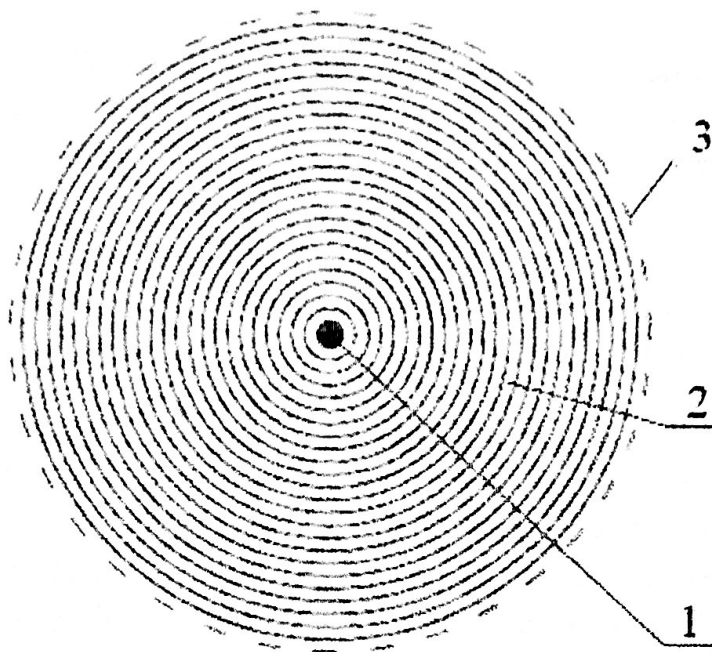


Рис. 3. Атом, (молекула) с электронным облаком.  
 1-ядро; 2- электронное облако;  
 3- контурные линии равной вероятности.

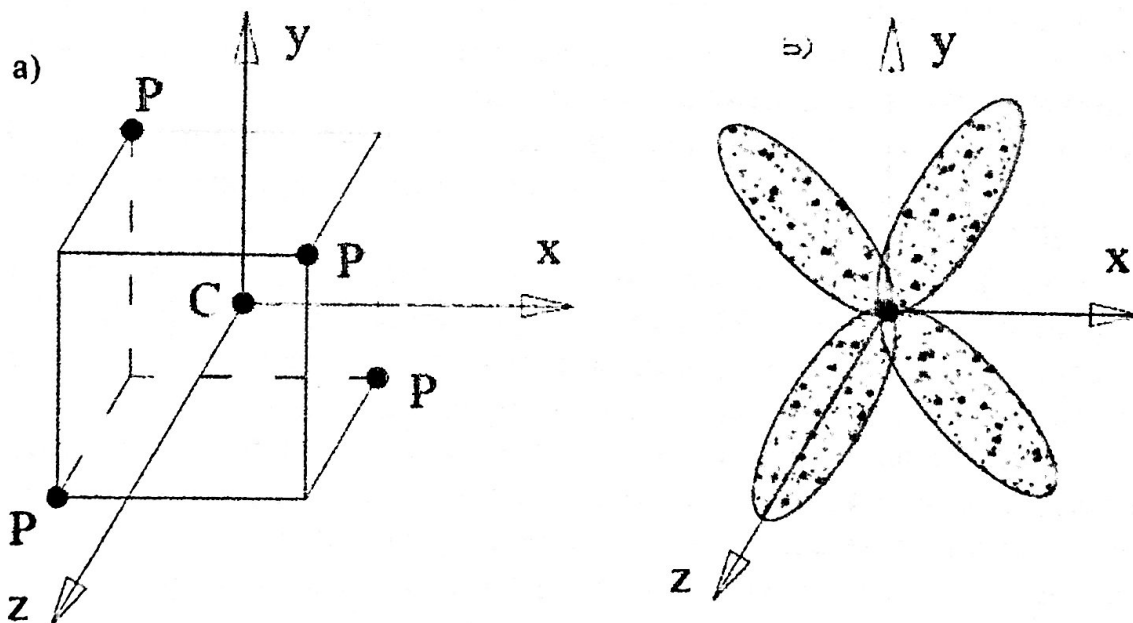


Рис.4. Элементарные лепестки молекулы  $\text{CH}_4$  [3].  
 а – относительные ориентации ядра углерода четырех ядер водорода (протонов) в молекуле  $\text{CH}_4$ ;  
 б – четыре электронных лепестка простирающиеся от ядра углерода и окутывающие протоны.



Вместе с тем, этого оказывается достаточно, чтобы понять, что нам предлагает физика в понимании развития микротрещин, т.е. мы оказываемся ближе к реальности механики развития трещин, чем ранее используемые подходы.

Электрон в атоме, как мы уже отмечали выше рассматривается, как квант, а совокупность электронов образует вокруг ядра электронное облако, не обозначенное строго определенными границами (Рис.3). Размеры атома колеблются в границах  $10^{-9} - 10^{-10}$  м, а радиус ядра составляет  $10^{-14} - 10^{-15}$  м\*.

Атом является квантовой системой, и его полная внутренняя энергия квантована, т.е. она может принимать только одно значение. Местонахождение электрона не привязано к определенной точке, и его с разной вероятностью можно обнаружить в разных местах некоторого объема. Свидетельством об этом является различная плотность заряда этого облака в разных точках (Рис.3).

Каждому электрону атома квантовой механикой в зависимости от величины потенциальной энергии регламентировано местонахождение вблизи ядра (на электронной «орбитали», где могут находиться не более двух электронов). Электрон в атоме характеризуется четырьмя параметрами квантовых чисел: главное квантовое число –  $n$ , орбитальное квантовое число –  $l$ , магнитное квантовое число –  $m$  и спиновое магнитное квантовое число –  $s$ .

Атом поглощает и испускает электромагнитное излучение в виде кванта (фотона) при переходе из одного стационарного состояния с энергией  $E_1$ , в другое энергией  $E_2$ .

Атомы в молекулах соединяются между собой ионной или ковалентной связью. Молекула (размером от  $10^{-7}$  и  $10^{-10}$  м) представляет собой электрически нейтральную систему, но отдавая или присоединяя электрон, молекула превращается в положительный или отрицательный ион. В случае ковалентной связи атомы обобществляют одни и те же внешние электроны. Некоторые твердые тела кристаллической или поликристаллической (множество мельчайших кристаллов) структуры удерживают за счет третьего типа связи – металлической.

В некоторых молекулах атомы с ковалентной связью имеют способность обобществить четыре дополнительных электрона, образуя при этом электронные лепестки протяженностью от ядра молекулы до ее границ (Рис.4).

---

\*Для примерного представления разницы в размерах атома и ядра отметим, что если принять размеры ядра в виде теннисного мяча, то размеры атома составят 5000 м [8].

При замене четырех атомов водорода (Рис. 4) атомами углерода получим разновидность твердого углерода с наиболее сильной связью – алмаз.

### 3. Квантовая модель микротрещины.

Из анализа квантовой природы электрона, атома и молекул становится понятным совершенно иной характер их взаимодействия, чем модели представленные выше в п.1. На Рис. 5 изображена квантовая модель элемента сплошности в отсутствии внешнего воздействия, но с наличием дефекта (дислокации\*). Атомы и молекулы показаны здесь (Рис. 5) в окружении электронных облаков.

На Рис. 6 показана квантовая модель поперечной микротрещины двухатомной молекулы при внешнем воздействии. Здесь видно, что разрыв только одной межатомной связи по линии (а-а) приводит (в отличие от предыдущего подхода Рис.1) к движению огромного количества атомов вдоль оси х, где наблюдается раздвижка атомов в молекулах не только от (b-b) до (h-h), но и в определенной части объема сплошности вокруг трещины - как в ее вершине, так и по берегам\*\*. Только в одном атомном ряду на расстоянии  $10^{-3}$  м от вершины трещины вовлекается в работу в разной стенке загрузки около миллиарда межатомных связей, что не соответствует традиционным подходам (Рис.1, [3] стр. 297), где предполагается, что при достаточно большой флуктуации происходит разрыв одной или нескольких связей и периметр микротрещины внедряется на глубину равную межатомному расстоянию. Такое утверждение никак не соответствует квантовой модели, которая указывает на значительный резерв сопротивления развития микротрещин в виде соучаствующих соседних химических связей.

---

\*Дислокации могут являться местом зарождения микротрещины. Плотность дефектов в монокристалле на  $1 \text{ м}^2$  поверхности может достигать до  $10^{10}$  линейных дислокаций. (А ведь еще есть плоские и винтовые дислокации).

\*\*Что касается движения атомов по берегам трещины, то это совершенно иная картина, чем в вершине и это мы отметим далее.

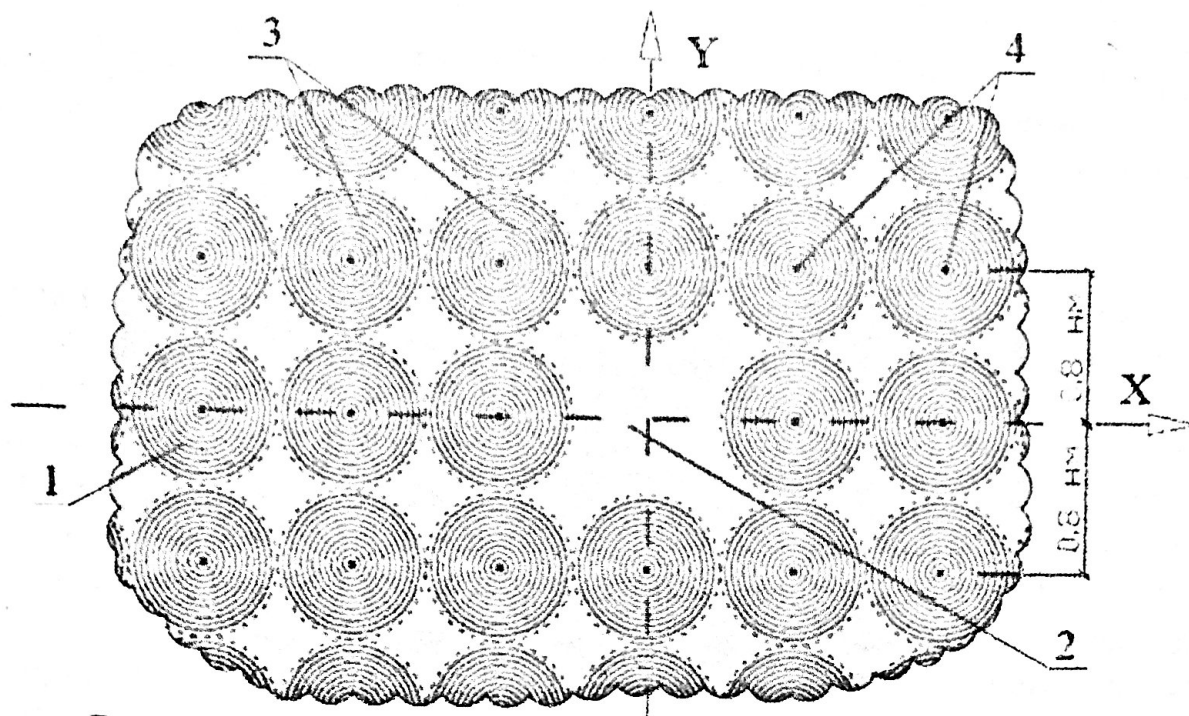


Рис. 5. Квантовая модель участка сплошности при отсутствии термофлуктуационного воздействия.  
 1 – атом (молекула); 2 – дислокация (отсутствия атома молекулы);  
 3 – электронное облако; 4 – ядро.

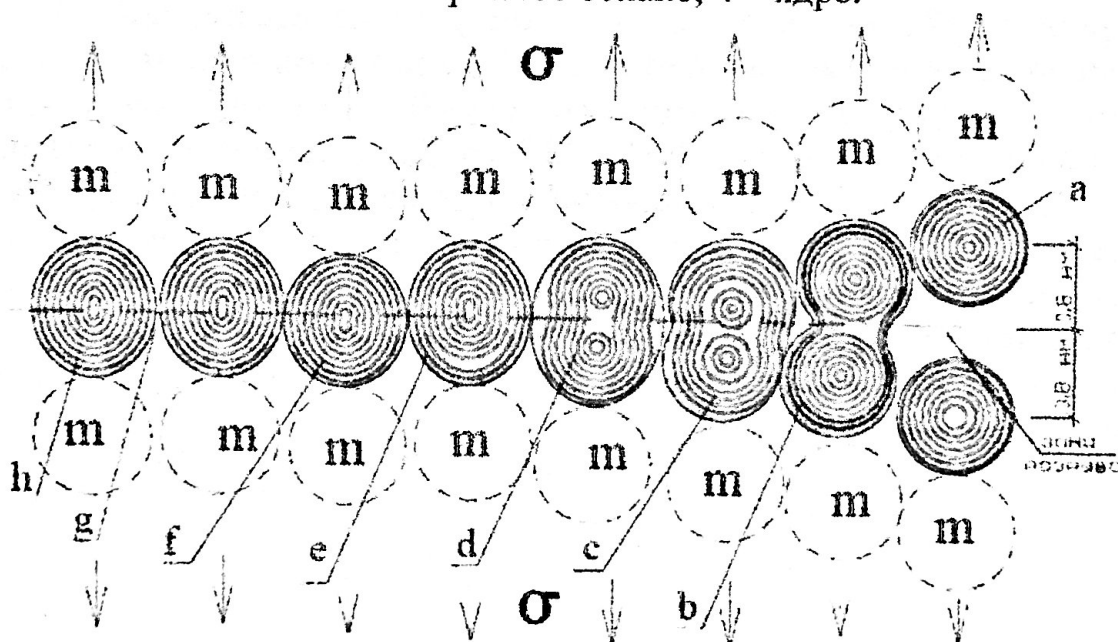


Рис. 6\*. Квантовая модель поперечной микротрещины двухатомной молекулы при внешнем воздействии.

b-h – двухатомные молекулы в зоне внешнего воздействия;  
 a – атомы на свободной поверхности (берегах трещины);  
 b – молекула в вершине трещины перед возможным разрывом связи;  
 m – молекулы в зоне сплошности внешнего воздействия.

\*Рис. 6 является антиподом Рис. 27.6 [6].

Наличие большого количества молекул вблизи вершины трещин позволяет несколько иначе сформулировать причины концентрации напряжений. Обычно причиной концентрации напряжений называют форму трещины, а следовало бы указать степень насыщенности вершины трещины межатомными связями и длины поперечной трещины (Рис. 7).

На Рис. 7 показаны: общий вид растянутого металлического образца с поперечной трещиной (Рис. 7а), фрагмент расположения силовых линий вблизи вершины трещины (Рис. 7б [10]), степень насыщения в пределах 1 мм от вершины трещины межатомными связями ближайшей цепи молекул ( $S_1, S_2, S_3$ ) в зависимости от конфигурации вершины трещины (Рис. 7в).

Из Рис. 7б следует, что силовые линии на участке шириной  $l_2 = 0.15 \cdot b/2 \cdot F_T$  уплотняются у вершины трещины на площади до 1 мм<sup>2</sup>. Это означает, что здесь плотность усилий более чем в пять раз выше, чем на участке  $l_1 = 0.75 \cdot (b/2)$ .

Одновременно, как видно на Рис. 7в, на величину концентрации напряжений оказывает влияние конфигурация вершины трещины. Так для микротрещины толщиной в одно или нескольких межмолекулярных расстояний (7в) нет необходимости говорить о радиусе кривизны ее вершины ( $S_1$ ) и разрыв ее неизменно ведет к развитию трещины. Скорость продвижения такой трещины будет зависеть в основном только от степени перегрузки. Величина концентраций напряжений  $\sigma_{\max}$  в этом случае может в десятки раз превышать  $\sigma_n$ .

Трещины с большим радиусом кривизны вершины (Рис. 7в) – круговым или овальным обеспечены значительной поддержкой межмолекулярных связей ( $S_2, S_3$ ), что приводит к величинам концентрации напряжения  $\sigma_{\max}$  примерно в 3-7 раз выше  $\sigma_n$ .

Известно, что при возникновении трещины на ее берегах наблюдается процесс релаксации (Рис. 7б) [5]. С позиции квантовой модели трещины этот процесс заключается в том, что в области релаксации межмолекулярные связи укорачиваются, электронное облако уплотняется и часть энергии из этой зоны перетекает в вершину трещины.

Из анализа особенностей развития трещины можно сделать вывод, что концентрация напряжений вблизи вершины трещины будет являться соотношением величины плотности усилия к степени насыщения сплюсности возле вершины межатомными связями, т.е. сопротивления определенного количества межатомных связей  $n$  обладающих энергией ( $E_{cb}$ ) достаточной (как минимум) уравновесить внешнее воздействие. Очевидно, что без рассмотрения энергетической составляющей в квантовой модели не обойтись.

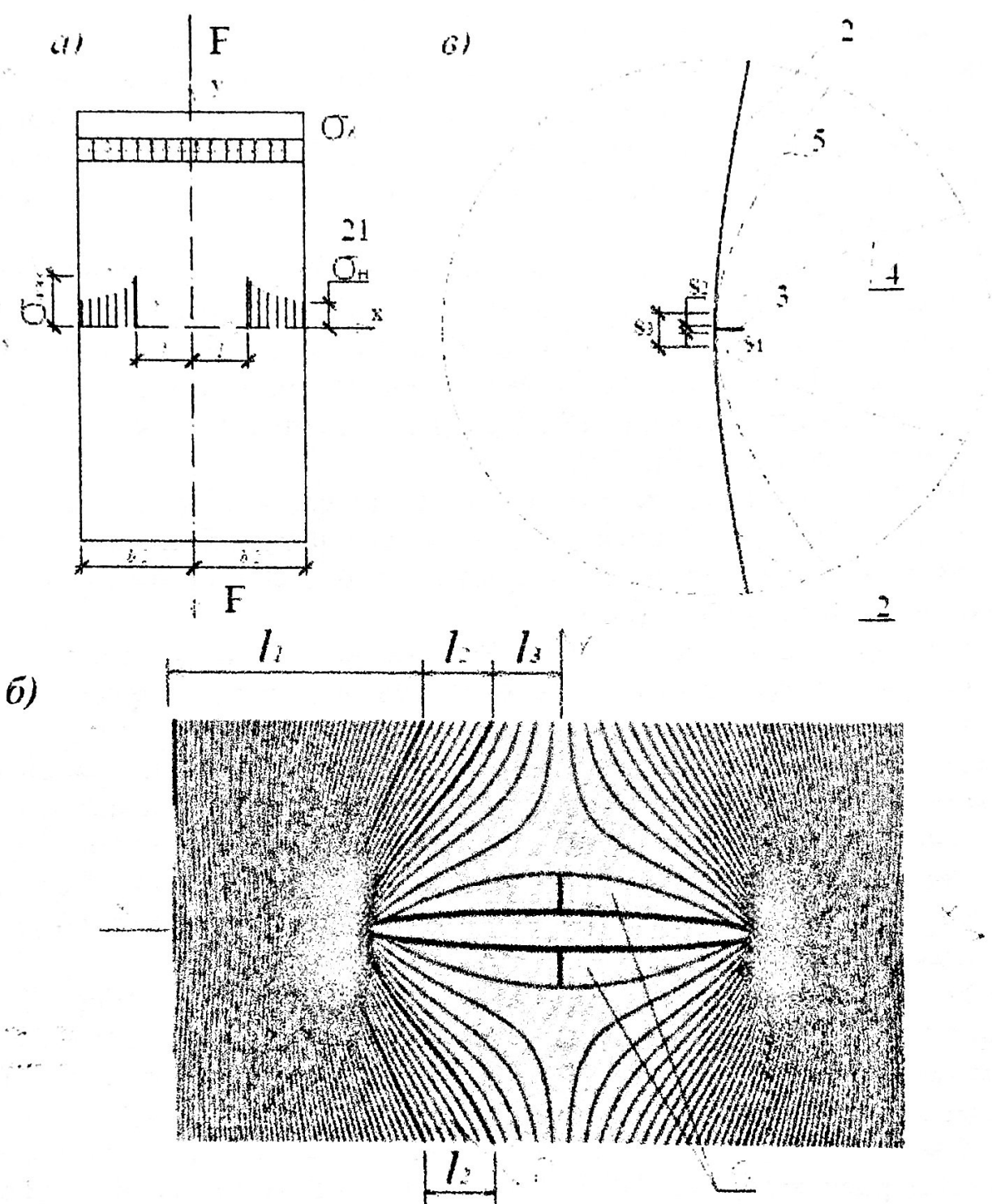


Рис. 7. Концентрация напряжений в вершине трещины.

а) Общий вид растянутого металлического образца размером  $50 \times 250$  мм и толщиной  $3$  мм с поперечной трещиной  $l=15$  мм;

б) Фрагмент расположения силовых линий вблизи вершины трещины [10];

в) Степень насыщения в пределах  $1$  мм от вершины трещины межатомными связями ближайшей цепи молекул ( $S_1, S_2, S_3$ ) в зависимости от конфигураций ее вершины.

1 – общий вид образца с трещиной; 2 – ближайшая к вершине трещины цепь молекул; 3 – микротрещина; 4 – овальная вершина трещины; 5 – круговая вершина трещины; 6 – область релаксации.



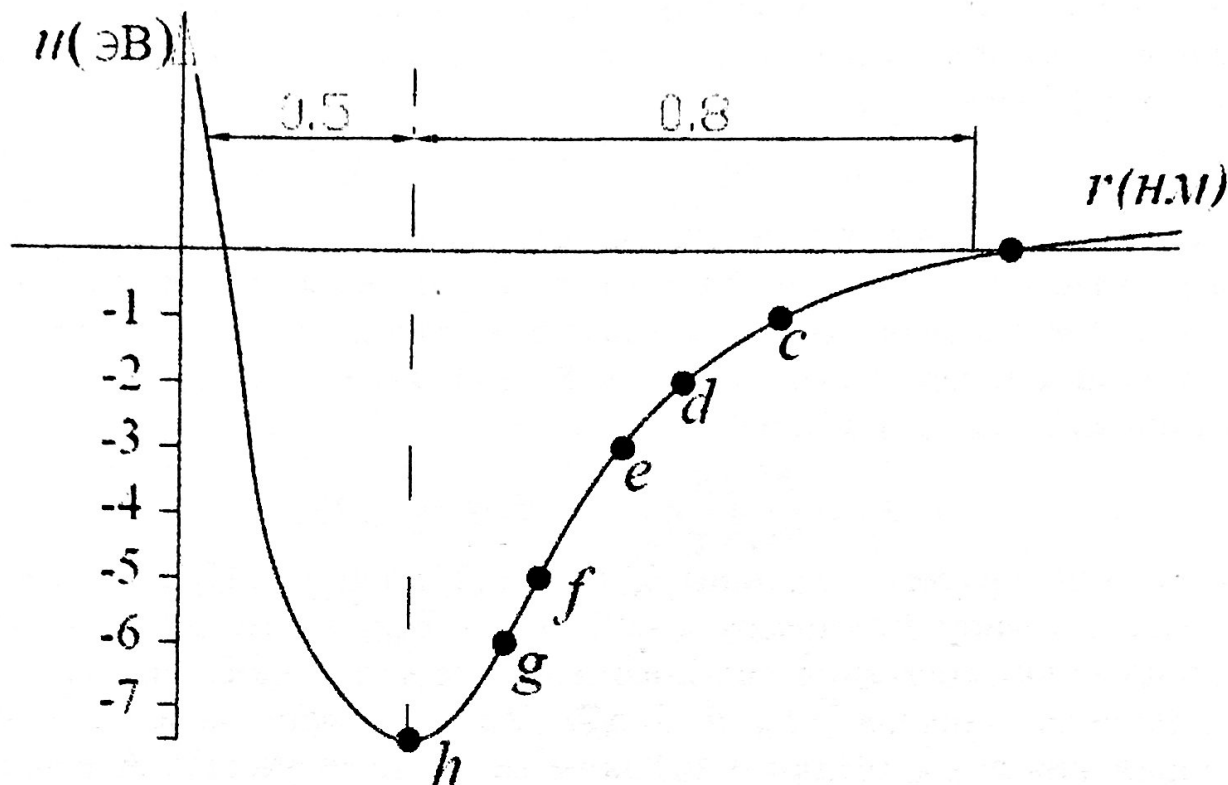


Рис. 8. Потенциальная энергия связи двух молекул на различных этапах образования микротрещины (см. Рис. 6 а-н).

На Рис. 8 широко известная зависимость величины потенциальной энергии межмолекулярных связей. Однако, мы здесь немного уйдем от традиционных подходов и покажем, что происходит не только с одной молекулярной связью, а и с многими другими соседними чутко реагирующих на то что происходит у соседей. При этом следует учесть все параметры химических связей ( $k_{xc}$ ) – количество электронных пар, осуществляющих связь атомов; длину химической связи ( $z_{xc}$ ), энергию химической связи ( $E_{xc}$ ), валентный угол ( $\alpha$ ) и относительную молекулярную массу химических частиц ( $M_2$ ).

В процессе внешнего воздействия на связь двух молекул, когда расстояния между их центрами превышает 0,8 нм (по а-а) происходит разрыв связи. Для этого необходимо преодолеть потенциальную энергию связи не менее чем  $E_{xc} \geq 0,6$  эВ. В нашем случае для железа (Fe)\*  $E_{xc}^* = 7.87$  эВ. Ближайшие молекулы к (а-а) это (b-b), (с-с) и т.д. в этот же период флуктуации также стремятся разделиться, но для этого необходимо увеличение внешнего воздействия. В случае если таковое прекратится, то каждая из перечисленных связей вернется на свою прежнюю позицию, которую она занимала до начала внешнего воздействия (Рис. 8).

\*табл. 27.1 [6]



Величину межмолекулярной связи можно установить для конкретного элемента (простого или сложного), вещества используя формулу Шредингера (26-7):

$$E = -k_0^2 \frac{me}{2h^2} = 7,87 \text{ эв} \quad (1)$$

Для металла все  $n$  электронов стремящихся заполнить низкие энергетические состояния образуют так называемые Ферми-газ. Эти  $n$  электронов заполнят все энергетические состояния от низшего до состояния с кинетической энергией  $K_f$ , называемого уровнем Ферми. Величина  $K_f$  зависит от  $\eta = n/v$ :

$$k_f = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{3}{\pi} \eta \right)^{2/3} = 7,87 \text{ эв} \quad (2)$$

Результаты расчета величины  $E_{xc}$  по (1), (2) и таб. 27.1 [7] совпадают.

Зная величину межмолекулярной связи ( $E_{xc}$ ), вернемся к анализу напряженного состояния сплошности в вершине трещины (Рис. 7).

Величина усилия  $F_m = 0,15 \cdot (b/2) F/2$  вызывает концентрацию напряжения возле вершины трещины на площади участка  $A$  равной ширине  $1$  мм и длине равной всей толщине образуя (при сквозной трещине):

$$\sigma_{max} = \frac{F_T}{A} = \frac{F_T}{a \cdot \delta} \quad (3)$$

Величина потенциальной энергии межмолекулярных связей  $U$  должна при определенном объеме  $V$  и напряжений в связях  $\sigma_c$  обеспечить противодействия флуктуации:

$$\sigma_{max} = \frac{F_T}{A} \leq \frac{U \cdot n_c}{V} \quad (4)$$

где  $n_c$  = число связей испытывающих воздействие флуктуации;

$V$  – объем связей подверженных флуктуации.

При определении числа связей в одном атомном слое  $n_c$ , принимаем на одном погонном мм  $10^7$  связей при длине одной связи  $10^{-7}$  мм.

Выше мы отмечали, в противодействии флуктуации участвуют (в разной степени Рис. 6) огромное количество межатомных связей вблизи трещины общее их количество в направлении от вершины трещины примем  $10^4$  связей и примем среднюю величину межатомной связи:

$$E(xc) = 7,87 \text{ эВ}/2 = 4 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 8,4 \cdot 10^{-20} \text{ кгм} = 8,4 \cdot 10^{-15} \text{ кНмм.}$$

Рассмотрим случай (Рис. 7а), когда  $F = 30 \text{ кН}$ , а  $F_T = 4,5 \text{ кН}$ .

Выберем степень насыщения вершины трещины межатомными связями ближайшей цепи молекул  $S_1$  (Рис. 7в), т.е. имеем микротрещину с вершиной  $10^{-7}$  мм по длине сечения  $3$  мм.

Выражение (4) запишем в виде:

$$\frac{4,5 \text{ кН}}{1 \text{ мм} \cdot 3 \text{ мм}} = 1,5 \frac{\text{кН}}{\text{мм}^2} > \frac{8,4 \cdot 10^{-5} \text{ кН мм} \cdot 3 \cdot 10^7 \cdot 10^4 \cdot 1}{1 \text{ мм} \cdot 3 \text{ мм} \cdot 10^{-7} \text{ мм}} = 0,84 \frac{\text{кН}}{\text{мм}^2} \quad (5)$$

Из выражения (5) следует, что такая трещина является разрушительной, т.к. условие (4) нарушено. Выберем степень насыщения  $S_2$ , т.е. вариант конфигурации вершины трещины в виде овала, когда  $S_2=3$  и выражение (5) примет вид отвечающий требованиям (4):

$$1,5 \frac{\text{кН}}{\text{мм}^2} < 2,4 \frac{\text{кН}}{\text{мм}^2} \quad (6)$$

Здесь в (6) не учтено увеличение объема  $V$ , так как задействованы дополнительные межатомные связи, что дополнительно увеличивает несущую способность материала вблизи вершины трещины.

Приведенные выше расчеты достаточно условны, так как не учитывают влияния дислокаций на развитие трещин. Это влияние весьма значительно и трудно прогнозируемо\*. Видимо, здесь возможен подход с позиции статической физики, чтобы обеспечить применение средних величин.

В заключении отметим, что квантовая модель приближает нас к реальной картине механизма перемещения атомов и молекул в ходе образования и роста трещины. В частности, оказывается, что вокруг трещины наблюдается наиболее активное движение квантов – они как частицы сближаются, расходятся, а волны передают или получают энергию. Электронное облако, окружающее атомы или молекулы, уплотняется или расширяется в зависимости от характера работы межмолекулярных связей.

Разработка квантового подхода к развитию трещин для разных материалов: изотропных в виде поликристаллических (сталь, бетон); анизотропных (древесина) и др. позволит уточнить работы этих материалов в различных конструктивных элементах.

---

\*Даже в современном новом материале (графене) наличие пропущенных связей (дислокаций) в однослойном (в один атом) порождает большие проблемы.

## Литература.

1. Журков С.Н., Нарзулаев Б.Н., Временная зависимость твердых тел. «Журнал технической физики», т. 23, 1953.
2. Стоянов В.В., Прогнозирование динамической усталости элементов металлических конструкций при циклическом нагружении . В ст. «Современные строительные конструкции из металла и древесины №14, часть 1», ВРС, Одесса, 2010, с 1-11.
3. Бартенев Г.М., Зеленев Ю.В. «Физика и механика полимеров». М., Высшая школа 1983, 390 с.
4. Гуль В.Е. «Структура и прочность полимеров», М., Химия, 1971, 344 с.
5. Зайцев Ю.В. «Механика разрушения для строителей», М., Высшая школа, 1991, 285 с.
6. Дж.Орир. «Физика», изд. Мир, М., 1981, 288 с.
7. Платунов Е., Самолетов В. «Физика», изд. Питер, 2005, 494 с.
8. Г. Ландсберг, «Физика» т.1, Наука, М., 1972.
10. Стоянов В.В., Алаид М. «Тестове за издръжливост на опънати метални проби с нормални изкуствени пукнатини» в сб. Стоматени и дървени конструкции, сб. №11, София УЛСГ 2009 с. 43-49.