

$$\rho' = \sum_i \rho_i \left(1 + \lambda \frac{V_s - V_0}{\sum_i U_i - \sum_i U_0} \right),$$

где λ – вариационный параметр.

Подставим это выражение в интеграл энергии (5^a) и найдем условие минимума n_{12} , т.е.

$$\frac{d\eta_2}{d\lambda} = 0.$$

Тогда поправка для базисных функций λ_0 имеет следующий вид:

$$\lambda_0 = \frac{W_s}{2(W_p + W_k + W_a)}.$$

Этот коэффициент является дополнением к экспонентам гауссовских функций в теории функционала плотности применительно к тяжелым атомам. Это позволяет расширить возможности пакета GAUSSIAN для расчета структуры кластеров, состоящих из базисных атомов.

Нами установлено соответствие такого подхода теореме Кона–Шема [3] для функционала плотности конденсированных сред.

Данный коэффициент возмущения может быть также использован для выяснения природы деформации внутренних оболочек атомов

вещества при образовании химической связи, а также при оценке ван-дер-ваальсова взаимодействия в кластерах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Foresman J.B., Frisch. Exploring chemistry with electronic structure methods. Second Edition GAUSSIAN 98. Pittsburgh, P.A., 1998, P.298.
2. Hafner J. Effective enteramoic forces and atomic and electronic structure of liquid and amorphous metals // 7. Phys. Condens. Mater. 1991. V. 136, N 1-2. P. 173-180.
3. Kohn W., Sham J. Self-consistent equations including Exchange and correlation effects // Phus. Rev. 1965. 140, A1133. P. 160-170.

Резюме

GAUSSIAN бағдарламалық пакетіндегі гаусс функцияларының экспонентасына түзету енгізу жолы ұсынылған.

Summary

In this work there has been offered a correction to the elements of gauss functions in the program complex GAUSSIAN.

УДК 539.182/184

ХМИ им. Ж. Абишева, г. Караганда;

*Карагандинский государственный технический университет,

г. Караганда;

** КазАТК, г. Актау

Поступила 27.04.06г.

Ж. Ж. ТУРГУМБАЕВ, Ж. ЖУМАЕВ

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА КОПАНИЯ ГРУНТА КОВШАМИ ДРАГЛАЙНА ПОД ГИДРОСТАТИЧЕСКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Копание грунтов рабочими органами землеройных машин в подводных условиях имеет свои особенности. Когда глубина резания грунтов под водой ковшем драглайна становится значительной (более 7 м), влияние гидростатического давления на процесс копания возрастает. Иными словами, увеличение гидростатического давления водной среды (глубина погружения рабочего органа) приводит к изменению формы стружкообразования. Ощутимой становится сила тяжести столба жидкости, действующая на поверхность массива грунта, в том числе в зоне взаимодействия грунта с рабочим органом. Создавшаяся от

гидростатического давления водной среды пригрузка препятствует выпиранию призмы грунта вверх, и стружка грунта начинает в виде ленты скользить по рабочей поверхности отвала, плотно прижимаясь к ней за счет действия гидростатического давления [1].

В соответствии с представленной расчетной схемой к поверхностям стружки грунта, рабочего органа и на массив грунта действует равномерно распределенная нагрузка – гидростатическое давление p . По мере движения отвала в зоне резания грунта развивается напряжение сжатия грунта перед отвалом. При достижении предель-

ного значения напряжения происходит сдвиг грунта по поверхности скольжения, которая принята в виде плоскости, расположенной под углом ψ к направлению движения режущей кромки отвала. Установлено, что угол скольжения при воздействии гидростатического давления несколько изменяется по сравнению с обычными (традиционными) условиями резания на воздухе:

$$\psi = \psi_{tr} - k \cdot p,$$

где ψ_{tr} – угол скольжения при традиционном, сухом резании; k – коэффициент, учитывающий изменение угла сдвига от действия гидростатического давления и грунтовых условий; p – гидростатическое давление водной среды.

Касательная составляющая сопротивления резанию грунта $P_{рез}$ режущим элементом драглайна на базе формул, полученных в работе [2], и с учетом условия блокирования резания имеет вид

$$P_{рез} = H_L \cdot b \cdot p \cdot K_S \times \left(\frac{(\cos \alpha + tg \varphi \cdot \cos \xi \cdot \cos \psi) \cdot tg \delta}{\sin \alpha} \right) + b \cdot h \cdot ctg \psi \cdot \mu \times (p + C_o - p \cdot tg \psi) + \frac{1}{2} \cdot C_x \cdot \rho_x \cdot S_x \cdot v^2, \quad (1)$$

где H_L – высота подъема грунта; K_S – коэффициент смачивания поверхности передней грани режущей части драглайна, который характери-

зует степень совершенства рабочего органа (для идеального рабочего органа $K_S \Rightarrow 0$); h – глубина резания; b – ширина ножа; C_o – удельное сцепление грунта; ψ – угол скольжения грунта; α – угол резания; φ – угол трения грунта по грунту; δ – угол трения грунта об нож; γ – плотность грунта; μ – коэффициент, зависящий от степени блокировки стружки при резании грунта ковшом драглайна; C_x – коэффициент гидродинамического сопротивления; ρ_x – плотность среды; S_x – проекция площади сечения ковша драглайна на плоскость, перпендикулярную направлению движения; v – скорость копания.

Из анализа схем взаимодействия драглайна с грунтом и зависимостей, описывающих процессы копания грунтов в подводной среде, вытекает, что одним из путей повышения эффективности копания грунта ковшом драглайна под гидростатическим давлением является использование водной среды для водяной смазки трущихся поверхностей между рабочими поверхностями рабочего органа и грунтовой стружки.

Схема взаимодействия модернизированного режущего элемента ковша драглайна с грунтом в подводной среде, когда гидростатическое давление водной среды значительное, представлена на рис. 1. Особенности предложенного режущего инструмента ковша драглайна являются максимальное снижение режущей части кромки ножа и обеспечение водной смазкой контакти-

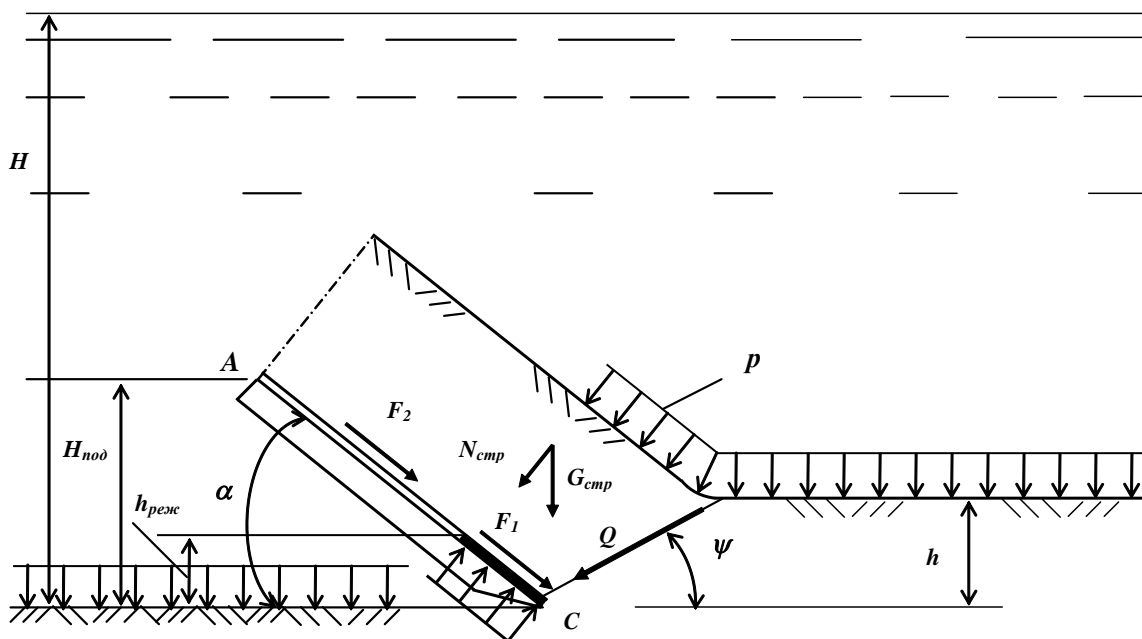


Рис. 1. Схема резания грунта ножом драглайна в подводных условиях (гидростатическое давление значительное, $p > p_{кр}$)

рующей поверхности между передней гранью режущего элемента ковша драглайна и грунтовой стружки.

Режущий инструмент ковша драглайна имеет у режущей кромки ножа прикрепленную к передней грани металлическую пластину, обеспечивающую рельефность рабочей грани ножа (рис. 1). Область резания грунтов режущим инструментом ковша драглайна, таким образом, состоит из двух зон. В зоне *I*, расположенной ближе к режущей кромке, определяемой размером по направлению движения грунтовой стружки $l_1 = h_{\text{рез}} / \sin \alpha$, резание грунтов происходит в условиях, когда на контактирующую поверхность водная среда не поступает. В зоне *II*, являющейся поверхностью подъема грунтовой стружки до уровня дна ковша драглайна и определяемой длиной $l_2 = (H_{\text{под}} - h_{\text{рез}}) / \sin \alpha$, резание грунтов происходит тогда, когда обеспечивается возможность проникания водной среды на контактирующую поверхность между рабочей гранью ножа и грунтовой стружкой с тыльной стороны ножа драглайна через отверстия, а также с боковых сторон ножа ковша драглайна.

Сопротивление перемещению грунтового пласта по передней грани ножа драглайна, определяемое трением грунтовой стружки о поверхность ножа ковша, можно представить как

$$F = F_1 + F_2,$$

где F_1, F_2 – сопротивление трению грунта соответственно для зон *I* и *II*.

Как было оговорено, зона *I* расположена вблизи режущей кромки ножа драглайна и характеризуется резанием грунта при отсутствии проникания водной среды в зону разрушения. В зоне *II* процесс перемещения грунтовой стружки происходит при условиях обеспечения проникания водной среды (гидростатического давления) на контактирующую поверхность между грунтовым пластом и передней гранью ножа драглайна.

В соответствии с представленной расчетной схемой взаимодействие с грунтом рабочего органа сила трения в зоне *I* равно

$$F_1 = a \frac{1}{\cos \alpha} \cdot L \cdot p \cdot \text{tg} \delta,$$

в зоне *II* определяется

$$F_2 = L \cdot b \frac{1}{\cos \alpha} \cdot h_c \cdot \cos \alpha \cdot \gamma \cdot \text{tg} \delta = L \cdot b \cdot h_c \cdot \gamma \cdot \text{tg} \delta_1.$$

где L – ширина рабочего органа; a – горизонтальная проекция зоны режущей кромки рабочего

органа; b – горизонтальная проекция зоны контакта перфорированной поверхности с грунтом; h_c – толщина стружки; α – угол резания; γ – плотность грунта; δ_1 – угол трения между грунтом и ножом при наличии водной смазки; p – гидростатическое давление; δ – угол внешнего трения грунта.

Сила трения F , возникающая в процессе перемещения грунтового пласта по передней грани рабочего органа, нагружает в виде нормальной составляющей $F \cdot \cos \xi$ поверхность скольжения грунта перед режущей кромкой. Принимаем за основу теории разрушения грунтов рабочими органами землеройных машин зависимость, полученную Кулоном и развитую Мором [3], согласно которой разрушение грунтов наступает в тот момент, когда касательные напряжения τ достигают величин, определяемой выражением

$$\tau = C_0 + \sigma \cdot \text{tg} \varphi,$$

где C_0 – удельное сопротивление сдвигу грунта; σ – нормальное напряжение, возникшее в поверхности скольжения грунта; φ – угол внутреннего трения грунта.

Таким образом, касательная составляющая сопротивления копания грунтов ковшом драглайна, оснащенным перфорированной поверхностью, при воздействии гидростатического давления равна

$$P_t = \left[c_0 \cdot L \cdot h \cdot \frac{1}{\cos \psi} + \left(b \cdot h_c \cdot \gamma \cdot \text{tg} \delta_1 + a \frac{1}{\cos \alpha} \cdot p \cdot \text{tg} \delta \right) L \cdot \cos \xi \cdot \text{tg} \varphi \right] \cos \psi,$$

где ξ – угол между плоскостью передней грани ножа и нормалью к поверхности скольжения грунта $\xi = 180^\circ - (90^\circ + \alpha + \psi)$ или $\xi = 90^\circ - (\alpha - \psi)$.

Перемещение грунтовой стружки внутри ковша (рис. 2) сопровождается трением F_2 грунтовой стружки о ковш, обусловленным действием силы тяжести грунтовой стружки G_{zp} и гидростатического давления p , распределенного на поверхности грунтового пласта. Сопротивление от трения рабочего органа о грунт P_{mp} может быть определено как

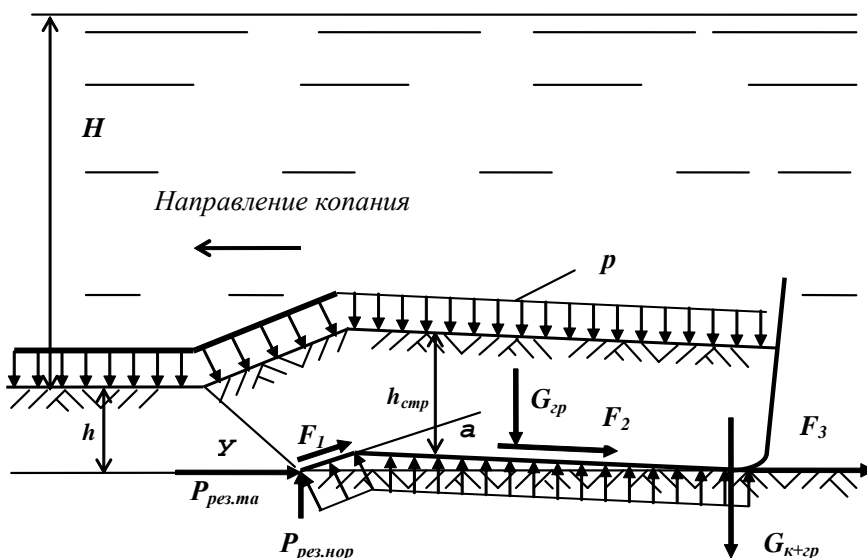
$$P_{mp} = (G_{zp} + p \cdot b \cdot L) \cdot \text{tg} \delta,$$

где G_{zp} – сила тяжести грунтовой стружки, находящейся внутри ковша:

$$G_{zp} = b \cdot L \cdot h_{cmp} \cdot \gamma_{zp}.$$

Тогда

Рис. 2. Схема копания грунта ковшем драглайна в подводных условиях (гидростатическое давление значительное, $p > p_{cp}$)



$$P_{mp} = b \cdot L (h_{cmp} \cdot \gamma_{zp} + p) \cdot \operatorname{tg} \delta, \quad (2)$$

где p – гидростатическое давление, действующее на поверхность грунтовой стружки; b и L – соответственно ширина и длина ковша драглайна; $\operatorname{tg} \delta$ – коэффициент трения грунта по стали; γ_{zp} – объемный вес грунта.

Как видно из приведенных зависимостей сопротивления трению грунта о ковш, наиболее ощутимыми факторами при копании грунта ковшем драглайна в водной среде являются гидростатическое давление и коэффициент трения грунта по материалу ковша (по стали). В ходе экспериментальных исследований установлено существенное снижение сопротивления трению при обеспечении в конструкции ковша возможности поступления водной среды на контактирующую поверхность между ковшем и грунтовой стружкой.

На основе результатов исследований предложен модернизированный ковш, имеющий перфорированные поверхности, через отверстия которых может поступать водная среда с наружной стороны ковша на внутреннюю. По мере движения грунтовой стружки она увлекает собой водную среду. Таким образом, между поверхностью ковша драглайна и грунтовым пластом образуется водная прослойка, которая существенно снижает коэффициент трения между ними. При этом гидростатическое давление, действующее с наружной поверхности грунтового пласта, выравнивается действием гидростатического давления, действующего с тыльной его стороны.

Тогда сопротивление от трения ковша о грунт для модернизированного ковша, обеспечивающего водную «смазку» контактирующей поверхности в зоне перемещения грунтовой стружки по ковшу, математически может описано выражением

$$P_{mp} = b \cdot L \cdot h_{cmp} \cdot \operatorname{tg} \delta_1,$$

где $\operatorname{tg} \delta_1$ – коэффициент трения грунта о ковш драглайна при наличии водной «смазки».

При перемещении грунтовых пластов в полости ковша драглайна между ними возникает взаимодействие, осуществляющее дополнительное сопротивление наполнению ковша грунтом. Передний грунтовой пласт, перемещаясь вверх, оказывает пассивное давление на грунт в ковше и на задние грунтовые пласты. Одновременно грунтовые пласты, расположенные в тыльной части ковша драглайна, создают дополнительную пригрузку на передний пласт грунта. Поскольку грунтовые пласты в ковше при его заполнении находятся в разрыхленном состоянии, то водная среда оказывает на грунтовые пласты взвешивающее воздействие. Общее сопротивление наполнению ковша грунтом в подводной среде следует определять по зависимости

$$P_{nan} = b \cdot h_{cmp} \cdot H_{ковиш} \cdot (\gamma_{zp} - \gamma_e), \quad (3)$$

где b – ширина резания; h_{cmp} – толщина стружки; $H_{ковиш}$ – высота наполнения ковша драглайна; γ_{zp} и γ_e – объемная масса соответственно грунта и водной среды.

Окончательно имеем математическую модель определения сопротивления копании грунта ковшем драглайна в подводных условиях как сумму

$P_{\text{кон}} = P_{\text{рез}} + P_{\text{тр}} + P_{\text{нат}}$ из приведенных зависимостей (1), (2) и (3):

$$P_{\text{кон}} = H_L \cdot b \cdot p \cdot K_S \cdot \left(\frac{(\cos \alpha + \operatorname{tg} \varphi \cdot \cos \xi \cdot \cos \psi) \cdot \operatorname{tg} \delta}{\sin \alpha} \right) + \\ + b \cdot h \cdot \operatorname{ctg} \psi \cdot \mu \cdot (p + C_o - p \cdot \operatorname{tg} \psi) + \frac{1}{2} \cdot C_X \cdot \rho_X \cdot S_X \cdot v^2 + \\ + b \cdot L (h_{\text{стр}} \cdot \gamma_{\text{сп}} + p) \cdot \operatorname{tg} \delta + b \cdot h_{\text{стр}} \cdot H_{\text{кови}} \cdot (\gamma_{\text{сп}} - \gamma_{\text{в}}).$$

Для определения сопротивления копания грунта в подводных условиях модернизированным ковшом драглайна получена зависимость

$$P'_{\text{рез}} = \left[C_0 \cdot L \cdot h \cdot \frac{1}{\cos \psi} + \left(b \cdot h_c \cdot \gamma_{\text{сп}} \cdot \operatorname{tg} \delta_1 + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{\cos \alpha} \cdot a \cdot p \cdot \operatorname{tg} \delta \right) \cdot L \cdot \cos \xi \cdot \operatorname{tg} \varphi \right] \cdot \cos \psi + \\ + b \cdot L \cdot h_{\text{стр}} \cdot \operatorname{tg} \delta_1 + b \cdot h_{\text{стр}} \cdot H_{\text{кови}} \cdot (\gamma_{\text{сп}} - \gamma_{\text{в}}).$$

Из изложенного можно сделать следующие выводы:

1. Разработаны математические модели, достаточно полно отражающие физическую сущность процессов копания грунтов ковшом драглайна с учетом влияния гидростатического давления водной среды.

2. Представленные материалы могут служить основой для расчета параметров рабочих органов

землеройных машин ковшового типа, работающих в подводной среде, в том числе при значительных глубинах разработки грунта.

ЛИТЕРАТУРА

1. Недорезов И.А., Тургумбаев Ж.Ж. Исследование процесса резания грунтов под гидростатическим давлением // Строительные и дорожные машины. 1979. № 5. С. 8-9.

2. Недорезов И.А., Тургумбаев Ж.Ж. Моделирование процессов разрушения грунтов в особых условиях. Бишкек: Кыргызстан, 2000. 153 с.

3. Зеленин А.Н. Основы разрушения грунтов механическими способами. М.: Машиностроение, 1968. 376 с.

Резюме

Судағы күштің қысымымен пайда болған жүктеме жер қабатын жоғары призма тәрізді жиналудан сақтайды және су астындағы жер қабатының жаңқалары лента түрінде ұңғының жоғарғы жұмыс беттеріне судағы күштің қысымымен қатты жабысып сырғанапды.

Summary

It is possible to receive dependence resistance to cutting trips by a knife sailing excavating machine in underwater conditions, when hydrostatic pressure appointed, according to the circuit submitted in figure 2.

УДК 621.878.11

Кыргызский государственный
технический университет,
г. Бишкек

Поступила 17.03.06г.

Е. Е. ЕРГОЖИН, В. В. ЛЯПУНОВ, С. О. ЖУМАБЕКОВА,
В. А. СОЛОМИН, Г. Ж. БАЙБЕТОВА, В. Г. ЦУКЕРМАН

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРЕВРАЩЕНИЙ [(S)- α -ЦИАНО-3-ФЕНОКСИБЕНЗИЛ (1R,3R)-ЦИС-3-(2,2-ДИБРОМ- ВИНИЛ) -2,2- ДИМЕТИЛЦИКЛОПРОПАНКАРБОКСИЛАТА] В НЕОРГАНИЧЕСКОЙ МАТРИЦЕ

Синтетические пиретроиды являются одними из наиболее современных и распространенных инсектицидов, используемых в сельском хозяйстве. В частности, пиретроид дельтаметрин (технические препараты децис, декаметрин, дельтаметрин) широко применяется в Казахстане и разрешен в качестве препарата, контролирующего численность саранчи, а также для

борьбы с насекомыми в сельскохозяйственных посевах [1].

Препарат обладает невысокими токсичностью для теплокровных и стойкостью в окружающей среде, что позволяет использовать его незадолго перед уборкой урожая [2]. Однако дельтаметрин содержит бром и нитрильную группу, что потенциально при распаде молекулы может приводить