Исследования температурных характеристик твердого тела на микроуровне с помощью метода структурных единиц

А.А. Мочалов, А.А. Гайша, К.Д. Евфимко

Национальный университет кораблестроения имени адмирала Макарова, пр. Героев Сталинграда, 9, 54025 Николаев, Украина

(Получено 16.04.2014; опубликовано online – 29.11.2014)

Представлена математическая модель процесса теплопереноса в твердом теле на основе метода структурных единиц. Приведены результаты расчета термодинамических характеристик структурной единицы для кристаллических твердых тел.

Ключевые слова: Математическая модель, Твердое тело, Термодинамические характеристики.

PACS numbers: 61.50.Ah, 65.40.Ba

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время с развитием технологий, в частности, ростом вычислительных мощностей современных компьютеров стали доступны новые методы исследования твердых тел на базе математического моделирования процессов, протекающих на микроуровне. Одним из таких современных методов является метод структурных единиц[1-4], который позволяет изучать механические и энергетические свойства твердых тел с помощью теоретико-эксперимен-тального подхода средствами математического моделирования[5-8]. Важной задачей при проектировании новых материалов, отвечающих современным возрастающим стандартам качества и прочностным требованиям, является прогнозирование их термодинамических характеристик, что возможно с помощью методов математического и компьютерного моделирования.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В настоящей работе рассматривается возможность исследования термодинамических характеристик твердого тела методом структурных единиц. Цель работы – разработка процессы теплопереноса в твердых телах. Для корректного рассмотрения энергетических свойств кристаллических веществ методом структурных единиц, следует заметить, что введенные молекулярно-кинетической теорией понятия температуры, теплоемкости, теплопроводности не являются корректными при рассмотрении процесса теплопереноса в структурной единице. Это связано с тем, что уравнение теплопроводности получено для сплошных сред, а понятие теплоемкости вещества введено как количество тепла, которое необходимо подвести к единице объема вещества для повышения её температуры на 1 К. В структурной единице атомы расположены в определенных узлах в зависимости от конфигурации, поэтому понятие температуры как термодинамической характеристики состояния вещества не вполне применимо на микроуровне в силу малой величины рассматриваемых элементарных объемов. Данное затруднение при моделировании процессов возможно разрешить путем принятия некоторых упрощений, в частности распределения массы равномерно по всему элементарному объему, в зависимости от конфигурации структурной единицы, а также рассмотрения температуры именно как энергетической характеристики, характеризующей среднюю энергию в данной точке пространства.

3. РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ В СТРУКТУРНОЙ ЕДИНИЦЕ НА БАЗЕ ЯВЛЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Рассмотрим произвольную структурную единицу характеризующую твердое тело. Конфигурация структурной единицы известна заранее и позволяет учесть количественную (массовую) и пространственную составляющие модели. Структурная единица разбивается на несколько элементарных объемов последовательно, их количество зависит от вычислительных мощностей. Одну из граней структурной единицы приведем в контакт с термостатом, температура которого от температуры данного тела T_0 будет отличаться на ΔT. Для расчета энергетических свойств в первую очередь необходимо найти зависимость изменения температуры противоположной грани структурой единицы от времени. Будем считать, что размер структурной единицы (длина ребра) известен при данной температуре T_0 и равен a_0, известна плотность данного тела ρ, его теплопроводность λ и теплоемкость C_0.

Структурная единица представляет собой совокупность атомов расположенных в узлах кристаллической структуры и на ее гранях (рис 1), таким образом масса ее сосредоточена в определенных точках, характерных для соответствующей конфигурации.

Между атомами находится вакуум, это дает возможность говорить, что данное пространство в структурной единице не является сплошной средой, хотя имеет плотность ρ, как и твердое тело, содержащее данную структурную единицу. Поскольку уравнение теплопроводности выведено для сплошных сред [9], для того, чтобы можно было воспользоваться физическими понятиями, описывающими процесс описывающими процесс теплопроводности, необходимо равномерно распределить массы атомов по всему объему, либо по элементарным объемам, содержащим определённые массы атомов или молекул. Разобьем структурную единицу на N элементарных объемов. Изменение температуры со временем в первом элементарном объеме запишется так:

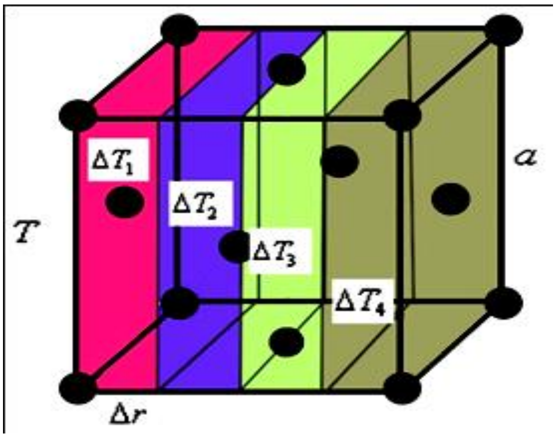

Рис. 1 – Структура гранецентрированной решетки

описывающими процесс теплопроводности, необходимо равномерно распределить массы атомов по всему объему, либо по элементарным объемам, содержащим определённые массы атомов или молекул. Разобьем структурную единицу на N элементарных объемов. Изменение температуры со временем в первом элементарном объеме запишется так:

$$\frac{d\left(C_1 m \Delta T_1''\right)}{d\tau} = \frac{\lambda a_0^2}{\Delta r}\left(T_1' - T_1''\right)$$

λ – коэффициент теплопроводности;
a_0 – размер структурной единицы при начальной температуре;

T_1' – температура термостата (постоянная);

T_1'' – температура грани на выходе из первого элементарного объема;
C_1 – теплоемкость единицы объема;

$\Delta r = \dfrac{a_c}{N}$ – длина элементарного объема.

Перейдем к приращениям T_1' и T_1'', расписав выражение (1), получим:

$$C\rho a_0^2 \Delta r \frac{d\Delta T_1''}{d\tau} = \frac{\lambda a_0^2}{\Delta r}\left(\Delta T_1' - \Delta T_1''\right) \qquad (2)$$

с начальными условиями $\tau = 0,\ \Delta T''' = 0$.

Сгруппировав выражение (2) и постоянную $A = \dfrac{\lambda}{C\rho\Delta r^2}$, получим:

$$\frac{d\Delta T'''}{d\tau} + A\Delta T''' = A\Delta T_1' \qquad (3)$$

Решив это уравнение, получим изменение температуры на выходе из элемента 1 (т.е. температуру в плоскости 1 отстоящей от грани с температурой T_1' на Δr)

$$\Delta T_1(\tau) = \Delta T_1\left(1 - e^{-A\tau}\right) \qquad (4)$$

Для следующего элементарного объема температура на выходе из первого элементарного объема будет начальной температурой. В приращениях это запишется так:

$$\Delta T_1'' = \Delta T_2'$$

для i-го элемента объема:

$$\Delta T_{i-1}'' = \Delta T_i'$$

Тогда уравнение для второго элемента объема можно записать следующим образом:

$$\frac{d\Delta T_2'}{d\tau} + AT_2'' = A\Delta T_1'' \qquad (5)$$

Решение решением этого уравнения будет:

$$\Delta T_2'' = \Delta T_2'\left[1 - \frac{e^{-A\tau}}{(2-1)!}(\tau A + 1)\right] \qquad (6)$$

для следующего:

$$\Delta T_3'' = \Delta T_3'\left[1 - \frac{1}{(2-1)!}\frac{1}{(3-1)!}e^{-A\tau}\left(\tau^2 A^2 + \tau A + 2\right)\right] \qquad (7)$$

далее, для следующего объема:

$$\Delta T_4'' = \Delta T_4'\left[1 - \frac{1}{(2-1)!}\frac{1}{(3-1)!}\frac{1}{(3-1)!}e^{-A\tau} \times \right.$$
$$\left. \times\left(\tau^2 A^2 + 3\tau^2 A^2 + 6\tau A + 6\right)\right] \qquad (8)$$

Найдём градиент изменения среднеинтегральной температуры для каждого элемента со временем:

$$\begin{aligned}
grad\Delta T_1''{}_{(\tau)} &= \frac{-\Delta T_1'}{\Delta r}\frac{e^{-A\tau}}{1!}\left(A\tau\right)^2 \\
grad\Delta T_2''{}_{(\tau)} &= \frac{-\Delta T_2'}{\Delta r}\frac{e^{-A\tau}}{1!2!}\left(A\tau\right)^3 \\
grad\Delta T_3''{}_{(\tau)} &= \frac{-\Delta T_2'}{\Delta r}\frac{e^{-A\tau}}{1!2!3!}\left(A\tau\right)^4 \\
grad\Delta T_4''{}_{(\tau)} &= \frac{-\Delta T_4'}{\Delta r}\frac{e^{-A\tau}}{1!2!3!4!}\left(A\tau\right)^5
\end{aligned} \qquad (9)$$

Скорость изменения температуры на выходе из каждого элемента можно представить как:

$$\begin{aligned}
\frac{d\Delta T_1''}{d\tau} &= A\Delta T_1' e^{-A\tau} \\
\frac{d\Delta T_2''}{d\tau} &= A\Delta T_2' e^{-A\tau} A\tau \\
\frac{d\Delta T_3''}{d\tau} &= A\Delta T_3' \frac{e^{-A\tau}}{2!}(A\tau)^2 \\
\frac{d\Delta T_4''}{d\tau} &= A\Delta T_4' \frac{e^{-A\tau}}{2!3!}(A\tau)^3
\end{aligned} \qquad (10)$$

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

С помощью приведенной выше модели были получены температурные характеристики меди (исходные данные $\lambda = 401$ Вт/(м·К), $a_0 = 3{,}615 \cdot 10^{-10}$ м, $T_1' = 500$ К, $C = 385$ Дж/(кг·К), $\rho = 8920$ кг/м^3), результаты компьютерного эксперимента представлены на рисунках 2-4: изменение температуры на выходе из каждого элемента структурной единицы, градиент изменения среднеинтегральной температуры для каждого элемента, распределение температуры по объему структурной единицы для определенных моментов теплового процесса.

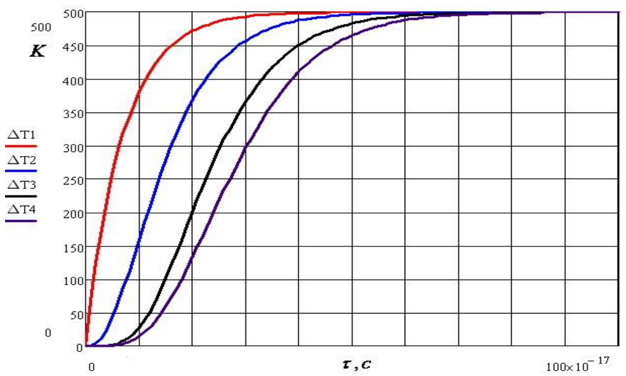

Рис. 2 – Изменение температуры на выходе из каждого элемента (массообъема) структурной единицы

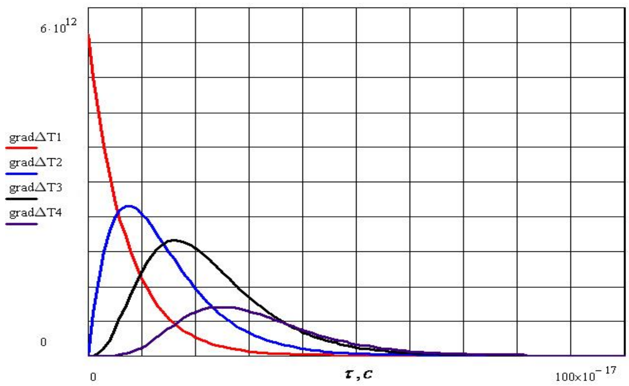

Рис. 3 – Градиент изменения среднеинтегральной температуры для каждого элемента структурной единицы

Из рис 2 следует вывод, что скорость распространения изотерм в пространстве структурной единицы различна, что означает, что коэффициенты теплопроводности и температуропроводности существенно зависисят от температуры вещества, и данная модель позволяет исследовать кинетику этих коэффициентов в зависимости от температуры и времени.

Градиент температуры (рис. 3) первого массобъема структурной единицы достигает больших значений, затем уменьшается из-за изменения температуры на выходе из первого и последующих массообъемов со временем.

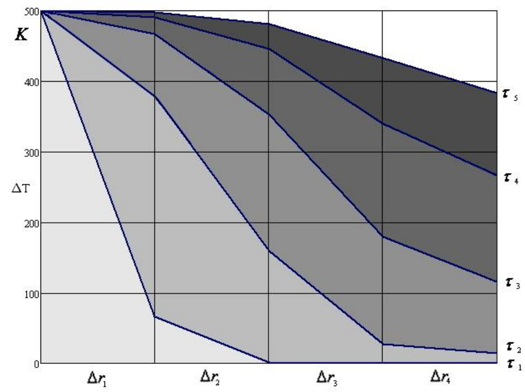

Рис. 4 – Распределение температуры в структурной единице по 4 массообъемам для моментов времени теплового процесса $\tau_1 = 10^{-17}$ с, $\tau_2 = 10^{-16}$ с, $\tau_3 = 2 \cdot 10^{-16}$ с, $\tau_4 = 3 \cdot 10^{-16}$ с, $\tau_5 = 4 \cdot 10^{-16}$ с.

На рис. 4 показано распределение относительной температуры в структурной единице по массообъемам для 5 различных моментов времени теплового процесса.

Предложенный подход позволяет в дальнейшем рассчитать изменение и пространственное распределение значений теплоемкости, теплопроводности и других термодинамических характеристик структурной единицы и всего кристаллического твердого тела в в зависимости от его температуры в произвольный момент теплового процесса.

Дослідження температурних характеристик твердого тіла на мікрорівні за допомогою методу структурних одиниць

О.О. Мочалов, О.О. Гайша, К.Д. Евфімко

Національний університет кораблебудування ім. адмірала Макарова пр. Героїв Сталінграда 9, 54025 Миколаїв, Україна

Представлено математичну модель процесу теплопереносу в твердому тілі на основі методу структурних одиниць. Приведені результати розрахунку термодинамічних характеристик структурної одиниці для кристалічних твердих тел.

Ключові слова: Математична модель, Тверде тіло, Термодинамічні характеристики.

Studies of the Temperature Characteristics of Solid at the Microlevel by the Method of Structural Units

A.A. Mochalov, A.A. Gaisha, K.D. Evfimko

Admiral Makarov National University of Shipbuilding, 9, Geroev Stalingrada Ave., 54025 Nikolaev, Ukraine

The mathematical model of the heat transfer process based on the structural unit method is proposed. Calculation results of the model equations of thermodynamic characteristics of structural unit for solids are represented.

Keywords: Mathematical model, Solid, Thermodynamic characteristics.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А.А. Мочалов, А.А. Гайша, К.Д.Евфимко, *Журнал нано-електрон. фіз.* **1** № 1, 70 (2009) (A.A. Mochalov, A.A. Gaisha, K.D. Evfimko, *J. Nano- Electron. Phys.* **1** No1, 62 (2009)).
2. К.Д. Євфимко, *Матеріали науково-технічної конференції, присвяченої 90-річчю Національного Університету Кораблебудування*, 57 (Миколаїв: НУК: 2010).
3. К.Д. Євфимко, *Теоретичні проблеми та прикладні аспекти сучасної технічної фізики*, 30 (Миколаїв: НУК: 2010).
4. О.О. Мочалов, К.Д. Євфимко, О.О. Гайша, *Математичне моделювання* № 2, 25 (2011)
5. А.А. Мочалов, К.Д. Евфимко, *Вісник СумДУ* № 1, 156 (2008).
6. А.М. Кривцов, Н.В. Кривцова *Дальневосточный МЖ ДВО РАН* **3** № 2, 254 (2002).
7. В.Г. Лисиенко, В.В. Волков, А.Л. Гончаров, *Математическое моделирование теплообмена в печах и агрегатах* (Киев: Наукова думка: 1984).
8. В.П. Цымбал, *Математическое моделирование металлургических процессов* (Металлургия: Москва: 1986).
9. Л.М. Анищенко, С.Ю. Лавринюк, *Математические основы проектирования высокотемпературных технологических процессов* (Москва: Машиностроение: 1986).
10. М. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твёрдого тела,* (М.: Мир: 1977).