

УДК 53.092+519

DOI: 10.15587/2313-8416.2019.156136

ИССЛЕДОВАНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ СТРУКТУРНЫХ ЕДИНИЦ

© А. А. Мочалов, Н. А. Шаповал, К. Д. Евфимко, С. С. Коваль

В статье предложена методика расчета коэффициента теплового расширения с использованием метода структурных единиц, которая позволяет рассчитать и исследовать зависимость коэффициентов объемного сжатия и теплового расширения вблизи точки абсолютного нуля от свойств структурных единиц и термодинамических параметров вещества. В статье приведены расчеты на примере некоторых металлов. Полученные результаты могут быть использованы в различных исследованиях веществ вблизи температуры абсолютного нуля

Ключевые слова: структурная единица, коэффициент теплового расширения, межатомное расстояние, смещение атомов

1. Введение

Промышленность сегодня нуждается в новых конструкционных материалах устойчивых к динамическим нагрузкам с новыми физическими свойствами. В этих условиях задача фундаментальной и прикладной науки состоит в разработке новых методов исследования, позволяющих совмещать математическое моделирование физических свойств материалов с экспериментальными исследованиями. Это становится актуальным при исследовании материалов на наноразмере.

2. Анализ литературных данных и постановка проблемы.

Коэффициент линейного расширения в общем случае зависит от температуры [1, 2]. Эмпирически установлено, что одно и то же тело при высоких температурах испытывает большее тепловое расширение, чем при низких температурах [3, 4]. Но в большинстве случаев этим пренебрегают и считают, что изменение размеров тела пропорционально температуре [5, 6]. Учитывая то, что статистическая ошибка при проведении эксперимента зависит от методики измерения величины, можно получить различные значения в диапазоне 20–30 %, это и просматривается в литературных источниках [7, 8]. Исследование материалов на наноразмере подразумевает точное знание этой величины [9, 10]. Экспериментально достаточно трудно исследовать физические свойства на таком уровне. Поэтому необходимо проводить исследования свойств материалов, с помощью математического моделирования. Мы предлагаем исследовать свойства материалов на структурной единице данного вещества, что упрощает расчеты.

В диапазонах температуры деформации (отсутствуют исследования вблизи температуры абсолютного нуля), в которых известны экспериментальные значения данных величин дает возможность корректировать постоянные величины, входящие в потенциал и силы межатомного взаимодействия.

3. Цель и задачи исследования

Цель работы – разработать методику расчета коэффициента линейного расширения методом структурных единиц, которая позволит произвести

исследования физических свойств вещества при температуре абсолютного нуля.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Разработать методику расчета коэффициента линейного расширения, которая даст возможность исследовать физические свойства вещества при различных значениях температуры.
2. Провести исследования теплового расширения твердых тел в зависимости от температуры, что позволит учитывать эти параметры при конструировании установок и машин.

4. Методика исследования коэффициента теплового расширения методом структурных единиц

С помощью разработанного метода структурных единиц выделим в элементе вещества структурную единицу. Составим для нее математическую модель расчета коэффициента теплового расширения β и исследуем его на базе структурных единиц.

Будем считать, что объем структурной единицы в приращениях при произвольной температуре T

$$V_{cm.ed.} = r_0^3 \left(1 + 3\Delta r_T \right), \quad (1)$$

где r_0 – межатомное расстояние (расстояние между атомами) в структурной единице при $T=0$ К;

$$\Delta r_T = \frac{\Delta r_T}{r_0} - \text{относительное смещение атомов}$$

из положения равновесия в структурной единице при температуре T .

Исходя из того, что масса атомов данного вещества и масса структурной единицы не зависит от температуры T , $m_{cm.ed.} = const$, $m_T = const$, рассмотрим взаимосвязь массы тела и массы структурной единицы:

$$m_{cm.ed.} = m_{am} \cdot n_{am}, \quad (2)$$

где m_{am} – масса атома в объеме структурной единицы данного вещества;

n_{am} – число атомов, масса которых распределена в структурной единице.

Предположим, что тело состоит из $N_{cm.ед.}$, тогда масса тела должна быть

$$m_T = m_{am} \cdot n_{am} \cdot N_{cm.ед.} \quad (3)$$

При этом объем тела при любой температуре будет равен

$$V_T = V_{cm.ед.} \cdot N_{cm.ед.} = r_0^3 (1 + 3\Delta r_T) N_{cm.ед.}$$

Плотность тела при произвольной температуре T , с учетом формул (1–3) запишется так:

$$\begin{aligned} \rho_T &= \frac{m_T}{V_T} = \frac{m_{am} \cdot n_{am} \cdot N_{cm.ед.}}{V_{cm.ед.} \cdot N_{cm.ед.}} = \\ &= \frac{m_{am} \cdot n_{am}}{V_{cm.ед.}} = \frac{m_{am} \cdot n_{am}}{r_0^3 (1 + 3\Delta r_T)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Из соотношения (4) следует, что плотность вещества ρ_0 при $T=0$ К, связана с плотностью тела ρ_T , при произвольной температуре T , соотношением

$$\rho_T = \rho_0 \frac{1}{(1 + 3\Delta r_T)}, \quad (5)$$

где $\rho_0 = \frac{m_{am} \cdot n_{am}}{r_0^3}$.

Выражение (5) дает возможность, при известной плотности ρ_T , при температуре T , найти приращение межатомного расстояния Δr_T при этой температуре

$$\Delta r_T = \frac{1}{3} \left(\frac{\rho_0}{\rho_T} - 1 \right) = \frac{1}{3} \left(\frac{m_{am} \cdot n_{am}}{r_0^3 \rho_T} - 1 \right), \quad (6)$$

Приведем расчеты для некоторых металлов при $T=300$ К [4] (табл. 1).

Таблица 1

Плотность, относительное смещение атомов из положения равновесия, приращение межатомного расстояния для некоторых металлов

Название металла	Плотность вещества, $\rho_0 = \frac{m_{am} \cdot n_{am}}{r_0^3}$, кг/м ³	Относительное смещение атомов из положения равновесия (Δr)	Приращение межатомного расстояния (Δr_T), м
Железо	$1,6 \cdot 10^4$	0,03514	$1,007 \cdot 10^{-10}$
Медь	$1,79 \cdot 10^4$	0,03489	$9,999474 \cdot 10^{-12}$
Алюминий	$5,03 \cdot 10^3$	0,0307	$1,13497 \cdot 10^{-11}$
Вольфрам	$2,19 \cdot 10^4$	0,03298	$9,999536 \cdot 10^{-12}$
Молибден	$1,45 \cdot 10^4$	0,0357	$9,996 \cdot 10^{-12}$

Для более наглядного примера приведем график зависимости приращения межатомного расстояния от плотности металла (рис. 1).

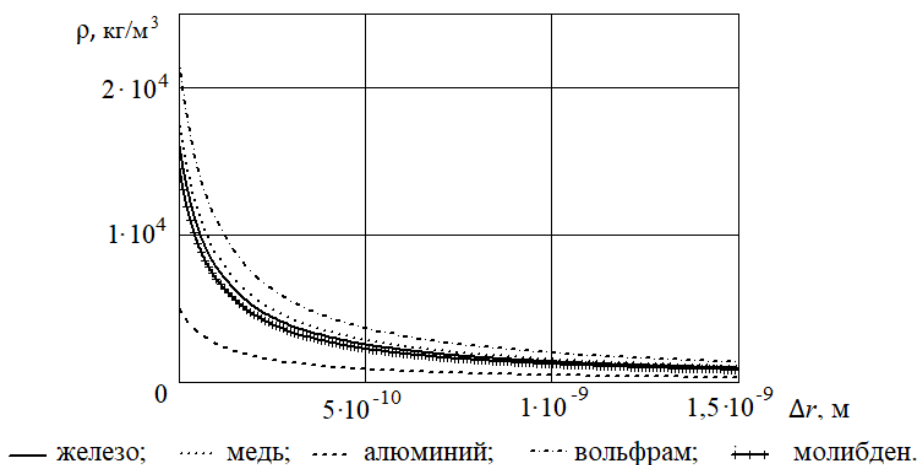


Рис. 1. График зависимости приращения межатомного расстояния от плотности металла на примере железа, меди, алюминия, вольфрама, молибдена

Согласно выражения (6) и расчетов величина Δr_T растет с ростом температуры, а при $\rho_0 = const$ величина ρ_T уменьшается почти в 2 раза.

В свою очередь относительное смещение атомов из положения равновесия Δr_T , при $T > T(0)$, зависит от коэффициентов теплового расширения β и объемного сжатия k_p (табл. 2) [4].

Таблица 2

Коэффициент теплового расширения металлов

t, °C	$\beta \cdot 10^6$	t, °C	$\beta \cdot 10^6$	t, °C	$\beta \cdot 10^6$	t, °C	$\beta \cdot 10^6$	t, °C	$\beta \cdot 10^6$	t, °C	$\beta \cdot 10^6$
Алюминий		Железо		Кобальт		Молибден		Родий		Сурьма	
-100	19,5	0	11,30	0	12,0	0	5,10	0	7,85	0	9,2
0	22,8	100	12,15	100	12,5	100	5,19	200	8,71	100	9,4
100	23,7	200	12,70	200	13,0	200	5,28	400	9,46	200	9,6
200	24,5	400	13,80	300	13,5	300	5,39	600	10,14	300	9,8
300	25,4	600	14,50	400	13,9	400	5,48	800	10,71	400	10,0
400	26,2	800	14,80	500	14,4	500	5,59	1000	11,21	500	10,2
500	27,1	Золото		Магний		600	5,68	1200	11,62	600	10,3
600	27,9	0	14,15	-100	24,12	800	5,87	1400	11,94	Титан	
Бериллий		100	14,32	0	25,07	Никель		1500	12,07	0	7,7
0	10,5	200	14,51	100	26,00	0	13,40	Свинец		100	8,1
100	11,7	400	14,96	200	27,00	100	13,60	-250	25,1	200	8,5
200	12,8	600	15,49	400	29,83	200	14,00	-200	26,5	400	9,2
300	13,7	800	16,12	600	31,71	250	14,27	-100	27,3	600	10,0
400	14,5	1000	16,80	Марганец		300	14,60	0	28,3	700	10,4
500	15,2	Иридий		0	22,0	350	14,97	100	29,2	Хром	
600	15,7	0	6,50	200	22,2	400	14,98	200	30,3	-100	5,10
Висмут		100	6,65	400	23,0	600	15,56	300	31,3	0	5,88
0	15,4	200	6,80	600	24,0	800	16,13	Серебро		100	6,61
Вольфрам		400	7,11	800	26,0	Олово		-100	18,50	200	7,28
0	4,30	600	7,41	Медь		0	21,0	0	19,50	400	8,40
200	4,44	800	7,72	0	16,70	50	23,5	100	19,62	600	9,22
400	4,60	Кадмий		100	17,06	100	26,2	200	19,79	700	9,40
600	4,72	-50	28,3	200	17,42	150	28,9	300	20,00	Цинк	
800	4,86	0	29,0	400	18,14	200	31,6	400	20,30	-200	22
1000	5,01	50	29,7	600	18,86	Платина		500	20,60	-100	28
1200	5,15	100	30,4	800	19,58	0	8,95	600	21,00	0	30
1500	5,35	150	31,1	1000	20,30	100	9,10	700	21,40	100	32
1700	5,51	200	31,8			200	9,20	800	21,80	200	34
1900	5,60	250	32,4			400	9,45	900	22,40	300	36
2100	5,80					600	9,65			400	38
Галлий						800	9,90				
0	18,1					1000	10,15				
						1100	10,35				

Будем считать, что смещение атомов из положения равновесия Δr , соответствует соотношению [2]:

$$\Delta r = r_0 (\beta T - k_p p). \tag{9}$$

Учитывая то, что величины β , k_p , T , p , r_0 есть положительные величины по физическому определению, значение Δr может принимать значения $\pm \Delta r$, зависимость от величин входящих в это выражение. Температура T принимает значения $0 \div \infty$, давление (внешнее) $0 \rightarrow \infty$, $\beta = f(T, p)$, $k_p = f(T, p)$. То есть значение Δr может быть больше или меньше нуля в зависимости от величин β , k_p , T , p .

При $T=0$ К и $\Delta r = 0$ силы межатомного взаимодействия скомпенсированы $F^-(0)=F^+(0)$ в отсутствии внешней силы или давления p_0 . Их можно выразить, используя потенциал межатомного взаимодействия $W(\Delta r)$

$$W(\Delta r) = \varepsilon (e^{-2a\Delta r} - 2e^{-a\Delta r}),$$

$$-F(\Delta r) = \frac{dW(\Delta r)}{d\Delta r} = 2a\varepsilon (e^{-2a\Delta r} - e^{-a\Delta r}), \tag{10}$$

где a – постоянная для данной структурной единицы; ε – энергия сублимации структурной единицы. Подставим значения Δr из выражения (9) в выражение (10), преобразовав, получим

$$\Delta W(p, T) = \varepsilon e^{2ak_p p} \left[(e^{-2a\beta T} - 2e^{-a\beta T} e^{ak_p p}) + 1 \right]$$

$$F(p, T) = 2a\varepsilon e^{2ak_p p} (e^{-2a\beta T} - e^{-a\beta T} e^{ak_p p}) \tag{11}$$

Рассмотрим взаимосвязь β и k_p при произвольной температуре от 0 К до $T = 2007$ К, например, для железа при $T = 0$ К $\frac{\beta^+}{k_p} = \frac{p}{T}$, $\Delta r = 0$, то $\frac{\beta^+}{k_p} \rightarrow \infty$.

Из этого следует, что если $p_0=0$, то $k_p^+(0) \rightarrow 0$.

При $p=p_0$ и $T=0$ К, величина $\Delta r = \frac{-\Delta r^-}{r_0}$ стано-

вится отрицательной, так как начало отсчета r_0 , то в этом диапазоне отрицательных $\Delta r^- < 0$, структурная единица сжимается при начальной температуре 0 К, при этом над силами отталкивания, действующих между атомами, совершается работа $A_{am}^- = F^-(\Delta r^-) \Delta r^- = p_0 \Delta V^-(\Delta r^-)$. Работу сил межатомного отталкивания перейдет в тепловую энергию и объем структурной единицы нагреется до температуры $T^-(\Delta r^-) = \frac{p_0 \Delta V^-(\Delta r^-)}{k_B} > 0$. Теперь от сжатой

структурной единицы отведем это тепло, т. е. охладим ее до температуры $T=0$ К. Система структурной единицы в этом состоянии будет находиться в метастабильном состоянии с отрицательной потенциальной энергией. Сбросив давление p_0 до 0, система структурной единицы должна перейти в равновесие состояние при $T=0$ К. На это должна будет израсходоваться потенциальная энергия сжатия (система расширяется за счет потенциальной энергии), но так как она находится при $T=0$ К, то температура ее должна понизиться, т. е. стать ниже температуры абсолютного нуля $\Delta T < T$ (0 К) (рис. 2) на величину $\Delta T^-(\Delta r^-)$, при Δr^- соответствующем $p=p_0$.

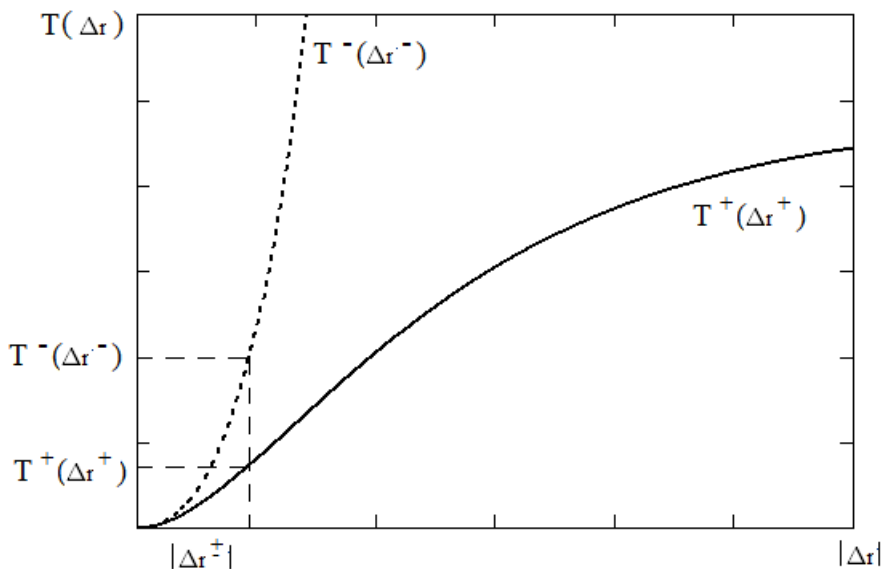


Рис. 2. График зависимости температуры $T^-(\Delta r^-)$ при сжатии структурной единицы при $T=0$ К, и $T^+(\Delta r^+)$ при растяжении структурной единицы при $T \geq 0$ К (модуль $|\Delta r|$)

5. Результаты исследования

Используя выше сказанное и взаимосвязь $T(\Delta r) = f(\Delta r)$ (рис. 2) можно вычислить коэффициенты теплового расширения β для произвольной температуры $T(\Delta r)$, как функция $\beta = f(T)$, $\beta = f(\Delta r)$ или $\beta = f(\Delta W(\Delta r))$ при различных значениях внешнего давления (воздействие p) p .

Используя выражения (9), (11) выразим значение коэффициента β_i , для произвольного шага Δr , где $i = 0, 1, 2, \dots, m$. Получим

$$\beta_i = \frac{\Delta r}{r_0 \cdot \varepsilon} \left[\frac{k_B}{e^{-2a\Delta r_i} - e^{-a\Delta r_i} - 2(e^{-2a\Delta r_i} - e^{-a\Delta r_i})} \right],$$

$$\beta_i = \frac{\Delta r}{r_0 \cdot \varepsilon} \left[\frac{k_B}{e^{-a\Delta r_i} - e^{-2a\Delta r_i}} \right],$$

где Δr_i – смещение атомов структурной единицы из положения равновесия r_0 на i -том шаге.

С помощью полученного уравнения рассчитаем значение коэффициента теплового (линейного) расширения. Расчет представим графически (рис. 3).

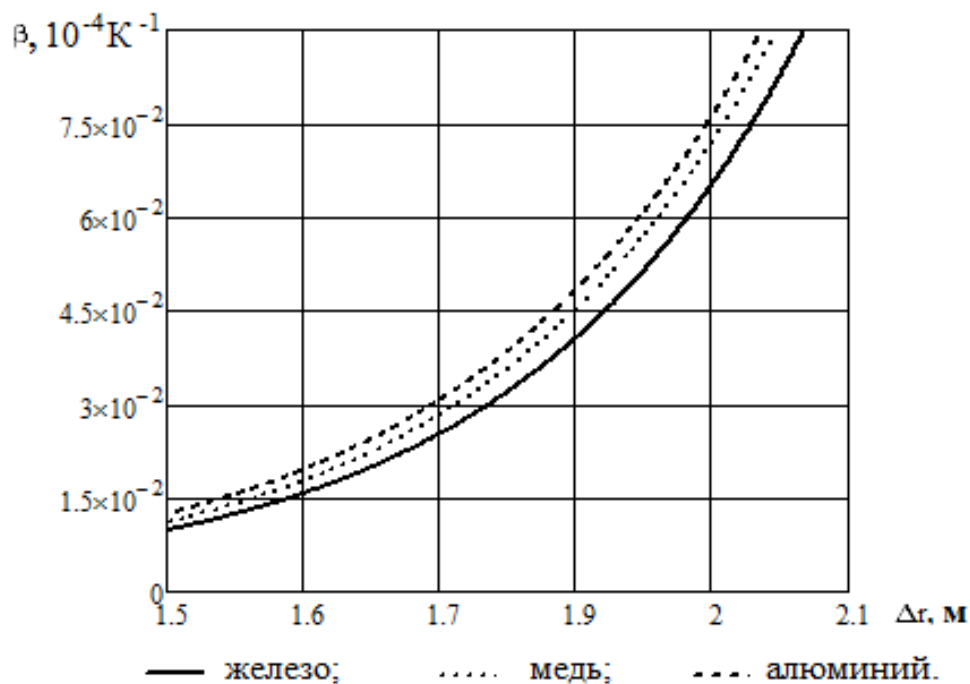


Рис. 3. График зависимости коэффициента линейного расширения от смещения атомов структурной единицы из положения равновесия на примере железа, меди и алюминия

6. Выводы

Согласно проведенным исследованиям можно сделать следующие выводы:

1. Данная методика расчета коэффициента линейного расширения методом структурных единиц позволяет произвести исследования физических свойств вещества при различных значениях температуры, а также вблизи температуры абсолютного нуля. Это даст возможность получить новые материалы устойчивые к динамическим нагрузкам с новыми физическими свойствами.

2. В математическом аппарате данного исследования некоторые параметры (a , ε) имеют постоянные значения, но не известно при каких параметрах они определялись. С помощью данной методики можно построить функцию коррелирующую эти величины.

3. Проведенные исследования теплового расширения твердых тел могут учитываться при конструировании всех установок и машин, работающих в переменных температурных условиях: трамвайные и железнодорожные рельсы, стальные мостовые конструкции, линии газопроводов, оси точных механизмов, подшипники, пластины полупроводников, детали и узлы механизмов и т. д.

Литература

1. Сивухин Д. В. Общий курс физики. Термодинамика и молекулярная физика. Т. 2. Москва: Наука, 1990. 592 с.
2. Курс Фізики / Зачек І. Р. та ін.; ред. Лопатинський І. С. Львів, 2002. 376 с.
3. Игнатова А. М. Исследование влияния коэффициентов теплового расширения на сцепляемость синтетического минерального сплава с металлической арматурой // Фундаментальные исследования. 2013. № 10-5. С. 982–985.
4. Ojovan, M. (2008). Configurons: Thermodynamic Parameters and Symmetry Changes at Glass Transition. Entropy, 10 (3), 334–364. doi: <http://doi.org/10.3390/e10030334>
5. Resnick R., Halliday D. Podstawy fizyki. T. I (IX). Warszawa: Państwowe Wydawnictwo Naukowe, 1993.

6. Милн-Томсон Л. М., Комри Л. Дж. Четырехзначные математические таблицы. Москва: Наука, 1964. 245 с.
7. Мочалов А. А., Гайша А. А., Евфимко К. Д. Динамика деформации структурной единицы твердого тела от внешнего воздействия // Журнал нано- та електронної фізики. 2009. Т. 1, № 1. С. 70–79.
8. Сена Л. А. Единицы физических величин и их размерности. Москва: Наука, 1977. 288 с.
9. Мочалов А. А., Гайша А. А., Евфимко К. Д. Исследования температурных характеристик твердого тела на микроуровне с помощью метода структурных единиц // Журнал нано- та електронної фізики. 2014. Т. 6, № 4. С. 76–80.
10. Varshneya A. K. Fundamentals of inorganic glasses. Sheffield: Society of Glass Technology. 2006.

Дата надходження рукопису 03.01.2019

Мочалов Александр Александрович, доктор технических наук, заведующий кафедрой, директор, Кафедра физики, Институт заочного и дистанционного образования, Национальный университет кораблестроения им. адм. Макарова, пр. Героев Украины, 9, г. Николаев, Украина, 54025

Шановал Наталья Александровна, кандидат технических наук, доцент, кафедра физики, Национальный университет кораблестроения им. адм. Макарова, пр. Героев Украины, 9, г. Николаев, Украина, 54025

Евфимко Константин Дмитриевич, старший преподаватель, кафедра физики, Национальный университет кораблестроения им. адм. Макарова, пр. Героев Украины, 9, г. Николаев, Украина, 54025
E-mail: evfimko.k@gmail.com

Коваль Сергей Станиславович, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра физики, Национальный университет кораблестроения им. адм. Макарова, пр. Героев Украины, 9, г. Николаев, Украина, 54025
E-mail: sergiy.koval@nuos.edu.ua