

**В. И. БАЙКОВ
Н. В. ПАВЛЮКЕВИЧ
А. К. ФЕДОТОВ, А. И. ШНИП**

ТЕПЛОФИЗИКА

2

Минск 2014

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК БЕЛАРУСИ
Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова

**В. И. Байков, Н. В. Павлюкевич,
А. К. Федотов, А. И. Шнип**

ТЕПЛОФИЗИКА

Том 2

**ТЕРМОДИНАМИКА НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ,
ТЕОРИЯ КОНВЕКТИВНОГО ТЕПЛООБМЕНА, ПЕРЕНОС
ЭНЕРГИИ ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ, ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА
И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ**

**Под редакцией
академика НАН Беларуси
О. Г. Пенязькова**

Минск 2014

УДК 536:533.7

Байков В. И. Теплофизика. В 2 т. Т. 2. Термодинамика необратимых процессов, теория конвективного теплообмена, перенос энергии теплового излучения, процессы переноса и фазовые превращения в твердых телах / В. И. Байков, Н. В. Павлюкевич, А. К. Федотов, А. И. Шнип. – Минск: Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси, 2014. – 370 с. – ISBN 978-985-6456-95-7.

Во втором томе предлагаемого издания представлены конкретные разделы теории тепло- и массообмена в различных средах, а также изложена феноменологическая теория неравновесных явлений – термодинамика необратимых процессов.

Книга предназначена для научных работников, инженеров, магистрантов, аспирантов и студентов, специализирующихся в области теплофизики.

Табл. 5. Ил. 119. Библиогр. 44 назв.

Рецензенты:

доктор физико-математических наук С. П. Фисенко
доктор физико-математических наук В. Т. Борухов

ISBN 978-985-6456-95-7

© Институт тепло- и массообмена
им. А. В. Лыкова НАН Беларуси,
2014

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	7
Глава 1. Термодинамика необратимых процессов	8
1.1. Уравнения баланса и законы сохранения различных величин.....	8
1.2. Уравнения баланса массы многокомпонентной смеси.....	16
1.3. Уравнения баланса импульса.....	22
1.4. Уравнения баланса кинетической энергии.....	36
1.5. Уравнения баланса потенциальной энергии.....	39
1.6. Уравнение баланса механической энергии.....	42
1.7. Локальные формы первого и второго начал термодинамики.....	45
1.8. Локальное равновесие.....	47
1.9. Сохранение энергии и уравнения баланса внутренней энергии.....	50
1.10. Уравнения баланса энтропии. Производство энтропии.....	53
1.11. Линейные конститутивные законы. Соотношения взаимности Онзагера. Принцип Кюри.....	56
1.12. Изотропный ньютоновский континуум.....	59
1.13. Об уравнении теплопроводности в средах с памятью.....	61
<i>Литература</i>	64
<i>Приложение</i>	65
Глава 2. Основы теории конвективного теплообмена	71
2.1. Общие положения теории переноса.....	72
2.1.1. Тензор напряжений и вектор теплового потока.....	72
2.1.2. Уравнения баланса.....	73
2.1.3. Конститутивные уравнения.....	74
2.1.4. Система дифференциальных уравнений переноса.....	77
2.1.5. Краевые условия.....	80
2.1.6. Уравнения переноса в координатной форме.....	81
2.1.7. Безразмерная форма уравнений переноса. Критерии подобия.....	83

2.2. Базовые поля течений вязкой жидкости.....	87
2.2.1. Слоистые течения.....	88
2.2.2. Течение Пуазейля и Куэтта.....	89
2.2.3. Течение Хагена – Пуазейля в трубе.....	91
2.2.4. Установившееся течение между двумя вращающимися коаксиальными цилиндрами.....	93
2.2.5. Плоская стенка в жидкости, внезапно приведенная в движение.....	97
2.2.6. Неслоистые течения. Плоское течение вблизи критической точки.....	98
2.3. Задача теплопроводности в твердом теле при граничном условии 3-го рода. Регулярный режим.....	105
2.4. Элементы теории пограничного слоя.....	109
2.4.1. Понятие о пограничном слое. Уравнения пограничного слоя.....	109
2.4.2. Пограничный слой на плоской пластине.....	113
2.4.3. Сопротивление трения.....	116
2.4.4. Толщина пограничного слоя.....	118
2.5. Системы уравнений ламинарного конвективного теплопереноса.....	119
2.5.1. Уравнения теплового пограничного слоя.....	120
2.5.2. Аналогия Рейнольдса.....	122
2.5.3. Свободная конвекция. Уравнения Буссинеска для свободно-конвективного теплообмена. Критерии подобия для свободной конвекции.....	124
2.5.4. Уравнения конвективного теплопереноса в каналах.....	129
2.6. Конвективный теплообмен при обтекании плоской пластины....	132
2.7. Свободно-конвективный теплообмен около вертикальной пластины.....	135
2.8. Конвективный теплообмен при течении жидкости в круглой трубе при постоянном тепловом потоке на стенке.....	138
2.9. Теплообмен в круглой трубе при постоянной температуре стенки (задача Гретца – Нуссельта).....	142
2.10. О сопряженных задачах конвективного теплообмена.....	150
2.11. Элементы теории турбулентного переноса.....	155
2.11.1. Ламинарные и турбулентные течения. Переход к турбулентности.....	155
2.11.2. Уравнения Рейнольдса осредненного турбулентного течения.....	159
2.11.3. Замыкание уравнений Рейнольдса. Модели турбулентности.....	163
2.11.4. k - ϵ -модель турбулентности.....	169
<i>Литература</i>	173

Глава 3. Основы теории переноса энергии теплового излучения.....	175
3.1. Характеристики поля излучения.....	175
3.2. Уравнение переноса энергии излучения в поглощающих и рассеивающих средах.....	178
3.3. Радиационные свойства реальных тел. Закон Кирхгофа.....	183
3.4. О теплообмене излучением между поверхностями. Угловые коэффициенты.....	185
<i>Литература</i>	191
Глава 4. Процессы переноса в твердых телах.....	192
4.1. Атомное строение кристаллов.....	192
4.2. Зонная модель кристаллов.....	210
4.2.1. Классическая модель свободных электронов (модель Друде – Лорентца). Теплопроводность электронного газа. Закон Видемана – Франца.....	211
4.2.2. Квантовая теория свободных электронов (модель Зоммерфельда).....	218
4.2.3. Зонная модель электронов в кристаллах.....	222
4.2.4. Зонная структура полупроводников.....	230
4.3. Теплоемкость и перенос тепла в кристаллах.....	235
4.3.1. Зависимость удельной теплоемкости от температуры.....	236
4.3.2. Тепловое расширение кристаллов.....	242
4.3.3. Теплопроводность кристаллической решетки.....	247
4.3.4. Тепловые свойства электронного газа.....	251
4.4. Диффузия (массоперенос) в кристаллах.....	254
4.4.1. Общие сведения о диффузии.....	255
4.4.2. Кинетика процессов самодиффузии и диффузии примесей в кристаллах.....	263
4.4.3. Частные решения уравнения диффузии.....	269
4.4.4. Структурные дефекты и диффузия атомов.....	274
4.4.5. Механизмы диффузии в кристаллических твердых телах.....	274
4.4.6. Влияние структурных дефектов на параметры диффузии.....	277
<i>Литература</i>	280
Глава 5. Фазовые превращения в кристаллических материалах.....	281
5.1. Термодинамика фазовых превращений в материалах.....	281
5.2. Плавление однокомпонентных кристаллических твердых тел.....	288
5.3. Кристаллизация однокомпонентных твердых тел.....	292
5.4. Закалка однокомпонентных кристаллических материалов.....	311

5.5. Изменение структуры однокомпонентных кристаллов при термических воздействиях.....	316
5.6. Фазовые равновесия и превращения в многокомпонентных кристаллических материалах при термических воздействиях.....	320
5.6.1. Виды кристаллических сплавов.....	320
5.6.2. Диаграммы состояния сплавов и их построение.....	325
5.6.3. Диаграммы состояния двухкомпонентных сплавов.....	331
5.7. Задачи теплопроводности при фазовых превращениях.....	341
<i>Литература</i>	348
Задачи	349
<i>Литература</i>	369

ПРЕДИСЛОВИЕ

Предлагаемое издание является продолжением первого тома, в котором были изложены основы термодинамики, статистической физики и физической кинетики, раскрывающие физическую сущность тепловых процессов. Второй том содержит описание конкретных вопросов теории тепло- и массо-переноса и состоит из следующих глав:

- термодинамика необратимых процессов;
- основы теории конвективного теплообмена;
- основы теории переноса энергии теплового излучения;
- процессы переноса в твердых телах;
- фазовые превращения в кристаллических материалах.

В конце тома приведены задачи (с решениями) по тепло- и массообмену.

Оба тома следует рассматривать как краткое содержание материала по специальности «теплофизика и теоретическая теплотехника».

В книге из-за ограниченности объема не нашли отражения такие разделы теплообмена как теплоотдача при конденсации паров и при кипении жидкости. Эти вопросы основательно изложены в монографии С. С. Кутателадзе «Основы теории теплообмена» (М.: Атомиздат, 1979).

Авторы выражают искреннюю благодарность рецензентам доктору физ.-мат. наук С. П. Фисенко и доктору физ.-мат. наук В. Т. Борухову за ряд ценных замечаний, сделанных при просмотре рукописи. Считаю своим приятным долгом поблагодарить Н. В. Гринчук за большую работу при подготовке рукописи к изданию.

Глава 1

ТЕРМОДИНАМИКА НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ

Неравновесная термодинамика (часто ее называют термодинамикой необратимых процессов) представляет собой сравнительно молодой и интенсивно развивающийся раздел теоретической физики. Начало построения термодинамической теории неравновесных процессов принадлежит Л. Онзагеру, опубликовавшему в 1931 г. свою знаменитую работу. В настоящее время эта теория получила статистическое обоснование и широко используется при изучении различных физических явлений.

Классическая термодинамика (более подходящее название «термостатика») является равновесной или обратимой теорией, поскольку ее уравнения не содержат времени.

В термодинамически равновесных системах, как известно, температура и химический потенциал постоянны вдоль всей системы. Если эти условия не выполняются и в системе есть макроскопическое движение ее частей, то возникают необратимые процессы переноса массы, импульса, энергии, электрического заряда и т. д.

Построим теорию неравновесных процессов с феноменологической точки зрения.

1.1. Уравнения баланса и законы сохранения различных величин

Явления, изучаемые в неравновесной термодинамике, имеют макроскопический характер, поэтому при построении теории процессов в неравновесных системах они рассматриваются как сплошная (непрерывная) среда. Это значит, что всякий малый элемент объема среды считается настолько большим, что содержит еще значительное число молекул. Когда речь идет о бесконечно малых элементах объема, всегда подразумевается «физически» бесконечно малый объем. Иначе говоря, объем достаточно малый по сравнению с объемом тела, но большой по сравнению с межмолекулярными

расстояниями. Поэтому если говорят о смещении некоторой частицы среды, то имеют в виду смещение не отдельной молекулы, а целого элемента объема, содержащего много молекул, но рассматриваемого как точка.

Так как неравновесная система нами рассматривается как сплошная, т. е. непрерывная среда, то физические величины в ней являются непрерывными функциями пространственных координат x, y, z и времени t . При этом есть два способа описания.

Согласно Эйлеру, движение среды определяется относительно системы координат, фиксированной в пространстве, т. е. относится к некоторым точкам пространства, а не к «частицам» среды, передвигающимся со временем в пространстве. Данное описание называют пространственным, потому что задаются поля скоростей и ускорений движущейся среды.

В описании Лагранжа для динамической характеристики движения отдельных «частиц» среды, передвигающихся в пространстве, используется уравнение движения из динамики материальных точек. Это материальное или субстанциональное описание, поскольку система отсчета движется вместе со средой. Найдем общие уравнения баланса различных величин (массы, импульса, энергии, энтропии и т. д.).

Пусть $A(x, y, z, t)$ – некоторая аддитивная субстанция, распределенная в материале сплошной среды, имеющей объем V и массу M плотностью $\rho(x, y, z, t) = dM/dV$. Тогда для единицы объема сплошной среды

$$\frac{dA}{dV} = \frac{dA}{dM} \frac{dM}{dV} = \rho a,$$

где $dA/dM = a(x, y, z, t)$ – удельная величина субстанции A , находящаяся в единице массы сплошной среды. Для объема V среды получим

$$A = \int_V \rho a dV,$$

а изменение субстанции A в зависимости от времени равно

$$\frac{dA}{dt} = \dot{A} = \frac{d}{dt} \int_V \rho a dV \quad (*)$$

и может быть вызвано в общем случае двумя причинами:

- 1) потоком субстанции $A(x, y, z, t)$ внутрь объема V или из него через поверхность Σ , ограничивающую этот объем;
- 2) уменьшением или увеличением A внутри объема V , которое связано с существованием во внутренних точках сплошной среды источников или стоков для субстанции A .

На основе этих положений определяются общие уравнения баланса. В зависимости от того, какое описание нами выбирается, пространственное или материальное, получается локальная или субстанциональная форма уравнений баланса.

Локальные уравнения баланса. Чтобы получить общую форму локальных уравнений баланса, основанных на пространственном описании, будем исходить из положения, что объем V^0 , для которого необходимо выразить изменение субстанции, находится в покое относительно внешней (эйлеровой) системы координат (рис. 1.1). В этом случае вместо (*) можем записать

$$\frac{d}{dt} \int_{V^0} \rho a dV^0 = \int_{V^0} \frac{\partial \rho a}{\partial t} dV^0, \quad (1.1.1)$$

где интегрирование ведется по объему $dV^0 = dx dy dz$, не меняющему положения в системе координат x, y, z .

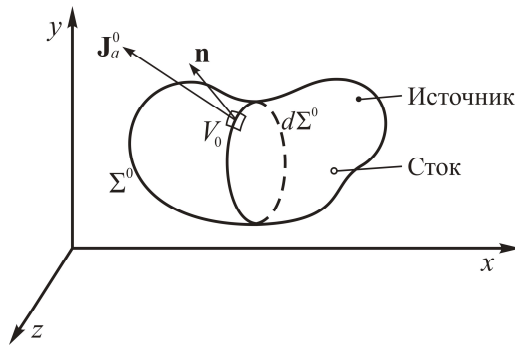


Рис. 1.1. К выводу локальных уравнений баланса

Если в некоторой сплошной среде с плотностью массы ρ происходит перенос субстанции A , то интенсивность такого переноса можно описать вектором

$$\mathbf{J}_a^0 = \rho a \mathbf{v}_a, \quad (1.1.2)$$

называемым локальной плотностью потока субстанции. Здесь \mathbf{v}_a – скорость переноса субстанции A . Направления плотности потока \mathbf{J}_a^0 и скорости переноса \mathbf{v}_a совпадают, а абсолютная величина определяет количество субстанции, проходящее в единицу времени через единицу площади, расположенную перпендикулярно к скорости переноса \mathbf{v}_a .

Через элемент поверхности $d\Sigma^0$ (рис. 1.1), ограничивающий рассматриваемый объем V^0 , в единицу времени происходит перенос субстанции, рав-

ный $dJ_a^0 = \rho a v_a d\Sigma^0$. Вектор $d\Sigma^0$ по абсолютной величине равен площади элемента поверхности $d\Sigma^0$ объема V^0 и направлен по нормали к ней. Условимся направлять $d\Sigma^0$ по внешней нормали \mathbf{n} , т. е. $d\Sigma^0 = d\Sigma^0 \mathbf{n}$. Тогда величина dJ_a^0 положительна, если субстанция вытекает из объема, и отрицательна, если втекает в него. Полное количество субстанции, вытекающей (втекающей) в единицу времени из объема V^0 , равна $\oint_{\Sigma^0} \rho a v_a \cdot d\Sigma^0$, где интегрирование проводится по всей замкнутой поверхности Σ^0 , охватывающей объем V^0 . Обозначим плотность внутреннего источника субстанции A через σ_a , тогда на основании положений 1) и 2) получаем интегральную форму уравнения баланса локального типа

$$\int_{V^0} \frac{\partial \rho a}{\partial t} dV^0 = - \oint_{\Sigma^0} \mathbf{J}_a^0 \cdot d\Sigma^0 + \int_{V^0} \sigma_a dV^0. \quad (1.1.3)$$

Найдем уравнение баланса (1.1.3) в дифференциальной форме, которая справедлива для любой внутренней точки сплошной среды. Для этого преобразуем интеграл по поверхности в интеграл по объему с помощью теоремы Гаусса – Остроградского

$$\oint_{\Sigma^0} \mathbf{J}_a^0 \cdot d\Sigma^0 = \int_{V^0} \operatorname{div} \mathbf{J}_a^0 dV^0 \equiv \int_{V^0} \nabla \cdot \mathbf{J}_a^0 dV^0.$$

Тогда уравнение (1.1.3) примет вид

$$\int_{V^0} \left(\frac{\partial \rho a}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_a^0 - \sigma_a \right) dV^0 = 0.$$

Поскольку это равенство должно иметь место для любого объема V^0 , покоящегося относительно системы координат x, y, z , подынтегральное выражение должно быть равным нулю:

$$\frac{\partial \rho a}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_a^0 = \sigma_a. \quad (1.1.4)$$

Это дифференциальное уравнение называется локальной формой уравнения баланса для аддитивной субстанции A .

Таким образом, интегральная форма уравнения баланса (1.1.3) является определяющей для дифференциального уравнения (1.1.4). Когда в (1.1.4) плотность источника σ_a субстанции A равна нулю, т. е.

$$\frac{\partial \rho a}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_a^0 = 0, \quad (1.1.5)$$

уравнение (1.1.5) выражает закон сохранения субстанции в любой точке сплошной среды. Если в уравнении (1.1.4) $\sigma_a > 0$, то речь идет о локальном возникновении субстанции, если $\sigma_a < 0$, – о локальном поглощении субстанции.

Применим соотношение (1.1.5) для получения уравнения сохранения массы сплошной среды. Если $A \equiv M$, где M – полная масса объема V^0 , то удельная масса $dA/dM = a \equiv 1$. Тогда из уравнения (1.1.2) получаем локальную плотность потока массы $\mathbf{J}^0 = \rho \mathbf{v}$, где $\mathbf{v} = \mathbf{v}(x, y, z, t)$ – скорость движения сплошной среды в каждой данной точке x, y, z пространства в любой момент времени t . Кроме того, для этого случая из (1.1.5) находим

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}^0 = 0, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_\mu}{\partial x_\mu} = 0,$$

т. е.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0, \quad (1.1.6)$$

которое выражает закон сохранения массы в произвольной точке сплошной среды.

Уравнение (1.1.6) чаще называют законом непрерывности (неразрывности). Смысл его состоит в том, что возрастание (уменьшение) массы в единице объема сплошной среды равно количеству массы, втекающей (вытекающей) с потоком плотностью \mathbf{J}^0 .

Субстанциональные уравнения баланса. Частная производная $\partial \rho a / \partial t$ в уравнении (1.1.4) определяет изменение субстанции в данной неподвижной точке пространства x, y, z . Эту производную можно выразить через полную (субстанциональную) производную, относящуюся к передвигающейся в пространстве частице вещества сплошной среды. При таком материальном или лагранжевом описании сплошной среды выбранный элемент объема сплошной среды движется вместе с ней относительно системы координат x, y, z , фиксированной в пространстве. Совместное движение элемента массы $dM = \rho dV$ и элемента объема dV со скоростью $\mathbf{v}(x, y, z, t)$ означает, что во время движения в элементе объема dV все время содержится постоянная масса dM . Эту физическую картину можно математически представить в виде условия

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}^0 - \rho \mathbf{v} \equiv 0, \quad (1.1.7)$$

которое означает, что при переходе от локального потока массы \mathbf{J}^0 к субстанциональному потоку массы \mathbf{J} последний должен быть равен нулю.

Исходя из соотношений (1.1.2), (1.1.7), субстанциональную плотность потока \mathbf{J}_a произвольной субстанции A можно определить из уравнения

$$\mathbf{J}_a = \mathbf{J}_a^0 - \rho a \mathbf{v} = \rho a (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}). \quad (1.1.8)$$

Корректность такого определения подтверждается тем, что при $a \equiv 1$, когда величина \mathbf{J}_a равна плотности потока массы \mathbf{J} , соотношение (1.1.8) в соответствии с уравнением (1.1.7) обращается в нуль.

При материальном описании элемент объема dV сплошной среды все время заполнен одним и тем же количеством массы ($dM = \rho dV$). Поэтому при движении элемента объема dV величина dM остается неизменной во времени. Следовательно, вместо формулы (1.1.1) можно записать

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho a dV = \int_V \rho \frac{da}{dt} dV, \quad (1.1.9)$$

где субстанциональное дифференцирование по времени действует только на величину a . Подчеркнем, что здесь интегрирование производится по объему V , движущемуся вместе со сплошной средой.

Примем во внимание положения 1) и 2). Тогда с учетом соотношений (1.1.8) и (1.1.9) находим интегральную форму субстанционального уравнения баланса

$$\int_V \rho \frac{da}{dt} dV = - \oint_{\Sigma} \mathbf{J}_a \cdot d\boldsymbol{\Sigma} + \int_V \sigma_a dV.$$

Отсюда, преобразовывая интеграл по поверхности в интеграл по объему с помощью теоремы Гаусса – Остроградского, получим

$$\int_V \left(\rho \frac{da}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_a - \sigma_a \right) dV = 0.$$

Поскольку объем V может быть любым, имеем дифференциальную форму субстанционального уравнения баланса

$$\rho \frac{da}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_a = \sigma_a. \quad (1.1.10)$$

Найдем соотношение, связывающее субстанциональное (1.1.10) и локальное (1.1.4) уравнения баланса. Стоящая в уравнении (1.1.10) производ-

ная da/dt определяет изменение субстанции не в данной неподвижной точке пространства, а в определенной передвигающейся в пространстве частице сплошной среды. Выразим эту производную через величины, относящиеся к неподвижным в пространстве точкам. Для этого заметим, что изменение da субстанции данной частицы сплошной среды складывается из двух частей: изменения субстанции в данной точке пространства в течение времени dt и разности субстанций (в один и тот же момент времени) в двух точках, разделенных расстоянием $d\mathbf{r}$, пройденным рассматриваемой частицей сплошной среды в течение времени dt .

Первая из этих частей равна $\frac{\partial a}{\partial t} dt$, где производная $\frac{\partial a}{\partial t}$ берется при постоянных x, y, z , т. е. в заданной точке пространства. Вторая часть изменения субстанции равна

$$dx \frac{\partial a}{\partial x} + dy \frac{\partial a}{\partial y} + dz \frac{\partial a}{\partial z} = d\mathbf{r} \cdot \nabla a .$$

Тогда

$$da = \frac{\partial a}{\partial t} dt + d\mathbf{r} \cdot \nabla a .$$

Разделим обе стороны этого равенства на dt :

$$\frac{da}{dt} = \frac{\partial a}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla a .$$

Поскольку под a понимается любая субстанция (масса, импульс, энергия, энтропия и т. д.), в общем случае полное изменение во времени любой величины можно вычислить с помощью операторного уравнения

$$\frac{d \dots}{dt} = \frac{\partial \dots}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \dots \quad (1.1.11)$$

Применим операторное уравнение (1.1.11) к плотности ρ :

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho .$$

Тогда уравнение неразрывности (1.1.6), которое перепишем как

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho = 0 ,$$

примет субстанциональный вид

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (1.1.12)$$

Применение операторного уравнения (1.1.11) к величине ρa дает

$$\frac{d\rho a}{dt} = a \frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{da}{dt} = \frac{\partial \rho a}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho a.$$

Исключим производную $d\rho/dt$, используя уравнение (1.1.12):

$$\rho \frac{da}{dt} = -a \frac{d\rho}{dt} + \frac{\partial \rho a}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho a = \frac{\partial \rho a}{\partial t} + \rho a \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho a.$$

Преобразуем правую часть на основании тождества

$$\nabla \cdot \rho a \mathbf{v} = \rho a \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho a.$$

В итоге находим

$$\rho \frac{da}{dt} = \frac{\partial \rho a}{\partial t} + \nabla \cdot \rho a \mathbf{v}. \quad (1.1.13)$$

Уравнение (1.1.13) будет часто использоваться в дальнейшем. Поэтому необходимо доказать эквивалентность локального (1.1.4) и субстанционального (1.1.10) уравнений баланса, поскольку при выводе (1.1.10) предполагалось, что плотность источника (стока) σ_a равна плотности, входящей в уравнение (1.1.4). Запишем уравнение (1.1.4), добавив и отняв $\nabla \cdot \rho a \mathbf{v}$:

$$\left(\frac{\partial \rho a}{\partial t} + \nabla \cdot \rho a \mathbf{v} \right) + \nabla \cdot \mathbf{J}^0 - \nabla \cdot \rho a \mathbf{v} = \sigma_a.$$

Сравнивая его с (1.1.10) с учетом соотношений (1.1.13) и (1.1.8), убеждаемся в эквивалентности уравнений баланса (1.1.10) и (1.1.4).

Подчеркнем, что в формуле (1.1.13) величина a может быть любым скаляром, т. е. под a следует понимать скаляр, компоненту вектора или тензора второго ранга. Если в частном случае удельная масса $a \equiv 1$, то уравнение (1.1.13) сводится к локальному уравнению баланса массы (1.1.6).

1.2. Уравнения баланса массы многокомпонентной смеси

Рассмотрим систему, представляющую собой смесь n компонентов, которые пронумеруем индексами $k = 1, 2, \dots, n$. Если между компонентами системы происходят химические реакции, то для них используем индексы b, c .

В дальнейшем будем применять только декартову правостороннюю систему координат и для тензорных величин использовать индексы μ, ν (см. Приложение). Кроме того, применим правило, согласно которому по индексу, встречающемуся в выражении дважды (или много раз), автоматически производится суммирование. Например, имеем

$$v_\mu = T_{\mu\nu} w_\nu, \quad \mu, \nu = 1, 2, 3,$$

вместо

$$v_\mu = \sum_{\nu=1}^3 T_{\mu\nu} w_\nu, \quad \mu = 1, 2, 3.$$

Кроме того, не будем записывать текущие индексы ($\mu, \nu = 1, 2, 3$), так как они всегда принимают значения 1, 2, 3 и обозначают декартовы координаты тензорных величин.

Описание методами механики сплошной среды различного рода смесей связано с введением понятия многоскоростного континуума и определением взаимопроникающего движения континуумов.

Многоскоростной континуум представляет собой совокупность n континуумов, каждый из которых относится к своей составляющей смеси и заполняет один и тот же объем, занятый смесью. Для каждого из этих составляющих континуумов во всех точках определяется обычным образом плотность ρ_k (масса k -составляющей в единице объема всей среды), скорость \mathbf{v}_k ($k = 1, 2, \dots, n$), а затем и другие параметры, относящиеся к своему континууму и своей составляющей смеси. Таким образом, в любой точке объема, занятого смесью, будет определено n плотностей ρ_k , n скоростей \mathbf{v}_k и т. д. Кроме того, исходя из этих величин, можно определить параметры, характеризующие смесь в целом, а именно плотность смеси

$$\rho = \sum_{k=1}^n \rho_k$$

и среднемассовую (барицентрическую) скорость смеси

$$\rho \mathbf{v} = \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{v}_k \quad \text{или} \quad \mathbf{v} = \frac{\sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{v}_k}{\rho} = \sum_{k=1}^n C_k \mathbf{v}_k.$$

Здесь $C_k = \frac{\rho_k}{\rho}$, причем $\sum_{k=1}^n C_k = 1$.

Введем локальные плотности потока массы. Для компонентов смеси имеем

$$\mathbf{J}_k^0 = \rho_k \mathbf{v}_k. \quad (1.2.1)$$

Для смеси в целом

$$\mathbf{J}^0 = \rho \mathbf{v}.$$

Часто удобно пользоваться скоростями \mathbf{w}_k , которые называют диффузионными. Они являются скоростями движения составляющих смеси относительно центра инерции смеси в целом:

$$\mathbf{w}_k \equiv \mathbf{v}_k - \mathbf{v}. \quad (1.2.2)$$

Для плотности диффузионного потока получаем

$$\mathbf{J}_k \equiv \rho_k \mathbf{w}_k = \rho_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}) = \mathbf{J}_k^0 - \rho_k \mathbf{v}. \quad (1.2.3)$$

Суммируя это соотношение

$$\sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \equiv \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{w}_k = \sum_{k=1}^n \rho_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}) = 0, \quad (1.2.4)$$

видим, что число независимых плотностей диффузионных потоков равно $n-1$.

В многоскоростном континууме для величины A целесообразно ввести субстанциональные производные $d^{(k)}A/dt$ и dA/dt , связанные соответственно с индивидуальным движением k -й составляющей континуума и движением смеси в целом. По аналогии с операторным уравнением (1.1.11) введем

$$\frac{d^{(k)}A}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \mathbf{v}_k \cdot \nabla A \equiv \frac{\partial A}{\partial t} + v_{k\mu} \frac{\partial A}{\partial x_\mu}, \quad \frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla A \equiv \frac{\partial A}{\partial t} + v_\mu \frac{\partial A}{\partial x_\mu}. \quad (1.2.5)$$

Отсюда вычитанием находим

$$\frac{d^{(k)}A}{dt} - \frac{dA}{dt} = (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}) \cdot \nabla A = \mathbf{w}_k \cdot \nabla A = w_{k\mu} \frac{\partial A}{\partial x_\mu}.$$

Как указывалось, суммирование производится по тензорным индексам μ . Подчеркнем, что в уравнениях (1.2.5) используется предположение о том,

что величина A – скаляр. Если эти соотношения будут применяться к вектору или тензору более высокого ранга, то (1.2.5) надо использовать для всех скаляров, количество которых определяется рангом тензора.

Получим уравнения баланса масс, когда в многокомпонентной смеси происходят химические реакции. Будем исходить из общего уравнения баланса (1.1.4). Положим

$$a \equiv \frac{\rho_k}{\rho} = C_k, \quad \mathbf{J}_a^0 \equiv \mathbf{J}_k^0, \quad \sigma_a \equiv m_k$$

и учтем формулу (1.2.1). Тогда получим локальное уравнение баланса массы для каждого компонента:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_k^0 = m_k, \quad k = 1, 2, \dots, n. \quad (1.2.6)$$

Члены m_k определяют изменение массы при химическом превращении k -го компонента в единице объема в единицу времени. Если между компонентами не происходит никаких химических реакций, то $m_k = 0$. С учетом (1.2.3) уравнение баланса (1.2.6) можно записать в виде

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{v} + \mathbf{J}_k) = m_k.$$

Если просуммировать по всем компонентам k , то в результате получаем уравнение сохранения массы (неразрывности) смеси в целом:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0, \quad (1.2.7)$$

которое имеет обычный вид, как и в односкоростном континууме.

Вычислим члены m_k . Рассмотрим случай, когда в каждой точке смеси происходят r химических реакций ($b = 1, 2, \dots, r$) согласно стехиометрическим уравнениям

$$\sum_{k=1}^r \nu_{kb}^c M_k = \sum_{k=r+1}^n \nu_{kb}^c M_k, \quad b = 1, 2, \dots, r.$$

Здесь M_k – молекулярная масса k -го компонента, ν_{kb}^c – стехиометрический коэффициент k -го компонента в b -й реакции. По определению стехиометрические коэффициенты считаются отрицательными, если компонент стоит в левой части уравнения реакции ($k = 1, 2, \dots, r$) (является реагентом в реак-

ции b), и положительными, если в правой части ($k = r + 1, r + 2, \dots, n$) (представляют собой продукт реакции). Следовательно, законы сохранения массы при химических превращениях имеют вид

$$\sum_{k=1}^n v_{kb}^c M_k = 0, \quad b = 1, 2, \dots, r.$$

Введем вместо стехиометрических коэффициентов v_{kb}^c новые коэффициенты:

$$v_{kb} = \frac{v_{kb}^c M_k}{\sum_{k=r+1}^n v_{kb}^c M_k}, \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad b = 1, 2, \dots, r.$$

Тогда можно записать

$$\sum_{k=1}^n v_{kb} = 0, \quad b = 1, 2, \dots, r.$$

Коэффициенты v_{kb} всегда можно определить, если известны обычные химические стехиометрические коэффициенты v_{kb}^c .

Пусть в момент времени t плотность в некоторой точке пространства равна $\rho_k(t)$. За время ∂t в результате химических реакций произойдет изменение плотности на $\partial \rho_k$. Плотности ρ_k при реакции связаны уравнением реакции. Ясно, что если ρ_1 в реакции b изменится на v_{1b} , то каждая из остальных плотностей ρ_k изменится в реакции b на v_{kb} . Другими словами,

$$\frac{\partial_b \rho_k}{v_{kb}} = \frac{\partial_b \rho_1}{v_{1b}} = \partial \xi_b.$$

Здесь дифференциал $\partial \xi_b$ определяет «степень развития реакции b » и имеет одно и то же значение и знак для всех веществ, участвующих в реакции. Например, в реакции $2A + 3B = 4C$ стехиометрические коэффициенты $v_A = -2$, $v_B = -3$, $v_C = 4$. Следовательно,

$$\partial \xi = \frac{\partial \rho_k}{v_k} = -\frac{\partial \rho_A}{2} = -\frac{\partial \rho_B}{3} = \frac{\partial \rho_C}{4}.$$

Выражение $\partial \xi_b = \frac{\partial_b \rho_k}{v_{kb}}$, отнесенное к единице времени,

$$J_b = \frac{\partial \xi_b}{\partial t} = \frac{1}{\nu_{kb}} \frac{\partial_b \rho_k}{\partial t},$$

представляет собой скорость b -й реакции. Отсюда $\nu_{kb} J_b = \frac{\partial_b \rho_k}{\partial t}$ – количество k -го вещества, которое образуется в единице объема в единицу времени в b -й реакции ($b = 1, 2, \dots, r$). Для локального изменения плотности ρ_k k -го компонента во всех реакциях имеем

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} = \sum_{b=1}^r \frac{\partial_b \rho_k}{\partial t} = \sum_{b=1}^r \nu_{kb} J_b, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$

если изменение плотности компонентов в некоторой произвольной точке пространства обусловлено лишь химическими превращениями. Однако плотности источников в единице объема в единицу времени в уравнениях баланса массы (1.2.6) всегда определяются следующим образом:

$$m_k = \sum_{b=1}^r \nu_{kb} J_b.$$

В итоге уравнения баланса массы, когда кроме диффузии компонентов ($k = 1, 2, \dots, n$) происходят химические реакции ($b = 1, 2, \dots, r$) в виде локальных внутренних превращений, примут вид

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_k^0 = \sum_{b=1}^r \nu_{kb} J_b, \quad \mathbf{J}_k^0 = \rho_k \mathbf{v}_k. \quad (1.2.8)$$

Найдем субстанциональную форму уравнения баланса (1.2.8). Учтем соотношение (1.2.3). Тогда

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_k + \nabla \cdot \rho_k \mathbf{v} = \sum_{b=1}^r \nu_{kb} J_b.$$

Поскольку $\nabla \cdot \rho_k \mathbf{v} = \rho_k \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_k$, из операторного уравнения (1.2.5) находим субстанциональное уравнение баланса массы для компонентов

$$\frac{d \rho_k}{dt} + \rho_k \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{J}_k = \sum_{b=1}^r \nu_{kb} J_b. \quad (1.2.9)$$

Если ввести концентрацию C_k , то получим

$$\rho \frac{dC_k}{dt} + C_k \frac{d\rho}{dt} + \rho_k \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{J}_k = \sum_{b=1}^r v_{kb} J_b .$$

Воспользуемся уравнением неразрывности в субстанциональном виде (1.1.12). В итоге

$$\rho \frac{dC_k}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_k = \sum_{b=1}^r v_{kb} J_b . \quad (1.2.10)$$

В уравнениях баланса (1.2.8), (1.2.10) химические превращения учитываются точно, если известна стехиометрия и скорости химических реакций. Отсюда следует, что уравнения баланса (1.2.8) и (1.2.10) имеют фундаментальное значение в теории многокомпонентной и реагирующей сплошной среды.

Уравнения баланса заряда. Часто некоторые компоненты многокомпонентной сплошной среды обладают электрическим зарядом (ионы, электроны и т. д.). С точки зрения теории поля дискретность микрозарядов не представляет интереса, так как достаточно указать величину заряда компонентов на единицу массы. Поскольку электрический заряд всегда связан с частицей, имеющей массу, для k -го компонента можно определить удельный заряд e_k ($k = 1, 2, \dots, n$), относящийся к единице массы. Это же справедливо и для многокомпонентного континуума

$$e = \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^n \rho_k e_k = \sum_{k=1}^n C_k e_k . \quad (1.2.11)$$

Очевидно, что для всех незаряженных компонентов удельный заряд $e_k \equiv 0$.

Определим уравнения баланса заряда, когда химические реакции и обмен зарядами между компонентами отсутствуют. Если химических реакций нет, то из уравнения (1.2.10) следует

$$\rho \frac{dC_k}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_k = 0 . \quad (1.2.12)$$

Введем полную плотность электрического тока \mathbf{I} , которая определяется количеством заряда, переносимого всеми компонентами (с учетом (1.2.11)):

$$\mathbf{I} = \sum_{k=1}^n \rho_k e_k \mathbf{v}_k = \sum_{k=1}^n (\rho_k e_k \mathbf{v} + e_k \mathbf{J}_k) = \rho e \mathbf{v} + \sum_{k=1}^n e_k \mathbf{J}_k .$$

Здесь $\rho e \mathbf{v}$ – плотность конвективного электрического тока, обусловленного конвекцией центра инерции со скоростью \mathbf{v} .

Величина

$$\mathbf{i} = \sum_{k=1}^n e_k \mathbf{J}_k \quad (1.2.13)$$

называется плотностью тока проводимости и обусловлена движением заряженных компонентов относительно центра инерции.

Умножим уравнение баланса (1.2.12) на заряд e_k k -го компонента и просуммируем по всем компонентам $k = 1, 2, \dots, n$:

$$\rho \frac{d \sum_{k=1}^n C_k e_k}{dt} + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k e_k \right) = 0.$$

Учтем формулы (1.2.11) и (1.2.13), тогда получим уравнение баланса

$$\rho \frac{de}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{i} = 0, \quad (1.2.14)$$

которое представляет собой закон сохранения заряда в субстанциональной форме.

Аналогично находим локальную форму закона сохранения заряда. Будем исходить из уравнений локального баланса компонентов (1.2.8), в которых левая часть равна нулю:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_k^0 = 0, \quad \mathbf{J}_k = \mathbf{J}_k^0 - \rho_k \mathbf{v}.$$

Умножим на заряд e_k k -го компонента и просуммируем по всем компонентам, в итоге

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{I} = 0. \quad (1.2.15)$$

Из субстанционального (1.2.14) и локального (1.2.15) уравнений закона сохранения заряда видно, что плотность тока проводимости \mathbf{i} представляет собой субстанциональный поток, а полная плотность электрического тока \mathbf{I} – локальный поток.

1.3. Уравнения баланса импульса

Получим уравнение движения сплошной среды. Выделим некоторый малый объем δV с массой $\delta M = \rho \delta V$. На массу δM в общем случае действуют объемные и поверхностные силы. Если объемную силу, действующую на

единицу массы, обозначить через \mathbf{F} , то сила, действующая на массу δM , равна $\mathbf{F}\delta M = \rho\mathbf{F}\delta V$.

Поверхностные силы задаются плотностью их распределения по поверхности $\delta\Sigma$ объема δV или напряжением. Различают нормальные напряжения, действующие по нормали к поверхности, и касательные напряжения. В целом они составляют тензор второго ранга, который обозначим $\tilde{\mathbf{P}} \leftrightarrow P_{\mu\nu}$ и назовем тензором напряжений. Силы, действующие на поверхность $\delta\Sigma$ объема δV , равны

$$\oint_{\delta\Sigma} \tilde{\mathbf{P}} \cdot d\Sigma \leftrightarrow \oint_{\delta\Sigma} P_{\mu\nu} n_\nu d\Sigma; \quad d\Sigma = \mathbf{n}d\Sigma,$$

где \mathbf{n} – единичная нормаль к поверхности; $P_{\mu\nu} = \begin{vmatrix} P_{11} & P_{21} & P_{31} \\ P_{12} & P_{22} & P_{32} \\ P_{13} & P_{23} & P_{33} \end{vmatrix}$.

Пользуясь приведенными соотношениями, результирующую элементарных объемных и поверхностных сил можно представить как $\rho\mathbf{F}dV + \oint_{\delta\Sigma} \tilde{\mathbf{P}} \cdot d\Sigma$. Следовательно, если dv/dt – ускорение элемента массы δM , которое можно приписать действию результирующей силы, то уравнение движения Ньютона для элемента массы δM сплошной среды принимает вид

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} \delta V = \rho\mathbf{F}dV + \oint_{\delta\Sigma} \tilde{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{n}d\Sigma.$$

Интегральная форма уравнения движения континуума получается интегрированием этого выражения по всему объему V и поверхности Σ сплошной среды. Следовательно,

$$\int_V \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} dV = \int_V \rho\mathbf{F}dV + \oint_{\Sigma} \tilde{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{n}d\Sigma.$$

Применив теорему Гаусса – Остроградского

$$\oint_{\Sigma} \tilde{\mathbf{P}} \cdot d\Sigma = \int_V \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}} dV \equiv \int_V \text{Div} \tilde{\mathbf{P}} dV = \int_V \frac{\partial P_{\nu\mu}}{\partial x_\nu} dV,$$

получим

$$\int_V \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} dV = \int_V (\rho\mathbf{F} + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}}) dV. \quad (1.3.1)$$

С учетом произвольного объема V найдем соотношение

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \rho \mathbf{F} + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}}, \quad (1.3.2)$$

которое называется уравнением движения Коши. Для координат оно имеет вид

$$\rho \frac{dv_\mu}{dt} = \rho F_\mu + \frac{\partial P_{\nu\mu}}{\partial x_\nu}.$$

Уравнение движения Коши (1.3.2) справедливо для любой сплошной среды, однако выражения для тензора напряжений $\tilde{\mathbf{P}}$ в различных моделях сплошной среды будут неодинаковыми. Если известен вид тензора напряжений $\tilde{\mathbf{P}}$, то уравнение движения (1.3.2) можно использовать для описания различных моделей деформируемых тел (упругих, пластичных и т. д.), гидродинамических моделей (идеальных и вязких жидкостей и газов) и, кроме того, различных моделей электромагнитных полей.

Подчеркнем принципиальное отличие уравнений движения (1.3.2) сплошных сред от соответствующих уравнений для систем материальных точек. Векторы, стоящие слева и справа в уравнении (1.3.2), представляют собой соответственно не произведения масс на ускорения и силы, как это следует из второго закона Ньютона, а лишь плотности распределения всех этих величин, т. е. величины, отнесенные к единице объема. Умножая обе части этого уравнения на dV , получим уравнение движения центра инерции, заключенного в элементарный объем, а интегрируя по конечному объему V , составим уравнение движения центра инерции в объеме V . Особо следует оговорить смысл произведенного перехода от поверхностного интеграла к объемному

$$\oint_{\Sigma} \tilde{\mathbf{P}} \cdot d\boldsymbol{\Sigma} = \int_V \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}} dv.$$

Здесь вектор $\nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}} \equiv \text{Div} \tilde{\mathbf{P}}$ – плотность распределения объемного действия поверхностных сил.

Уравнение (1.3.1) выражает закон сохранения импульса в интегральной форме: изменение импульса материального объема во времени равно результирующей сил, действующих на вещество, находящееся в объеме. Поэтому физический смысл дифференциального уравнения (1.3.2) также совпадает с законом сохранения импульса.

В этом легко убедиться, если записать уравнение (1.3.2) в виде

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}} = \rho \mathbf{F} \quad (1.3.3)$$

и учесть, что \mathbf{v} – импульс единицы массы сплошной среды, а затем сравнить (1.3.3) с общим уравнением баланса для аддитивной субстанции a (1.1.10). Тогда можно утверждать, что уравнение (1.3.3) действительно является уравнением баланса импульса, причем субстанциональная плотность потока импульса, который сам есть вектор, идентична тензору напряжений второго ранга, взятому со знаком минус: $\tilde{\mathbf{J}} = -\tilde{\mathbf{P}}$, а плотность источника $\sigma_{\text{имп}}^e = \rho \mathbf{F}$ определяется плотностью внешних сил. Плотность силы $\rho \mathbf{F}$ можно интерпретировать только как член, соответствующий «внешнему» источнику, поскольку существование этого источника обусловлено внешними полями, действующими на сплошную среду. Таким образом, уравнение движения (1.3.3) является уравнением баланса, содержащим член, характеризующий источник, но, тем не менее, выражает закон сохранения импульса в дифференциальной форме. Это связано с тем, что члены, соответствующие источникам, возникающим вследствие неоднородностей внутри системы, не входят в уравнение баланса (1.3.3), т. е. $\sigma_{\text{имп}}^i \equiv 0$.

Преобразуем субстанциональное уравнение баланса в локальное. Воспользуемся соотношением (1.1.13). Под величиной a будем понимать компоненты скорости центра инерции $\mathbf{v} \leftrightarrow v_\mu$, т. е. $a \equiv v_\mu$ ($\mu = 1, 2, 3$). Тогда получим локальную форму уравнения баланса импульса

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \tilde{\mathbf{P}}) = \rho \mathbf{F}. \quad (1.3.4)$$

Здесь $\rho \mathbf{v}$ – импульс единицы объема сплошной среды; $\mathbf{v} \mathbf{v}$ – диадное произведение, т. е. тензор

$$\tilde{\mathbf{D}} = \mathbf{v} \mathbf{v} \leftrightarrow D_{\mu\nu} = v_\mu v_\nu,$$

где $v_\mu v_\nu$ – компоненты тензора $D_{\mu\nu}$;

$$\tilde{\mathbf{J}}^0 = \rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \tilde{\mathbf{P}}$$

– локальная плотность потока импульса. Он состоит из двух частей: конвективной $\rho \mathbf{v} \mathbf{v}$, которая представляет собой механическое передвижение различных участков сплошной среды из одного места в другое, и субстанциональной $\tilde{\mathbf{P}}$, выражающей перенос импульса за счет внутренних напряжений в среде. Этот результат находится в согласии с общим определением субстанциональной плотности потока (1.1.8).

Выясним, при каких условиях можно применять уравнения баланса импульса (1.3.3) и (1.3.4) для описания многоскоростного континуума. Прежде всего получим уравнение баланса импульса, аналогичное (1.3.3), для k -го компонента среды. Это уравнение можно записать в виде

$$\rho_k \frac{d^{(k)} \mathbf{v}_k}{dt} - \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}}_k = \rho_k \mathbf{F}_k + \rho_k \mathbf{F}_k^*, \quad k = 1, 2, \dots, n. \quad (1.3.5)$$

Здесь $\frac{d^{(k)} \mathbf{v}_k}{dt}$, согласно соотношениям (1.2.5), есть субстанциональная производная по времени, относящаяся к k -му континууму данной многоскоростной сплошной среды; $\tilde{\mathbf{P}}_k$ – тензор напряжений k -го континуума; \mathbf{F}_k – внешняя сила, действующая на единицу массы k -го континуума; \mathbf{F}_k^* – результирующая внутренняя сила, действующая на единицу массы k -го компонента со стороны других континуумов.

Исключим из (1.3.5) производную $d^{(k)}/dt$. Для этого воспользуемся уравнением (1.2.5)

$$\frac{d^{(k)} A}{dt} - \frac{\partial A}{\partial t} = \mathbf{w}_k \cdot \nabla A \leftrightarrow w_{k\mu} \frac{\partial A}{\partial x_\mu}$$

и положим, что $A \equiv v_{k\mu}$ ($\mu = 1, 2, 3$). Тогда

$$\rho_k \frac{d^{(k)} \mathbf{v}_k}{dt} = \frac{d\mathbf{v}_k}{dt} + (\mathbf{w}_k \cdot \nabla) \mathbf{v}_k, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$

и уравнение (1.3.5) можно переписать в виде

$$\rho_k \frac{d\mathbf{v}_k}{dt} + (\mathbf{J}_k \cdot \nabla) \mathbf{v}_k - \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}}_k = \rho_k \mathbf{F}_k + \rho_k \mathbf{F}_k^*, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$

где $\mathbf{J}_k = \rho_k \mathbf{w}_k$. Учтем тождество

$$\nabla \cdot (\mathbf{J}_k \mathbf{v}_k) = \mathbf{v}_k (\nabla \cdot \mathbf{J}_k) + (\mathbf{J}_k \cdot \nabla) \mathbf{v}_k$$

и преобразуем последнее соотношение:

$$\rho \frac{d\mathbf{v}_k}{dt} - \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{P}}_k - \mathbf{J}_k \mathbf{v}_k) = \rho_k \mathbf{F}_k + \rho_k \mathbf{F}_k^* + \mathbf{v}_k (\nabla \cdot \mathbf{J}_k), \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Проведем суммирование по k и преобразуем сумму, используя соотношения

$$\rho \mathbf{v} = \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{v}_k, \quad \frac{d\rho}{dt} \mathbf{v} + \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum_{k=1}^n \frac{d\rho_k}{dt} \mathbf{v}_k + \sum_{k=1}^n \rho_k \frac{d\mathbf{v}_k}{dt},$$

$$\sum_{k=1}^n \rho \frac{d\mathbf{v}_k}{dt} = \frac{d\rho}{dt} \mathbf{v} + \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \sum_{k=1}^n \frac{d\rho_k}{dt} \mathbf{v}_k.$$

В результате получим

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} \mathbf{v} + \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \sum_{k=1}^n \frac{d\rho_k}{dt} \mathbf{v}_k - \nabla \cdot \left[\sum_{k=1}^n (\tilde{\mathbf{P}}_k - \mathbf{J}_k \mathbf{v}_k) \right] = \\ = \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{F}_k + \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{F}_k^* + \sum_{k=1}^n \mathbf{v}_k (\nabla \cdot \mathbf{J}_k). \end{aligned} \quad (1.3.6)$$

Исключим производные $d\rho/dt$ и $d\rho_k/dt$, применив равенства (1.1.12) и (1.2.9), и учтем, что, согласно соотношениям (1.2.2)–(1.2.4), справедлива формула

$$\sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \mathbf{v}_k = \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{w}_k \mathbf{v}_k = \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{w}_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}) + \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{w}_k \mathbf{v} = \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k.$$

В итоге простых преобразований уравнения (1.3.6) находим уравнение баланса

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \nabla \cdot \left[\sum_{k=1}^n (\tilde{\mathbf{P}}_k - \rho_k \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k) \right] = \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{F}_k + \sum_{k=1}^n (\rho_k \mathbf{F}_k^* + m_k \mathbf{v}_k).$$

Сравнивая это уравнение с уравнением Коши (1.3.3), замечаем, что условие необходимости и достаточности для того, чтобы уравнение Коши выполнялось в случае многокомпонентных систем, эквивалентно следующим трем требованиям:

$$\rho \mathbf{F} = \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{F}_k, \quad (1.3.7)$$

$$\tilde{\mathbf{P}} = \sum_{k=1}^n (\tilde{\mathbf{P}}_k - \rho_k \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k), \quad (1.3.8)$$

$$\sum_{k=1}^n (\rho_k \mathbf{F}_k^* + m_k \mathbf{v}_k) = 0. \quad (1.3.9)$$

Как показывает условие (1.3.9), источник импульса, порожденный внутренними силами, уравновешивается диффузионным импульсом компонентов, возникающим в химических реакциях. Тогда уравнение баланса импульса, справедливое для многокомпонентного континуума

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}} = \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{F}_k, \quad (1.3.10)$$

выражает закон сохранения полного импульса, если тензор напряжений определяется соотношением (1.3.8).

Модели сплошной среды. Уравнения движения Коши для сплошных сред можно применять для самых разнообразных моделей континуумов, которые используются в механике сплошных сред, а также для электромагнитных процессов в среде. Различные модели сплошной среды отличаются формой тензора напряжений $\tilde{\mathbf{P}}$. Если нами исследуется только механика сплошной среды, то тензор $\tilde{\mathbf{P}}$ можно в общем случае разложить на две части: первая часть зависит от состояния, а вторая – от скорости изменения этого состояния. Это значит, что тензор напряжений $\tilde{\mathbf{P}}$ состоит из равновесной части $\tilde{\mathbf{P}}^p$ и неравновесной части $\tilde{\mathbf{P}}^b$:

$$\tilde{\mathbf{P}} = \tilde{\mathbf{P}}^p + \tilde{\mathbf{P}}^b. \quad (1.3.11)$$

Поскольку $\tilde{\mathbf{P}}^b$ зависит от скорости изменения состояния, а следовательно, от ее градиента, и так как вязкие силы определяются именно градиентами, то $\tilde{\mathbf{P}}^b$ называют тензором вязких напряжений. Таким образом, $\tilde{\mathbf{P}}^b = 0$ для любой сплошной среды в состоянии равновесия. Например, тензор неравновесного напряжения равен нулю ($\tilde{\mathbf{P}}^b = 0$) для газов и жидкостей в состоянии покоя. Кроме того, в таких случаях в силу изотропии тензор равновесного напряжения $\tilde{\mathbf{P}}^p$ превращается в скаляр:

$$\tilde{\mathbf{P}} = \tilde{\mathbf{P}}^p = -p \tilde{\delta} = \begin{vmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{vmatrix} = -p \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (1.3.12)$$

Здесь $\tilde{\delta}$ – единичный тензор, $\tilde{\delta} \leftrightarrow \delta_{\mu\nu} = \begin{cases} 0, & \mu \neq \nu; \\ 1, & \mu = \nu; \end{cases}$ ($-p$) – общее значение нормальных компонентов

$$P_{\mu\mu} = P_{\mu\mu}^p = -p, \quad \mu = 1, 2, 3. \quad (1.3.13)$$

Величина p называется давлением, знак «минус» показывает, что нормальное напряжение тензора напряжений, приложенное в точках поверхности мысленно выделенного объема, направлено в сторону, противоположную внешней нормали к поверхности, ограничивающей объем, т. е. внутрь

объема. Закон (1.3.13) изотропии нормальных напряжений среды в состоянии покоя был открыт Б. Паскалем экспериментально. При равновесии среды тензор напряжений $\tilde{\mathbf{P}}$ имеет компоненты (1.3.12).

Следовательно, в случае неподвижных жидкостей и газов отсутствуют касательные компоненты тензора напряжений или напряжения сдвига, т. е.

$$P_{\mu\nu} = 0, \quad \mu, \nu = 1, 2, 3; \quad \mu \neq \nu.$$

Соотношения (1.3.12) и (1.3.13) всегда справедливы для жидкостей и газов в состоянии покоя. Однако для движущихся жидких и газовых систем можно также предложить модели, где эти соотношения являются хорошим приближением. Жидкие системы, в которых отсутствуют сдвиговые напряжения ($P_{\mu\nu} = 0$) по определению называются невязкими или идеальными системами. Следовательно, выражение для тензора напряжений (1.3.12) определяет также модель идеальной жидкости и газовой системы. Подставим соотношение (1.3.12) в уравнение движения (1.3.3), тогда получим уравнение субстанционального баланса импульса для идеальных сред

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla p = \rho \mathbf{F}.$$

Если применим операторное уравнение (1.1.11) к компонентам скорости, то найдем уравнение локального баланса импульса

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \mathbf{F}.$$

Эти уравнения называются уравнениями движения Эйлера и представляют собой, как указывалось ранее, уравнения баланса импульса для идеальных жидкостей.

Для вязких сред форма тензора напряжений (1.3.12) и (1.3.13) изменяется, поскольку в этих случаях тензор вязких напряжений $\tilde{\mathbf{P}}^b$ не равен нулю. Для однородных изотропных вязких сред тензор напряжений имеет вид

$$\tilde{\mathbf{P}} = -p\tilde{\delta} + \tilde{\mathbf{P}}^b, \quad (1.3.14)$$

где $\tilde{\mathbf{P}}^b$ в общем случае – функция $\nabla \mathbf{v} = \text{Grad} \mathbf{v}$. Для ньютоновских жидкостей тензор вязких напряжений $\tilde{\mathbf{P}}^b$ является линейной функцией тензора

$\nabla \mathbf{v} \leftrightarrow \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu}$ и справедливо выражение

$$\tilde{\mathbf{P}}^b = P_{\mu\nu}^b = \mu \left(\frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} + \frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} - \frac{2}{3} \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} \right) + \xi \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} \delta_{\mu\nu}, \quad (1.3.15)$$

где μ – коэффициент динамической вязкости, ξ – коэффициент объемной вязкости. С помощью соотношений (1.3.14) и (1.3.15) находим тензор напряжений вязких ньютоновских жидкостей

$$\tilde{\mathbf{P}} = P_{\mu\nu} = -p\delta_{\mu\nu} + \mu \left(\frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} + \frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} - \frac{2}{3} \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} \right) + \xi \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda}, \quad (1.3.16)$$

который оказывается симметричным: $\tilde{\mathbf{P}} \leftrightarrow P_{\mu\nu} \equiv P_{\nu\mu}$.

Подставим (1.3.16) в (1.3.3), тогда субстанциональное уравнение движения примет вид

$$\rho \frac{dv_\mu}{dt} + \frac{\partial p}{\partial x_\mu} - \mu \left(\frac{\partial^2 v_\mu}{\partial x_\nu^2} + \frac{\partial^2 v_\nu}{\partial x_\nu \partial x_\mu} - \frac{2}{3} \frac{\partial^2 v_\lambda}{\partial x_\mu \partial x_\lambda} \right) - \xi \frac{\partial^2 v_\lambda}{\partial x_\mu \partial x_\lambda} = \rho F_\mu$$

или

$$\rho \frac{dv_\mu}{dt} + \frac{\partial p}{\partial x_\mu} - \mu \frac{\partial^2 v_\mu}{\partial x_\nu^2} - \left(\xi + \frac{\mu}{3} \right) \frac{\partial^2 v_\nu}{\partial x_\mu \partial x_\nu} = \rho F_\mu.$$

Отсюда, используя операторное уравнение (1.1.11), получим локальную форму уравнения движения

$$\rho \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial t} + v_\nu \frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} \right) + \frac{\partial p}{\partial x_\mu} - \mu \frac{\partial^2 v_\mu}{\partial x_\nu^2} - \left(\xi + \frac{\mu}{3} \right) \frac{\partial^2 v_\nu}{\partial x_\mu \partial x_\nu} = \rho F_\mu$$

или в векторном виде

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \nabla p - \mu \Delta \mathbf{v} - \left(\xi + \frac{\mu}{3} \right) \nabla \nabla \cdot \mathbf{v} = \rho \mathbf{F}.$$

Здесь $\Delta = \nabla \cdot \nabla = \text{div grad}$ – оператор Лапласа, $\nabla \nabla \cdot \mathbf{v} = \text{grad div } \mathbf{v}$. Выписанные уравнения движения представляют собой уравнение Навье – Стокса соответственно в субстанциональной и локальной формах. Их следует рассматривать как уравнения баланса импульса вязкой ньютоновской жидкости.

Для дальнейшего анализа разложим тензор вязких напряжений $\tilde{\mathbf{P}}^b$ в (1.3.11) следующим образом:

$$\tilde{\mathbf{P}}^b = p^v \tilde{\delta} + \tilde{\mathbf{P}}^b{}^0,$$

где $\tilde{\delta}$ – единичный тензор и

$$p^v = \frac{1}{3} \tilde{\mathbf{P}}^b : \tilde{\delta} = \frac{1}{3} P_{\mu\mu}^b, \quad \mu = 1, 2, 3, \quad (1.3.17)$$

т. е. это 1/3 следа (шпура) тензора $\tilde{\mathbf{P}}^b$. След тензора $\tilde{\mathbf{P}}^b{}^0$ равен нулю:

$$\tilde{\mathbf{P}}^b{}^0 : \tilde{\delta} = P_{\mu\mu}^b{}^0 = 0, \quad \mu = 1, 2, 3.$$

Этот тензор можно обычным образом разложить на симметричную $\tilde{\mathbf{P}}^b{}^0$ и антисимметричную $\tilde{\mathbf{P}}^{ba}$ части (по определению антисимметричный тензор $\tilde{\mathbf{P}}^{ba}$ имеет след, равный нулю):

$$\tilde{\mathbf{P}}^b{}^0 = \tilde{\mathbf{P}}^{bs}{}^0 + \tilde{\mathbf{P}}^{ba} \left\{ \tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{T}}^s + \tilde{\mathbf{T}}^a = \frac{1}{2} (T_{\mu\nu} + T_{\nu\mu}) + \frac{1}{2} (T_{\mu\nu} - T_{\nu\mu}) \right\}.$$

Следовательно, тензор вязких напряжений разлагается как

$$\tilde{\mathbf{P}}^b = p^b \tilde{\delta} + \tilde{\mathbf{P}}^{bs}{}^0 + \tilde{\mathbf{P}}^{ba} = \frac{1}{3} (\tilde{\mathbf{P}}^b : \tilde{\delta}) \tilde{\delta} + \tilde{\mathbf{P}}^{bs}{}^0 + \tilde{\mathbf{P}}^{ba} \quad (1.3.18)$$

и дальнейшее разложение уже невозможно. Подобным образом можно разложить любой тензор второго ранга. Для наглядности запишем это разложение в компонентах

$$\begin{vmatrix} P_{11}^b & P_{21}^b & P_{31}^b \\ P_{12}^b & P_{22}^b & P_{32}^b \\ P_{13}^b & P_{23}^b & P_{33}^b \end{vmatrix} = \frac{P_{11}^b + P_{22}^b + P_{33}^b}{3} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} +$$

$$\begin{aligned}
& + \left| \begin{array}{ccc} \frac{2}{3}(P_{11}^b - P_{22}^b - P_{33}^b) & \frac{1}{2}(P_{21}^b + P_{12}^b) & \frac{1}{2}(P_{31}^b + P_{13}^b) \\ \frac{1}{2}(P_{12}^b + P_{21}^b) & \frac{2}{3}(P_{22}^b - P_{11}^b - P_{33}^b) & \frac{1}{2}(P_{32}^b + P_{23}^b) \\ \frac{1}{2}(P_{13}^b + P_{31}^b) & \frac{1}{2}(P_{23}^b + P_{32}^b) & \frac{2}{3}(P_{33}^b - P_{11}^b - P_{22}^b) \end{array} \right| + \\
& + \left| \begin{array}{ccc} 0 & \frac{1}{2}(P_{21}^b - P_{12}^b) & \frac{1}{2}(P_{31}^b - P_{13}^b) \\ \frac{1}{2}(P_{12}^b - P_{21}^b) & 0 & \frac{1}{2}(P_{32}^b - P_{23}^b) \\ \frac{1}{2}(P_{13}^b - P_{31}^b) & \frac{1}{2}(P_{23}^b - P_{32}^b) & 0 \end{array} \right|.
\end{aligned}$$

Отсюда видно, что в общем случае любая физическая величина, заданная девятью независимыми элементами тензора второго ранга, может быть представлена эквивалентным образом с помощью скаляра, равного $1/3$ следа тензора, пяти независимыми элементами симметричной части со следом, равным нулю, и тремя независимыми элементами антисимметричной части. Последняя эквивалентна аксиальному вектору, который получается циклической перестановкой соответствующих элементов тензора $P_{\mu\nu}^{ba} = -P_{\nu\mu}^{ba} = P_{\gamma}^{ba}$ ($\mu, \nu, \gamma = 1, 2, 3$). Здесь

$$P_{\mu\nu}^{ba} = -\frac{1}{2}(P_{\nu\mu}^b - P_{\mu\nu}^b), \quad \mu, \nu = 1, 2, 3, \quad (1.3.19)$$

или $2\tilde{\mathbf{P}}^{ba} = \tilde{\mathbf{P}}^b - \tilde{\mathbf{P}}^b$, где $\tilde{\mathbf{P}}^{ba}$ – аксиальный вектор.

Выражения (1.3.12) и (1.3.13) определяют только гидростатическое давление. Более общее определение давления, справедливое и для нестатического случая, получим, если примем его равным $1/3$ следа тензора напряжений

$$\bar{p} = \frac{1}{3}\tilde{\mathbf{P}} : \tilde{\mathbf{\delta}} = \frac{1}{3}P_{\mu\mu}, \quad \mu = 1, 2, 3.$$

Эта величина является средним давлением \bar{p} , которое, согласно формуле (1.3.11), складывается из равновесного давления

$$-p = \frac{1}{3} \tilde{\mathbf{P}}^p : \tilde{\mathbf{\delta}} = \frac{1}{3} P_{\mu\mu}^p, \quad \mu = 1, 2, 3, \quad (1.3.20)$$

и скаляра p^v , определяемого соотношением (1.3.17). Таким образом, величину p^v можно назвать вязким давлением. Из формул (1.3.11), (1.3.18) и (1.3.20) следует, что для движущихся жидкостей и газовых сред тензор напряжений имеет вид

$$\tilde{\mathbf{P}} = \left(-p + p^b\right) \tilde{\mathbf{\delta}} + \tilde{\mathbf{P}}^{bs} + \tilde{\mathbf{P}}^{ba}.$$

Отметим, что с помощью различных форм равновесной части $\tilde{\mathbf{P}}^p$ тензора напряжений можно точно описать модели пластических, упругих и других реологических систем и получить хорошее согласие с экспериментальными данными.

Механическое равновесие. Согласно законам механики, материальное тело, находящееся в состоянии механического равновесия, не может совершать ни поступательного (кроме прямолинейного равномерного), ни вращательного движения. Это условие выполняется, т. е. тело находится в состоянии механического равновесия, если результирующая всех сил, действующих на любой объем тела, а также результирующая всех моментов сил равны нулю.

В случае сплошной среды первое условие выполняется согласно соотношению (1.3.1), если

$$\int_V (\rho \mathbf{F} + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}}) dV = 0.$$

Поскольку объем V произволен, при равновесии в каждой точке должно быть справедливо равенство

$$\rho \mathbf{F} + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}} = 0, \quad (1.3.21)$$

выражающее условие равновесия. Согласно уравнению движения Коши (1.3.2), это условие определяет движение без ускорения, т. е. в состоянии механического равновесия ($dv/dt = 0$).

Условие равновесия (1.3.21) исключает возможность только ускоренного поступательного движения, но допускает вращательное движение элементов массы сплошной среды. Следовательно, является необходимым условием для полного механического равновесия. Чтобы получить необходимое и достаточное условие механического равновесия, нужно помимо уравнения (1.3.21) задать условие, выражающее отсутствие моментов сил.

Для сплошной среды момент результирующей силы относительно точки \mathbf{r} пространственной системы координат определяется как

$$\int_V \rho(\mathbf{r} \times \mathbf{F}) dV + \oint_{\Sigma} (\mathbf{r} \times \tilde{\mathbf{P}}) \cdot d\boldsymbol{\Sigma}.$$

Применяя к последнему члену данного выражения теорему Гаусса – Остроградского, находим второе условие механического равновесия

$$\int_V [\rho(\mathbf{r} \times \mathbf{F}) + \nabla \cdot (\mathbf{r} \times \tilde{\mathbf{P}})] dV = 0. \quad (1.3.22)$$

Используем тождество тензорного анализа

$$x_\mu \frac{\partial P_{\gamma\mu}}{\partial x_\gamma} - x_\nu \frac{\partial P_{\gamma\mu}}{\partial x_\gamma} = \frac{\partial}{\partial x_\gamma} (x_\mu P_{\gamma\nu} - x_\nu P_{\gamma\mu}) + P_{\nu\mu} - P_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu, \gamma = 1, 2, 3,$$

или в векторной форме

$$\mathbf{r} \times \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}} = \nabla \cdot (\mathbf{r} \times \tilde{\mathbf{P}}) + \tilde{\mathbf{P}} - \tilde{\mathbf{P}}, \quad (1.3.23)$$

где $\tilde{\tilde{\mathbf{P}}}$ – транспонированный тензор $\tilde{\mathbf{P}}$. Тогда условие (1.3.22) можно переписать в виде

$$\int_V [\mathbf{r} \times (\rho \mathbf{F} + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}}) + \tilde{\mathbf{P}} - \tilde{\tilde{\mathbf{P}}}] dV = 0.$$

Поскольку подынтегральное выражение должно обращаться в нуль для произвольного объема V , одновременное выполнение условий (1.3.21) и (1.3.22) является необходимым и достаточным условием механического равновесия. Отсюда следует, что

$$\tilde{\mathbf{P}} = \tilde{\tilde{\mathbf{P}}} \quad \text{или} \quad P_{\mu\nu} = P_{\nu\mu}, \quad \mu, \nu = 1, 2, 3;$$

т. е. при механическом равновесии тензор напряжений является симметричным. В других случаях симметричность тензора напряжений связана с сохранением момента импульса.

Уравнения баланса момента импульса. Симметричность тензора напряжений в более общих случаях находится в прямой связи с законом сохранения момента импульса. Для анализа последнего определим так называемый «внешний» момент импульса единицы массы, центр инерции кото-

рой движется со скоростью \mathbf{v} . По определению момент импульса единицы массы относительно начала системы координат, заданной эйлеровыми координатами x_1, x_2, x_3 равен

$$\mathbf{S}^e = \mathbf{r} \times \mathbf{v}.$$

Субстанциональная производная по времени от этого «внешнего» или, как его часто называют, механического момента импульса равна

$$\frac{d\mathbf{S}^e}{dt} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{v} + \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{v}}{dt},$$

а так как $\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}$ и $\mathbf{v} \times \mathbf{v} = 0$, то $\frac{d\mathbf{S}^e}{dt} = \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{v}}{dt}$.

Получим уравнение субстанционального баланса механического момента импульса для случая $\mathbf{F} = 0$, т. е. на сплошную среду действуют только поверхностные силы $\nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}}$. Для этого уравнение баланса импульса (1.3.3)

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}} = \rho \mathbf{F}$$

умножим векторно на \mathbf{r} слева, тогда

$$\rho \frac{d\mathbf{S}_e^e}{dt} - \mathbf{r} \times \nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}} = 0.$$

Сравним это уравнение с общим уравнением баланса (1.1.10). Видно несоответствие, которое можно преодолеть, если учесть (1.3.23) и принять во внимание, что $\tilde{\mathbf{P}} = (-p + p^b) \tilde{\mathbf{\delta}} + \tilde{\mathbf{P}}^{bs} + \tilde{\mathbf{P}}^{ba}$ и $\tilde{\mathbf{P}} - \tilde{\tilde{\mathbf{P}}} = 2\mathbf{P}^{ba}$, где \mathbf{P}^{ba} – аксиальный вектор, определяемый антисимметричной частью тензора напряжений в смысле соотношений (1.3.19). В результате запишем уравнение субстанционального баланса механического момента импульса с источником $2\mathbf{P}^{ba}$

$$\rho \frac{d\mathbf{S}^e}{dt} + \nabla \cdot (\mathbf{r} \times \tilde{\mathbf{P}}) = 2\mathbf{P}^{ba}. \quad (1.3.24)$$

Это уравнение получено из (1.3.3) при условии, что на систему не действуют внешние силы ($\mathbf{F} = 0$), поэтому $2\mathbf{P}^{ba}$ представляет собой только внутренний

источник момента импульса $\sigma_{S^e}^i = 2P^{ba}$, а $\tilde{\mathbf{J}}_{S^e} = \mathbf{r} \times \tilde{\mathbf{P}}$ – субстанциональная плотность потока момента импульса.

Найдем локальную форму уравнения баланса механического момента импульса \mathbf{S}^e . Для этого воспользуемся соотношением (1.1.13) с $a \equiv S_\mu^e$ ($\mu = 1, 2, 3$). Тогда

$$\rho \frac{d\mathbf{S}^e}{dt} = \frac{\partial \rho \mathbf{S}^e}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{S}^e \mathbf{v}$$

и из формулы (1.3.24) получим локальную форму уравнения баланса момента импульса

$$\frac{\partial \rho \mathbf{S}^e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{S}^e \mathbf{v} + \mathbf{r} \times \mathbf{R}) = 2\mathbf{P}^{ba}, \quad (1.3.25)$$

где, согласно определению (1.1.8), локальная плотность $\tilde{\mathbf{J}}_{S^e}^0$ потока момента импульса равна

$$\tilde{\mathbf{J}}_{S^e}^0 = \tilde{\mathbf{J}}_{S^e} + \rho \mathbf{S}^e \mathbf{v} = \mathbf{r} \times \tilde{\mathbf{P}} + \rho \mathbf{S}^e \mathbf{v}.$$

Здесь диада $\rho \mathbf{S}^e \mathbf{v}$ – плотность конвективного потока момента импульса.

Уравнения баланса момента импульса (1.3.24) или (1.3.25) показывают, что плотность источника

$$\sigma_{S^e}^i = 2P^{ba} = 0,$$

когда $\tilde{\mathbf{P}} - \tilde{\tilde{\mathbf{P}}} = 2\mathbf{P}^{ba} = 0$ или $\tilde{\mathbf{P}} = \tilde{\tilde{\mathbf{P}}}$, т. е. $\tilde{\mathbf{P}}^a = 0$. Это означает симметричность тензора напряжений. Другими словами, симметричность тензора напряжений эквивалентна сохранению механического («внешнего») момента импульса \mathbf{S}^e :

$$\rho \frac{d\mathbf{S}^e}{dt} + \nabla \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{R}) = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial \rho \mathbf{S}^e}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{R} + \rho \mathbf{S}^e \mathbf{v}) = 0.$$

1.4. Уравнения баланса кинетической энергии

Выведем уравнения баланса кинетической энергии поступательного движения центра инерции. Для общности начнем с уравнения баланса импульса (1.3.10), справедливого для многокомпонентных систем. Запишем его в координатном виде

$$\rho \frac{dv_\mu}{dt} - \frac{\partial P_{v\mu}}{\partial x_v} = \sum_{k=1}^n \rho_k F_{k\mu} .$$

Умножим скалярно на скорость v_μ центра инерции:

$$\rho \frac{dv_\mu^2 / 2}{dt} - \frac{\partial P_{v\mu}}{\partial x_v} v_\mu = \sum_{k=1}^n \rho_k F_{k\mu} v_\mu .$$

Воспользуемся тождеством

$$\frac{\partial P_{v\mu} v_\mu}{\partial x_v} = \frac{\partial P_{v\mu}}{\partial x_v} v_\mu + P_{v\mu} \frac{\partial v_\mu}{\partial x_v} ,$$

тогда

$$\rho \frac{dv_\mu^2 / 2}{dt} - \frac{\partial P_{v\mu} v_\mu}{\partial x_v} = -P_{v\mu} \frac{\partial v_\mu}{\partial x_v} + \sum_{k=1}^n \rho_k F_{k\mu} v_\mu .$$

Отсюда находим субстанциональное уравнение баланса кинетической энергии

$$\rho \frac{de_t}{dt} - \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{v}) = -\tilde{\mathbf{P}} : \nabla \mathbf{v} + \sum_{k=1}^v \rho_k \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{v} . \quad (1.4.1)$$

Здесь $e_t \equiv \mathbf{v}^2/2$ – удельная (на единицу массы) кинетическая энергия поступательного движения центра инерции; $\frac{de_t}{dt} = \mathbf{v} \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt}$ – субстанциональная производная по времени.

Сравним (1.4.1) с общим субстанциональным уравнением баланса (1.1.10). Видно, что $\mathbf{J}_{e_t} = -\tilde{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{v}$ есть субстанциональная плотность потока кинетической энергии поступательного движения центра инерции. Если предполагать (как это часто делается в обычной гидродинамике), что тензор напряжений $\tilde{\mathbf{P}}$ симметричен $\tilde{\mathbf{P}} = \tilde{\mathbf{P}}^T$, то его можно подставить в уравнение баланса (1.4.1) вместо $\tilde{\mathbf{P}}$.

Запишем локальную форму уравнения баланса кинетической энергии. Воспользуемся соотношением (1.1.13). Тогда из (1.4.1) получим локальное уравнение баланса кинетической энергии поступательного движения центра инерции

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} - \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{v} - \rho e_t \mathbf{v}) = -\tilde{\mathbf{P}} : \nabla \mathbf{v} + \sum_{k=1}^v \rho_k \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{v} . \quad (1.4.2)$$

Сравним (1.4.2) с общим локальным уравнением баланса (1.1.4). Видно, что локальная плотность потока кинетической энергии равна

$$\mathbf{J}_{e_t}^0 = \rho e_t \mathbf{v} - \tilde{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{v} = \rho e_t \mathbf{v} + \mathbf{J}_{e_t}. \quad (1.4.3)$$

Здесь ρe_t – кинетическая энергия единицы объема; $\rho e_t \mathbf{v}$ – плотность потока кинетической энергии, вызванного конвективным движением.

В уравнениях баланса (1.4.1), (1.4.2) полную плотность σ_{e_t} источника кинетической энергии можно разделить на две части:

$$\sigma_{e_t} = \sigma_{e_t}^e + \sigma_{e_t}^i, \quad (1.4.4)$$

т. е. на «внешнюю» плотность источника, которая возникает за счет внешних сил

$$\sigma_{e_t}^e = \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{v} = \rho \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}, \quad (1.4.5)$$

и «внутреннюю»

$$\sigma_{e_t}^i = -\tilde{\mathbf{P}} : \nabla \mathbf{v}, \quad (1.4.6)$$

которая образуется из-за неоднородности внутри сплошной среды, описываемой тензором

$$\nabla \mathbf{v} \leftrightarrow \frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu}.$$

Как показывают уравнения баланса (1.4.1) и (1.4.2), если в континууме существуют внутренние неоднородности, описываемые тензором $\nabla \mathbf{v}$, то кинетическая энергия поступательного движения центра инерции не сохраняется. Тогда тензор напряжений $\tilde{\mathbf{P}}$ ни для каких моделей сплошной среды не может обращаться в нуль ($\tilde{\mathbf{P}} \neq 0$). Соответственно в случаях, когда внутренняя плотность источника кинетической энергии не равна нулю:

$$\sigma_{e_t}^i = -\tilde{\mathbf{P}} : \nabla \mathbf{v} \neq 0,$$

принято говорить о рассеянии кинетической энергии. С практической точки зрения особенно важно, когда рассеяние кинетической энергии определяется вязкостной частью $\tilde{\mathbf{P}}^b$ тензора напряжений $\tilde{\mathbf{P}} = -p\tilde{\mathbf{\delta}} + \tilde{\mathbf{P}}^b$ и градиентом скорости $\nabla \mathbf{v}$. Классической демонстрацией такого рассеяния кинетической энергии служит эксперимент Джоуля.

По поводу изложенного в этом параграфе сделаем несколько дополнительных замечаний. Уравнения баланса (1.4.1) и (1.4.2) справедливы как для однокомпонентных, так и для многокомпонентных непрерывных сред. Существенно, однако, что в уравнение баланса для многокомпонентных сред входит не полная кинетическая энергия поступательного движения

$$e_t' \equiv \frac{1}{2\rho} \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{v}_k^2 = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n C_k \mathbf{v}_k^2, \quad (1.4.7)$$

а лишь кинетическая энергия центра инерции $e_t \equiv \mathbf{v}^2/2$. Учтем, что e_t можно представить в виде

$$e_t \equiv \frac{\mathbf{v}^2}{2} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n C_k \mathbf{v}_k^2 - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n C_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v})^2. \quad (1.4.8)$$

Тогда для полной кинетической энергии имеем

$$e_t' = e_t + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n C_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v})^2.$$

Используя соотношение $\mathbf{w}_k \equiv \mathbf{v}_k - \mathbf{v}$, можно записать последний член как

$$e_d \equiv \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n C_k \mathbf{w}_k^2, \quad (1.4.9)$$

где e_d – кинетическая энергия компонентов, обусловленная их диффузией относительно локального центра инерции. Соотношение (1.4.8) показывает, что при формулировке любого соотношения для кинетической энергии центра инерции $e_t \equiv \mathbf{v}^2/2$ кинетическая энергия диффузии e_d (1.4.9) заранее вычитается из полной кинетической энергии (1.4.7). В большинстве случаев кинетической энергией диффузии e_d можно пренебречь по сравнению с кинетической энергией центра инерции.

1.5. Уравнения баланса потенциальной энергии

Ограничим рассмотрение случаем консервативных внешних сил. Это означает, что их можно описать скаляром u_k , приходящимся на единицу массы компонента k . Тогда справедливы уравнения

$$\mathbf{F}_k = -\nabla u_k \text{ и } \frac{\partial u_k}{\partial t} = 0. \quad (1.5.1)$$

Отметим, что работа консервативных сил на замкнутом пути равна нулю. Полная потенциальная энергия единицы объема многоскоростного континуума определится из соотношения

$$\rho u = \sum_{k=1}^n \rho_k u_k \quad \text{или} \quad u = \sum_{k=1}^n C_k u_k . \quad (1.5.2)$$

Здесь u – полная потенциальная энергия единицы массы многоскоростного континуума.

Выясним прежде всего, при каких условиях уравнение (1.5.1) совместимо с соотношением (1.3.7) для удельных сил многокомпонентной сплошной среды и выражением

$$\mathbf{F} = -\nabla u , \quad (1.5.3)$$

связывающим результирующую силу \mathbf{F} со скалярным потенциалом u . Из формул (1.3.7), (1.5.1) и (1.5.3) следует, что

$$\nabla u = \sum_{k=1}^n C_k \nabla u_k \quad \text{или} \quad \frac{\partial u}{\partial x_\mu} = \sum_{k=1}^n C_k \frac{\partial u_k}{\partial x_\mu} .$$

Поскольку $\frac{\partial^2 u}{\partial x_\mu \partial x_\nu} = \frac{\partial^2 u}{\partial x_\nu \partial x_\mu}$ ($\mu, \nu = 1, 2, 3$), необходимое и достаточное условие совместимости уравнений (1.3.7), (1.5.1) и (1.5.3) имеет вид

$$\sum_{k=1}^n \left[\frac{\partial C_k}{\partial x_\mu} \frac{\partial u_k}{\partial x_\nu} - \frac{\partial C_k}{\partial x_\nu} \frac{\partial u_k}{\partial x_\mu} \right] = \sum_{k=1}^n \frac{\partial (C_k, u_k)}{\partial (x_\mu, x_\nu)} = 0 .$$

Легко показать, что это условие выполняется для гравитационного и электростатического полей. В последнем случае лишь при дополнительном условии, что удельные заряды компонентов e_k постоянны.

Найдем уравнение баланса потенциальной энергии u многоскоростного континуума. Для этого умножим локальное уравнение баланса массы для компонентов (1.2.8) на потенциал u_k и просуммируем по всем компонентам k :

$$\sum_{k=1}^n u_k \frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \sum_{k=1}^n u_k \nabla \cdot \mathbf{J}_k^0 = \sum_{k=1}^n \sum_{b=1}^r u_k v_{kb} J_b .$$

Учтем, принимая во внимание (1.5.1) и (1.5.2), что

$$\sum_{k=1}^n u_k \frac{\partial \rho_k}{\partial t} = \frac{\partial \sum_{k=1}^n \rho_k u_k}{\partial t} - \sum_{k=1}^n \rho_k \frac{\partial u_k}{\partial t} = \frac{\partial \rho u}{\partial t},$$

$$\sum_{k=1}^n u_k \nabla \cdot \mathbf{J}_k^0 = \nabla \cdot \sum_{k=1}^n u_k \mathbf{J}_k^0 - \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k^0 \cdot \nabla u_k = \nabla \cdot \sum_{k=1}^n u_k \mathbf{J}_k^0 + \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k^0 \cdot \mathbf{F}_k.$$

В результате

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot \sum_{k=1}^n u_k \mathbf{J}_k^0 = - \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k^0 \cdot \mathbf{F}_k + \sum_{k=1}^n \sum_{b=1}^r u_k v_{kb} J_b.$$

Воспользуемся формулой для плотностей диффузионного потока (1.2.3) и соотношением (1.5.2). Тогда получим

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^n u_k \mathbf{J}_k + \rho u \mathbf{v} \right) = - \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{v} - \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k + \sum_{k=1}^n \sum_{b=1}^r u_k v_{kb} J_b. \quad (1.5.4)$$

Сравним соотношение (1.5.4) с общим видом уравнения баланса субстанции (1.1.4). Очевидно, что локальная плотность потока потенциальной энергии u равна

$$\mathbf{J}_u^0 = \sum_{k=1}^n u_k \mathbf{J}_k + \rho u \mathbf{v}, \quad (1.5.5)$$

где член $\rho u \mathbf{v}$ показывает изменение потенциальной энергии ρu единицы объема за счет его движения \mathbf{v} как целого. Что касается источникового члена σ_u , то его следует рассматривать как состоящий из двух частей:

$$\sigma_u = \sigma_u^e + \sigma_u^i.$$

Первые два члена в правой части (1.5.4) обусловлены действием внешних сил \mathbf{F}_k и поэтому соответствуют внешним источникам потенциальной энергии

$$\sigma_u^e = - \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{v} - \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k = - \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{v}_k. \quad (1.5.6)$$

Последний член в правой части (1.5.4) определяется химическими реакциями, происходящими в многокомпонентной сплошной среде, и поэтому соответствует внутреннему источнику потенциальной энергии

$$\sigma_u^i = \sum_{k=1}^n \sum_{b=1}^r u_k v_{kb} J_b. \quad (1.5.7)$$

Отметим, что плотность внутреннего источника потенциальной энергии σ_u^i обращается в нуль во всех случаях, когда за счет химической реакции выполняется условие

$$\sum_{k=1}^n u_k v_{kb} = 0, \quad b=1, 2, \dots, r.$$

Выполнение этого условия для гравитационного поля u_k обеспечивается сохранением массы $\sum_{k=1}^n v_{kb} = 0$, а для электростатического поля – сохранением заряда.

Найдем уравнение баланса потенциальной энергии в субстанциональной форме. Воспользуемся общим соотношением (1.1.13), положим $a \equiv u$. Тогда из (1.5.4) получим

$$\rho \frac{du}{dt} + \nabla \cdot \sum_{k=1}^n u_k \mathbf{J}_k = \sigma_u^e + \sigma_u^i. \quad (1.5.8)$$

Это соответствует общему субстанциональному уравнению баланса (1.1.10), если по определению (см. (1.5.5))

$$\mathbf{J}_u = \sum_{k=1}^n u_k \mathbf{J}_k = \sum_{k=1}^n u \mathbf{J}_k^0 - \rho u \mathbf{v} \quad (1.5.9)$$

является субстанциональной плотностью потока потенциальной энергии, а σ_u^e и σ_u^i задаются выражениями (1.5.6) и (1.5.7).

1.6. Уравнение баланса механической энергии

Определим удельную механическую энергию, т. е. энергию единицы массы сплошной среды, как сумму поступательной кинетической энергии e_t и потенциальной энергии u :

$$e_m \equiv e_t + u = \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 + u. \quad (1.6.1)$$

Относительно этой величины сделаем два замечания. Во-первых, она равна полной механической энергии единицы массы только в том случае, когда континуум содержит один компонент. В случае многокомпонентного

континуума в выражение для полной механической энергии следует включить полную поступательную кинетическую энергию, определяемую уравнением (1.4.7): $e'_t = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n C_k v_k^2$. Это будет сделано позднее. Во-вторых, поскольку удельная потенциальная энергия u в (1.6.1) не только может быть механической энергией, но и иметь электрическое происхождение, название «механическая энергия», обычно применяемое для e_m , не совсем правильное.

Сложим соотношения (1.4.1) и (1.5.8). Тогда получим субстанциональное уравнение баланса механической энергии

$$\rho \frac{de_m}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_{e_m} = \sigma_{e_m}. \quad (1.6.2)$$

Здесь $\mathbf{J}_{e_m} = \sum_{k=1}^n u_k \mathbf{J}_k - \tilde{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{v}$ – плотность субстанционального потока энергии;

$$\begin{aligned} \sigma_{e_m} = \sigma_{e_t} + \sigma_u = \sigma_{e_t}^e + \sigma_{e_t}^i + \sigma_u^e + \sigma_u^i = \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{v} - \tilde{\mathbf{P}} : \nabla \mathbf{v} - \sum_{k=1}^n \rho_k \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{v} - \\ - \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k + \sum_{k=1}^n \sum_{b=1}^r u_k v_{kb} J_b = -\tilde{\mathbf{P}} : \nabla \mathbf{v} - \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k + \sum_{k=1}^n \sum_{b=1}^r u_k v_{kb} J_b \end{aligned} \quad (1.6.3)$$

– плотность источника механической энергии (здесь использованы выражения (1.4.5), (1.4.6), (1.5.6), (1.5.7)). В соответствии со смыслом величин, определяемых выражениями (1.4.5), (1.4.6), (1.5.6), (1.5.7),

$$\sigma_{e_m}^e = - \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k \quad (1.6.4)$$

следует рассматривать как плотность «внешнего» источника механической энергии, поскольку он определяется внешними силами \mathbf{F}_k . Плотностью «внутреннего» источника механической энергии можно считать величину

$$\sigma_{e_m}^i = -\tilde{\mathbf{P}} : \nabla \mathbf{v} + \sum_{k=1}^n \sum_{b=1}^r u_k v_{kb} J_b. \quad (1.6.5)$$

Уравнение локального баланса механической энергии можно быстро получить с помощью уравнений локального баланса (1.4.2) и (1.5.4) путем их сложения:

$$\frac{\partial \rho e_m}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_{e_m}^0 = \sigma_{e_m}. \quad (1.6.6)$$

Здесь

$$\mathbf{J}_{e_m}^0 = \rho e_m \mathbf{v} - \tilde{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{v} + \sum_{k=1}^n u_k \mathbf{J}_k \quad (1.6.7)$$

– локальная плотность потока механической энергии. Первый член – конвекционный – показывает энергию, непосредственно переносимую в единицу времени единицей объема сплошной среды. Второй член – поток энергии, возникающий вследствие механической работы, производимой над единицей объема поверхностными силами. Третий член определяет плотность потока потенциальной энергии, взятой для всех компонентов.

Как уже отмечалось, для многокомпонентной сплошной среды удельная механическая энергия e_m , которая находится по (1.6.1), не равна полной удельной механической энергии. Это связано с тем, что в e_m входит лишь кинетическая энергия e_t центра инерции вместо полной кинетической энергии e_t^t , представленной выражениями (1.4.7)–(1.4.9):

$$e_t^t = e_t + e_d = \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n c_k \mathbf{w}_k^2 . \quad (1.6.8)$$

Следовательно, для многокомпонентной сплошной среды полная механическая энергия в соответствии с (1.6.8) должна быть равна

$$e_m^t = e_t^t + u = e_t + e_d + u = \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n C_k \mathbf{w}_k^2 + u .$$

Она связана с величиной e_m как $e_m = e_m^t - e_d$. Таким образом, в любом уравнении баланса, справедливом для механической энергии e_m , кинетическая энергия диффузии e_d заранее вычитается из полной механической энергии e_m^t . Это следует иметь в виду во всех случаях, когда в уравнения баланса для энергетических величин вместо полной кинетической энергии e_t^t входит только кинетическая энергия центра инерции.

В нашем обсуждении были рассмотрены только консервативные внешние поля. Однако механические и электростатические силы \mathbf{F}_k могут иметь любой вид. Поэтому в основных уравнениях сплошной среды можно учитывать действие внешних полей самой различной природы. Это дает возможность дополнить основные уравнения механики сплошных сред основными уравнениями неконсервативных (электромагнитных) внешних полей.

1.7. Локальные формы первого и второго начал термодинамики

Первое начало термодинамики. Любая термодинамическая система состоит из огромного числа частиц. Энергия этих непрерывно движущихся и взаимодействующих частиц называется энергией системы.

Полная энергия системы E^t разделяется на внешнюю и внутреннюю. Во внешнюю, или механическую, энергию E_m входит энергия движения системы как целого и потенциальная энергия системы в поле внешних сил. Остальная часть энергии системы называется ее внутренней энергией E . Таким образом, полная энергия системы равна

$$E^t = E_m + E. \quad (1.7.1)$$

Согласно общему закону сохранения и превращения энергии, $E^t = \text{const}$ или в дифференциальном виде

$$dE^t = dE_m + dE = 0. \quad (1.7.2)$$

Как следует из первого начала термодинамики, если в системе одновременно производится работа и осуществляется теплообмен с окружающей средой, то внутренняя энергия является функцией состояния и ее изменение равно

$$dE = \delta Q - \delta W. \quad (1.7.3)$$

Здесь $\delta W < 0$ – элементарная работа, производимая всеми силами, действующими на систему; δQ – элементарное количество теплоты, которое система получает ($\delta Q > 0$) или теряет ($\delta Q < 0$).

Соотношение (1.7.3) является общей формулировкой первого начала для элементарного изменения состояния всей системы. Запишем (1.7.3) для удельных величин, приходящихся на единицу массы,

$$d\varepsilon = \delta q - \delta w. \quad (1.7.4)$$

Воспользуемся общими уравнениями баланса (1.1.4) и (1.1.10) и положим $a \equiv \varepsilon$. Тогда получим локальное

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_\varepsilon^0 = \sigma_\varepsilon \quad (1.7.5)$$

и субстанциональное

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_\varepsilon = \sigma_\varepsilon \quad (1.7.6)$$

уравнения баланса для удельной внутренней энергии.

Второе начало термодинамики. Найдем уравнение баланса энтропии. Согласно основным принципам термодинамики, можем ввести некоторую функцию состояния, изменения которой определяются уравнением

$$dS = dS^e + dS^i. \quad (1.7.7)$$

Здесь dS^e означает изменение энтропии, обусловленное влиянием внешней среды (например, наличием теплового потока). Это изменение может быть как положительным, так и отрицательным ($dS^e > 0$, $dS^e < 0$) и определяться соотношением $dS^e = \delta Q/T$, обусловленным обратимым обменом теплоты между системой и окружающей средой. Второй член представляет собой положительное изменение энтропии:

$$dS^i \geq 0, \quad (1.7.8)$$

которое связано с необратимыми процессами, происходящими внутри системы и равно нулю в обратимом или равновесном случае (система адиабатно изолирована).

В термодинамике континуума общее соотношение (1.7.7) должно быть сформулировано в локальной форме. Это позволит получить уравнение баланса энтропии. Обозначим через s энтропию единицы массы континуума. Тогда энтропия S всей системы, имеющей объем V , будет выражена через локальное значение энтропии

$$S = \int_V \rho s dV.$$

Запишем (1.7.7) в виде

$$\frac{dS}{dt} = \frac{dS^e}{dt} + \frac{dS^i}{dt}. \quad (1.7.9)$$

Тогда

$$\frac{dS}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \rho s dV = \int_V \frac{\partial \rho s}{\partial t} dV,$$

$$\frac{dS^e}{dt} = -\oint_{\Sigma} \mathbf{J}_s^0 \cdot d\mathbf{\Sigma} = -\int_V \nabla \cdot \mathbf{J}_s^0 dV, \quad \frac{dS^i}{dt} = \int_V \sigma dV \geq 0,$$

т. е.

$$\int_V \frac{\partial \rho s}{\partial t} dV = - \int_V \nabla \cdot \mathbf{J}_s^0 dV + \int_V \sigma dV. \quad (1.7.10)$$

Здесь \mathbf{J}_s^0 – плотность потока энтропии; σ – производство энтропии, или возникновение энтропии за единицу времени в единице объема, которое, согласно соотношению (1.7.8), положительно ($\sigma \geq 0$).

Уравнение (1.7.9) представляет собой глобальное (интегральное) уравнение баланса энтропии. Действительно, из общих уравнений баланса (1.1.4), (1.1.10), если положить $a \equiv \varepsilon$, или непосредственно из соотношения (1.7.10) следует, что в произвольной внутренней точке континуума выполняется локальное

$$\frac{\partial \rho s}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_s^0 = \sigma \quad (1.7.11)$$

или субстанциональное

$$\rho \frac{ds}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_s = \sigma \quad (1.7.12)$$

уравнения баланса энтропии. Согласно (1.1.8), получаем

$$\mathbf{J}_s = \mathbf{J}_s^0 - \rho s \mathbf{v}, \quad (1.7.13)$$

где $\rho s \mathbf{v}$ – конвективный поток энтропии.

1.8. Локальное равновесие

Зная энтропию S , можно описать неравновесные процессы, однако вычислить ее исходя из (1.7.11) или (1.7.12) невозможно, так как нам ничего не известно о производстве энтропии. Более того, согласно равновесной классической термодинамике, такие величины, как температура, энтропия и другие, для неравновесных состояний, вообще говоря, не определяются. Эта трудность преодолевается с помощью представления о локальном равновесии. Известно, что время релаксации, т. е. время установления равновесия в неравновесной системе, растет с увеличением размеров системы. В результате отдельные макроскопически малые части системы приходят в равновесное состояние значительно раньше, чем устанавливается равновесие между этими частями. Поэтому в неравновесной термодинамике принимают положение о том, что отдельные малые части системы равновесны (точнее квазиравновесны), но имеют термодинамические параметры, медленно меняющиеся во времени и от точки к точке, хотя в целом состояние системы неравновесно.

Каковы размеры этих физически малых равновесных частей неравновесной системы и чему равны времена изменения термодинамических пара-

метров в них? Эти значения определяются экспериментально. Обычно принимается, что физически элементарный объем l^3 , с одной стороны, «содержит большое число частиц» ($v_0 \ll l^3$, v_0 – объем на одну частицу), а с другой – неоднородности макроскопических параметров $a_j(\mathbf{r})$ на длине l малы по сравнению с величиной этих параметров $\left| \frac{\partial a_j}{\partial x} \right| l \ll a_j$, следовательно,

$$v_0^{1/3} \ll l \ll \frac{a_j}{\left| \frac{\partial a_j}{\partial x} \right|}. \quad (1.8.1)$$

Время τ изменения термодинамических параметров a_j в физически малых равновесных частях намного больше времени τ_l релаксации в них и намного меньше времени τ_L , за которое устанавливается равновесие во всей системе,

$$\tau_l \ll \tau \ll \tau_L. \quad (1.8.2)$$

В условиях, когда допустимо представление о локальном равновесии (1.8.1), (1.8.2), можно построить последовательную феноменологическую неравновесную термодинамику. Состояние неравновесной системы при этом характеризуется локальными термодинамическими потенциалами, которые зависят от пространственных координат и времени только через термодинамические параметры $a_j(\mathbf{r}, t)$. При этом для термодинамических потенциалов справедливы уравнения равновесной термодинамики. Так, если в качестве термодинамических переменных a_j выбраны локальная плотность внутренней энергии $\varepsilon(\mathbf{r}, t)$, удельный объем $v(\mathbf{r}, t)$ ($v = 1/\rho$, ρ – локальная плотность) и локальные концентрации $C_k(\mathbf{r}, t)$ различных компонентов, то состояние физически элементарного объема в окрестности точки \mathbf{r} в момент времени t описывается локальной энтропией

$$s(a_j) = s[\varepsilon(\mathbf{r}, t), v(\mathbf{r}, t), c_1(\mathbf{r}, t), \dots, c_n(\mathbf{r}, t)],$$

определяемой уравнением Гиббса

$$Tds = d\varepsilon + pdv - \sum_{k=1}^n \mu_k dc_k, \quad (1.8.3)$$

где μ_k – химический потенциал k -го компонента. Это уравнение для удельных (по массе) локальных величин объединяет первое и второе начала термодинамики и является основным уравнением неравновесной термодинамики.

Субстанциональная производная по времени от соотношения (1.8.3) имеет вид

$$\frac{ds}{dt} = \sum_j \frac{\partial s}{\partial a_j} \frac{da_j}{dt} = \frac{1}{T} \frac{d\varepsilon}{dt} + \frac{p}{T} \frac{dv}{dt} - \sum_k \frac{\mu_k}{T} \frac{dc_k}{dt}. \quad (1.8.4)$$

Поскольку изменение термодинамических переменных ε , v , c_k задается соответствующим уравнением баланса, с помощью этих уравнений и соотношения (1.8.4) можно определить уравнение баланса энтропии (1.7.11) или (1.7.12).

Соотношение Гиббса (1.8.3) справедливо только для многокомпонентных смесей, и уравнение баланса энтропии можно определить для этих смесей. При определении уравнения баланса энтропии для других, более общих, моделей, необходимо модифицировать и дополнить соотношение Гиббса (1.8.3). Все эти случаи описываются обобщенным соотношением Гиббса

$$ds(a_j) = \sum_{j=1}^f \frac{\partial s}{\partial a_j} da_j = \sum_{j=1}^f \Gamma_j da_j. \quad (1.8.5)$$

Здесь $\Gamma_j = \partial s / \partial a_j$ – термостатическая интенсивная (не аддитивная) величина, сопряженная с дифференциалом обратимого изменения удельного параметра a_j . Например, в (1.8.4) это $1/T$, p/T , μ_k/T .

Соотношение (1.8.5), справедливое для любых обратимых изменений энтропии, называется энтропийной картиной, или энтропийным представлением обобщенного соотношения Гиббса. Соответствующая энергетическая картина

$$d\varepsilon = \sum_{j=1}^f \Gamma_j^* da_j \quad (1.8.6)$$

получается, если выбрать в (1.8.5) $\Gamma_1 \equiv 1/T$ и $a_1 = \varepsilon$, т. е.

$$ds = \frac{1}{T} d\varepsilon + \sum_{j=2}^f \Gamma_j da_j.$$

Тогда

$$d\varepsilon = T ds - T \sum_{j=2}^f \Gamma_j da_j. \quad (1.8.7)$$

Приравняем коэффициенты перед величинами a_j в (1.8.6) и (1.8.7): $\Gamma_1^* \equiv T$, $\Gamma_j^* \equiv -T\Gamma_j$ ($j = 2, 3, \dots, f$). Здесь Γ_j^* являются интенсивными величинами, относящимися к энергетической картине.

Если известны уравнения субстанционального баланса аддитивных величин a_j (1.1.10), то из субстанциональной производной соотношения Гиббса (1.8.5) нетрудно найти уравнение баланса энтропии в общем случае. Ограничимся определением уравнения баланса энтропии только для многокомпонентных смесей. Для этого достаточно соотношений (1.8.3) и (1.8.6).

Постулат о локальном равновесии для любой малой области континуума означает, что предполагается справедливость не только соотношения Гиббса (1.8.3), но и всех остальных термостатических потенциалов и термостатических соотношений. Так, для удельной (по массе) энергии Гиббса

$$d\Phi = \sum_{k=1}^n \mu_k c_k$$

справедливо известное соотношение

$$d\Phi = -s dT + v dp + \sum_k \mu_k c_k .$$

Из него с помощью (1.8.3) можно получить уравнение Гиббса – Дюгема

$$\sum_k c_k d\mu_k = -s dT + v dp$$

или в другой форме

$$\sum_k \rho_k d\mu_k = -\rho s dT + dp .$$

1.9. Сохранение энергии и уравнения баланса внутренней энергии

Найдем конкретный вид уравнений баланса внутренней энергии ε (1.7.5) и (1.7.6). Воспользуемся законом сохранения полной энергии (1.7.2) и запишем его в локальном виде, т. е. в виде, справедливом для каждой точки сплошной среды. Для этого введем полную удельную энергию единицы массы как сумму удельной механической и удельной внутренней энергии

$$e \equiv e_m + \varepsilon = \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 + u + \varepsilon . \quad (1.9.1)$$

Тогда полная энергия всей системы, имеющей объем V , может быть выражена через локальное значение полной энергии $E^t = \int_V \rho e dV$. Используя

обычную процедуру перехода от интегральной $\frac{dE^t}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \rho e dV = 0$ к локальной форме уравнения сохранения полной энергии (см. (п. 1.1)), находим

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_e^0 = 0. \quad (1.9.2)$$

В уравнении баланса механической энергии (1.6.6) плотность потока механической энергии $\mathbf{J}_{e_m}^0$ определяется выражением (1.6.7), а ее источник σ_{e_m} – (1.6.3). Вычтем из (1.9.2) соответствующие части (1.6.6). Тогда получим уравнение баланса

$$\frac{\partial \rho(e - e_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{J}_e^0 - \mathbf{J}_{e_m}^0) = -\sigma_{e_m}. \quad (1.9.3)$$

Сравним (1.9.3) с (1.7.5), (1.9.1) и уравнением (1.6.7). Видно, что (1.9.3) является локальным уравнением баланса внутренней энергии $\varepsilon = e - e_m$ с плотностью потока

$$\mathbf{J}_\varepsilon^0 = \mathbf{J}_e^0 - \mathbf{J}_{e_m}^0 = \mathbf{J}_e^0 - \rho e_m \mathbf{v} + \tilde{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{v} - \sum_k u_k \mathbf{J}_k \quad (1.9.4)$$

и плотностью источника (см. (1.6.3))

$$\sigma_\varepsilon = -\sigma_{e_m} = \tilde{\mathbf{P}} : \nabla \mathbf{v} + \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k - \sum_{k=1}^n \sum_{b=1}^r u_k v_{kb} J_b. \quad (1.9.5)$$

Предположим, что при химических превращениях выполняется условие

$$\sum_{k=1}^n u_k v_{kb} = 0. \quad (1.9.6)$$

Введем *тепловой поток* $\mathbf{J}_q = \mathbf{J}_\varepsilon^0 - \rho \varepsilon \mathbf{v}$ как величину, получающуюся при вычитании из \mathbf{J}_ε^0 плотности конвективного потока $\rho \varepsilon \mathbf{v}$ внутренней энергии. Тогда из (1.9.4) имеем

$$\mathbf{J}_q = \mathbf{J}_\varepsilon^0 - \rho \varepsilon \mathbf{v} = \mathbf{J}_e^0 - \rho(e_m + \varepsilon) \mathbf{v} + \tilde{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{v} - \sum_k u_k \mathbf{J}_k. \quad (1.9.7)$$

В результате из (1.9.3) с учетом (1.9.4), (1.9.6) и (1.9.7) находим уравнение локального баланса для внутренней энергии

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{J}_q + \rho \varepsilon \mathbf{v}) = \tilde{\mathbf{P}} : \nabla \mathbf{v} + \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k . \quad (1.9.8)$$

Это уравнение баланса представляет собой первое начало термодинамики в локальной форме. С помощью соотношения (1.1.13), полагая $a \equiv \varepsilon$, преобразуем (1.9.8) к субстанциональной форме

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_q = \tilde{\mathbf{P}} : \nabla \mathbf{v} + \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k . \quad (1.9.9)$$

Сравнение (1.9.9) с общей формулой субстанционального баланса (1.1.10) показывает, что поток тепла \mathbf{J}_q , введенный соотношением (1.9.7), совпадает с субстанциональной плотностью потока внутренней энергии \mathbf{J}_ε :

$$\mathbf{J}_q \equiv \mathbf{J}_\varepsilon = \mathbf{J}_\varepsilon^0 - \rho \varepsilon \mathbf{v} . \quad (1.9.10)$$

Это тождество следует рассматривать как точное определение понятия потока тепла.

Получим более простую форму первого начала термодинамики (1.9.9). Ограничимся случаем симметричного тензора напряжений $\tilde{\mathbf{P}} : P_{\mu\nu} = P_{\nu\mu}$. Тогда его можно разложить на скалярную гидростатическую часть p и тензор вязких напряжений $\tilde{\mathbf{P}}^b$ в (1.3.14), причем $\tilde{\mathbf{P}}^b \leftrightarrow P_{\mu\nu}^b \equiv P_{\nu\mu}^b$. В результате

$$\sigma_\varepsilon = \tilde{\mathbf{P}} : \nabla \mathbf{v} + \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k = -p \nabla \cdot \mathbf{v} + \tilde{\mathbf{P}}^b : \nabla \mathbf{v} + \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k . \quad (1.9.11)$$

Потребуем, чтобы поток тепла \mathbf{J}_q удовлетворял уравнению баланса

$$\rho \frac{\delta q}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_q = 0 . \quad (1.9.12)$$

Здесь δq – количество теплоты, переданное единице массы. С учетом приведенных соотношений уравнение теплового баланса (1.9.9) принимает вид

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{\delta q}{dt} - \frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \tilde{\mathbf{P}}^b : \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k . \quad (1.9.13)$$

Необходимо запомнить, что тождество (1.9.10) $\mathbf{J}_q \equiv \mathbf{J}_\varepsilon$ является точным определением потока тепла \mathbf{J}_q , а уравнение теплового баланса (1.9.12) без источников служит лишь для того, чтобы уравнения баланса внутренней энергии (1.9.8), (1.9.9) представить в форме (1.9.13), более привычной при

формулировке первого начала термодинамики. Сравнивая уравнение (1.7.4), выражающее первое начало, с уравнением баланса внутренней энергии (1.9.13), замечаем, что (1.9.13) и есть первое начало в локальной форме, которое определяет изменение удельной (по массе) внутренней энергии $d\varepsilon$ как сумму подведенного тепла δq и произведенной работы

$$\delta w = \left(-\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \tilde{\mathbf{P}}^b : \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k \right) dt .$$

Здесь первый член справа – работа расширения единицы массы континуума; второй – работа, производимая против сил трения; третий – работа внешних сил.

Уравнения баланса (1.9.8), (1.9.9) и (1.9.13), выражающие первое начало термодинамики, показывают, что в общем случае внутренняя энергия ε не сохраняется.

1.10. Уравнения баланса энтропии. Производство энтропии

Определим конкретную форму уравнения баланса энтропии (1.7.12)

$$\rho \frac{ds}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_s = \sigma, \quad \sigma \geq 0,$$

для модели многокомпонентной системы. Воспользуемся уравнением Гиббса (1.8.4). Подставим в него выражение (1.9.9) для $\frac{d\varepsilon}{dt}$ с учетом $\tilde{\mathbf{P}} = -p\tilde{\mathbf{\delta}} + \tilde{\mathbf{P}}^b$:

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_q = -p \nabla \cdot \mathbf{v} + \tilde{\mathbf{P}}^b : \nabla \mathbf{v} + \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k .$$

Кроме того, воспользуемся соотношением (1.2.10) для $\frac{dc_k}{dt}$. В итоге

$$\rho \frac{ds}{dt} + \frac{\nabla \cdot \mathbf{J}_q}{T} - \sum_{k=1}^n \frac{\mu_k}{T} \nabla \cdot \mathbf{J}_k = \frac{1}{T} \tilde{\mathbf{P}}^b : \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{T} \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{F}_k - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^n \sum_{b=1}^r \mu_k v_{kb} J_b . \quad (1.10.1)$$

Это уравнение не соответствует уравнению субстанционального баланса энтропии (1.7.12). Преобразуем его с помощью соотношений

$$\frac{1}{T} \nabla \cdot \mathbf{J}_q = \nabla \cdot \frac{\mathbf{J}_q}{T} - \mathbf{J}_q \cdot \nabla \frac{1}{T},$$

$$\frac{\mu_k}{T} \nabla \cdot \mathbf{J}_k = \nabla \cdot \frac{\mu_k \mathbf{J}_k}{T} - \mathbf{J}_k \cdot \nabla \frac{\mu_k}{T}, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \rho \frac{ds}{dt} + \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{J}_q - \sum_{k=1}^n \mu_k \mathbf{J}_k}{T} \right) &= - \sum_{k=1}^n \sum_{b=1}^r J_b \frac{\mu_k}{T} \mathbf{v}_{kb} + \mathbf{J}_q \cdot \nabla \frac{1}{T} + \\ &+ \frac{1}{T} \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \left(\mathbf{F}_k - T \nabla \frac{\mu_k}{T} \right) + \frac{1}{T} \tilde{\mathbf{P}}^b : \nabla \mathbf{v}. \end{aligned} \quad (1.10.2)$$

Сравним (1.10.2) с общим уравнением (1.7.12). В результате субстанциональная плотность потока энтропии \mathbf{J}_s равна

$$\mathbf{J}_s = \frac{\mathbf{J}_q - \sum_{k=1}^n \mu_k \mathbf{J}_k}{T} \quad (1.10.3)$$

и связана с наличием потока тепла \mathbf{J}_q и потока диффузии \mathbf{J}_k .

Производство энтропии

$$\sigma = - \sum_{k=1}^n \sum_{b=1}^r J_b \frac{\mu_k}{T} \mathbf{v}_{kb} + \mathbf{J}_q \cdot \nabla \frac{1}{T} + \frac{1}{T} \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \left(\mathbf{F}_k - T \nabla \frac{\mu_k}{T} \right) + \frac{1}{T} \tilde{\mathbf{P}}^b : \nabla \mathbf{v} \geq 0. \quad (1.10.4)$$

Введем новые величины, которые называют «термодинамическими силами» или «химическим средством». Таковыми для реакции является скалярная величина

$$A_b = - \sum_{k=1}^n \frac{\mu_k}{T} \mathbf{v}_{kb}, \quad b = 1, 2, \dots, r, \quad (1.10.5)$$

сопряженная с J_b – скоростью b -й химической реакции, тоже скалярной величиной.

Вектор

$$\mathbf{X}_q = - \frac{1}{T^2} \nabla T = \nabla \frac{1}{T} \quad (1.10.6)$$

представляет собой термодинамическую силу, сопряженную с вектором плотности потока тепла \mathbf{J}_q .

Термодинамические силы диффузии включают в себя внешние силы \mathbf{F}_k :

$$\mathbf{X}_k = \frac{\mathbf{F}_k}{T} - \nabla \frac{\mu_k}{T}, \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (1.10.7)$$

и сопряжены с плотностью потока диффузии \mathbf{J}_k . Тензорная сила вязкости

$$\tilde{\mathbf{X}} = \frac{1}{T} \nabla \mathbf{v} \quad (1.10.8)$$

сопряжена с симметричной частью тензора вязкого напряжения $\tilde{\mathbf{P}}^b$ со следом, равным нулю, и вызывает явления вязкого сдвига.

С помощью термодинамических сил производство энтропии (1.10.4) можно представить в виде

$$\sigma = \sum_{b=1}^r J_b A_b + \mathbf{J}_q \cdot \mathbf{X}_q + \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{X}_k + \tilde{\mathbf{P}}^b : \tilde{\mathbf{X}} \geq 0. \quad (1.10.9)$$

Согласно (1.10.9), производство энтропии включает в себя четыре члена, соответствующие источникам неравновесных процессов и имеющие различную физическую природу. Эти источники определяются билинейными формами от плотностей потоков и сил, имеющих различные тензорные ранги. Так, источник энтропии, обусловленный химическими реакциями, определяется как сумма билинейных форм скаляров J_b и A_b :

$$\sigma_c \equiv \sum_{b=1}^r J_b A_b.$$

Производство энтропии, относящееся к теплопроводности, определяется скалярным произведением векторов \mathbf{J}_q и \mathbf{X}_q :

$$\sigma_q = \mathbf{J}_q \cdot \mathbf{X}_q.$$

Производство энтропии, обусловленное диффузией, есть сумма скалярных произведений векторов \mathbf{J}_k и \mathbf{X}_k :

$$\sigma_d = \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{X}_k.$$

Наконец, производство энтропии, относящееся к вязким явлениям $\sigma_v = \tilde{\mathbf{P}}^b : \tilde{\mathbf{X}}$, определяется билинейной формой от плотностей потока импульса (1.3.15)

$$\tilde{\mathbf{P}}^b = \mu \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{2}{3} \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} \right) + \xi \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda}$$

и термодинамических сил $\tilde{X} = \frac{1}{T} \frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu}$.

Выражение (1.10.9) справедливо в случае, когда одновременно происходят четыре указанных процесса. Его можно получить как сумму значений производства энтропии в каждом из этих процессов. Следовательно, в общем случае σ можно рассматривать как билинейную форму от f независимых скалярных потоков J_j и скалярных сил X_j , если их писать в координатном виде

$$\sigma = \sum_{j=1}^f J_j X_j. \quad (1.10.10)$$

1.11. Линейные конститутивные законы. Соотношения взаимности Онзагера. Принцип Кюри

В равновесном состоянии термодинамические силы X_j , потоки J_j и производство энтропии σ равны нулю. Поэтому при малых отклонениях от равновесия естественно положить линейную связь между потоками и силами:

$$J_j = f(X_j) = f(0) + \left. \frac{\partial f}{\partial X_j} \right|_{X_j=0} X_j + \dots$$

Это условие, а также наиболее общая связь между независимыми потоками и термодинамическими силами выражается в линейном приближении с помощью линейных конститутивных законов (уравнений)

$$J_j = \sum_{l=1}^f L_{jl} X_l, \quad j = 1, 2, \dots, f. \quad (1.11.1)$$

Здесь J_j и X_l – независимые скалярные термодинамические потоки и силы. В случае векторных и тензорных процессов под J_j и X_l понимают все декартовы компоненты соответствующих векторных и тензорных величин, входящих в билинейные выражения для производства энтропии (1.10.9).

Коэффициенты L_{jl} в линейных конститутивных законах (1.11.1) называются феноменологическими или кинетическими, причем диагональные коэффициенты L_{jj} определяют «прямые» явления переноса, а недиагональные

коэффициенты L_{jl} – «перекрестные» или «сопряженные» процессы. Так, по закону Фурье $\mathbf{J}_q = -\lambda \nabla T$ градиент температуры вызывает поток тепла. Зависимость (1.10.6) показывает, что L_{jj}^q связан с λ соотношением $\lambda = L_{jj}^q / T^2$. По закону Фика градиент концентрации определяет диффузию

$$\mathbf{J}_k^m = -D \nabla C_k,$$

по закону Ома градиент потенциала вызывает ток $\mathbf{j} = -\sigma \nabla u$ и т. д.

Наряду с этими прямыми процессами переноса возникают и сопряженные с ними процессы. Например, при существовании градиента температуры кроме переноса тепла может происходить и перенос массы (термодиффузия). Такие перекрестные процессы характеризуются недиагональными коэффициентами L_{jl} . Так, плотность потока массы J_1 при наличии градиента концентрации и градиента температуры равна (см. п. 3.2 и задачу 2.15, Т. 1)

$$J_1^m = -L_{11} \nabla c - L_{12} \nabla T.$$

В линейный закон (1.11.1) входит большое число феноменологических параметров L_{jl} . Однако число независимых коэффициентов удастся уменьшить, если учесть соображения временной и пространственной симметрии.

В 1931 г. Л. Онзагер, исходя из инвариантности микроскопических уравнений движений относительно изменения знака времени (временная симметрия) и представления о неравновесном состоянии системы, вызванном внешними силами, как крупной флуктуации равновесной системы, установил, что в области линейности необратимых процессов матрица кинетических коэффициентов симметрична:

$$L_{jl} = L_{lj}, \quad l, j = 1, 2, \dots, f. \quad (1.11.2)$$

Физически этот второй принцип термодинамики линейных необратимых процессов означает, что имеется некоторая симметрия во взаимодействии различных процессов: возрастание потока J_j , обусловленное увеличением на единицу силы X_j (при постоянных $X_{l \neq j}$), равно возрастанию потока J_j , обусловленному увеличением на единицу X_l .

Ряд свойств кинетических коэффициентов можно установить исходя непосредственно из термодинамических законов линейных необратимых процессов. Действительно, для таких процессов общая формула (1.10.10)

$$\sigma = \sum_{j=1}^f J_j X_j$$

для производства энтропии принимает квадратичное по термодинамическим силам выражение (см. (1.11.1))

$$\sigma = \sum_{j,l} L_{jl} X_j X_l \geq 0. \quad (1.11.3)$$

По второму началу термодинамики для необратимых процессов $\sigma > 0$ и, следовательно, квадратичная форма (1.11.3), положительно определенная, накладывает некоторые ограничения на кинетические коэффициенты L_{jl} .

Как известно, необходимым и достаточным условием положительности симметричной матрицы L_{jl} является положительность детерминанта

$$\det L_{jl} = \begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} & \dots & L_{1f} \\ L_{21} & L_{22} & \dots & L_{2f} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ L_{f1} & L_{f2} & \dots & L_{ff} \end{vmatrix} > 0$$

и главных миноров, т. е. диагональные коэффициенты должны быть положительными: $L_{jj} > 0$. Недиагональные коэффициенты при этом должны удовлетворять неравенствам

$$\begin{vmatrix} L_{jj} & L_{j,j+1} \\ L_{j+1,j} & L_{j+1,j+1} \end{vmatrix} > 0, \quad \begin{vmatrix} L_{jj} & L_{j,j+1} & L_{j,j+2} \\ L_{j+1,j} & L_{j+1,j+1} & L_{j+1,j+2} \\ L_{j+2,j} & L_{j+2,j+1} & L_{j+2,j+2} \end{vmatrix} > 0 \quad \text{и т. д.}$$

Дальнейшее уменьшение числа феноменологических коэффициентов можно получить при учете симметрии среды. В выражении линейного конститутивного закона (1.11.1) входят потоки и силы, из которых одни являются скалярами (в процессах с химическими реакциями, а также с объемной вязкостью), другие – векторами (потоки массы и теплоты), а третьи – тензорами (в процессах со сдвиговой вязкостью).

В зависимости от симметрии среды система линейных уравнений (1.11.1) должна быть инвариантна относительно соответствующих ортогональных преобразований. При преобразованиях компоненты входящих в (1.11.1) различных величин преобразуются по-разному, в то время как установленная между потоком и силой связь не может изменяться при преобразованиях, что приводит в случае изотропных систем к сохранению связей лишь между потоками и силами одной тензорной размерности. Это выражает принцип Кюри о сохранении симметрии причины в симметричности следствий. Согласно линейному закону (1.11.1), каждый декартовый компонент потока J_j может, в принципе, зависеть от декартовых компонентов всех тер-

модинамических сил, однако по принципу Кюри в зависимости от симметрии среды может оказаться, что компоненты потоков будут зависеть не от всех компонентов термодинамических сил. Следовательно, не все причины вызывают перекрестные эффекты. Например, в результате химической реакции (скалярный процесс) не может возникнуть диффузионный поток (векторный процесс).

Имеется одно важное видоизменение соотношений Онзагера (1.11.2): $L_{jl} = L_{lj}$ ($l, j = 1, 2, \dots, f$), связанное с особенностями принципа микроскопической обратимости в случае движения электрических зарядов в магнитном поле и в задачах, где встречается сила Кориолиса. Уравнения движения в магнитном поле, как известно, не изменяются при перемене знака времени лишь при условии одновременного изменения направления индукции поля. В соответствии с этим для системы в магнитном поле величины L_{jb} и L_{bj} в равенстве (1.11.2) надо брать для противоположных направлений индукции поля $L_{jb}(\mathbf{B}) = L_{bj}(-\mathbf{B})$.

1.12. Изотропный ньютоновский континуум

Применим принцип Кюри и соотношения взаимности Онзагера к изотропному ньютоновскому континууму

$$\sigma = \sum_j J_j X_j, \quad J_j = \sum_{l=1}^f L_{jl} X_l, \quad L_{jl} = L_{lj},$$

$$\tilde{\mathbf{P}}^b = \mu \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{2}{3} \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} \right) + \xi \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda}.$$

Тогда (1.10.4) в координатной форме примет вид

$$\sigma = -\frac{1}{T^2} J_\mu^q \frac{\partial T}{\partial x_\mu} + \frac{1}{T} \sum_{k=1}^n \mathbf{J}_{k\mu}^m \cdot \left(\mathbf{F}_{k\mu} - T \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(\frac{\mu_k}{T} \right) \right) + \frac{1}{T} \mathbf{P}_{\mu\nu}^b \frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} - \sum_{k=1}^n \sum_{b=1}^r J_b \frac{\mu_k}{T} \mathbf{v}_{kb}.$$

Рассмотрим

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\mu\nu}^b \frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} &= \mathbf{P}_{\mu\nu}^b \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} - \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} \right) \right] = \\ &= \mathbf{P}_{\mu\nu}^b \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{2}{3} \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} \right) + \mathbf{P}_{\mu\nu}^b \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} - \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} \right) + \mathbf{P}_{\mu\nu}^b \frac{1}{3} \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} = \end{aligned}$$

$$= \frac{\mu}{2} \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{2}{3} \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} \right)^2 + \frac{\xi}{3} \delta_{\mu\nu} \delta_{\mu\nu} \left(\frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} \right)^2 + \frac{\mu}{2} \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} \right) \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} - \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} \right) -$$

$$- \frac{\mu}{3} \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} - \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} \right) = \frac{\mu}{2} \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{2}{3} \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} \right)^2 + \xi \left(\frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} \right)^2.$$

Здесь величина $\partial v_\lambda / \partial x_\lambda$ представляет собой скаляр. Это физически понятно, так как тензор можно свернуть и получить скаляр, а из вектора получить скаляр нельзя.

В результате последовательного применения принципа Кюри находим, что производство энтропии в изотропном ньютоновском континууме обусловлено:

1. Скалярными термодинамическими силами и потоками

$$J_b = - \sum_{k=1}^n \frac{L_{kb}}{T} \mu_k v_{kb} + \frac{L_b^{v_\lambda}}{T} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda}, \quad b = 1, 2, \dots, r.$$

Отсюда видно, что химическая реакция зависит от гидродинамики.

2. Векторными термодинамическими силами и потоками тепла

$$J_\mu^q = - \frac{L_{qq}}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_\mu} - \sum_{k=1}^n \frac{L_{qk}}{T} \left(T \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(\frac{\mu_k}{T} \right) - \mathbf{F}_{k\mu} \right).$$

3. Векторными термодинамическими силами и потоками диффузии

$$J_{i\mu}^m = - \frac{L_{iq}}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_\mu} - \sum_{k=1}^n \frac{L_{ik}}{T} \left(T \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(\frac{\mu_k}{T} \right) - \mathbf{F}_{k\mu} \right), \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

4. Тензорными термодинамическими силами и потоками импульса

$$\mathbf{P}_{\mu\nu}^b = \frac{L_{rr}}{T} \left(\frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{2}{3} \delta_{\mu\nu} \frac{\partial v_\lambda}{\partial x_\lambda} \right).$$

Единственное, что нам неизвестно, это кинетические коэффициенты L . Данное обстоятельство неудивительно, так как рассмотренная теория сплошной среды является феноменологической.

1.13. Об уравнении теплопроводности в средах с памятью

Современная термодинамика отличается широким многообразием подходов и методов [1–4]. Их различие касается не только объектов исследования, исходных предпосылок, уровня математической строгости, но и целей, которые ставятся перед термодинамической теорией. Согласно традиции, идущей от классической термодинамики необратимых процессов брюссельской школы, целью термодинамической теории континуума является построение полевых уравнений сплошной среды, и эта цель достигается во многих современных направлениях термодинамики. Фактически такое построение заключается лишь в выводе материальных или, как теперь говорят, конститутивных уравнений, которые вместе с уравнениями, выражающими законы сохранения в локальной форме (п. 1.1–1.3), образуют замкнутую систему полевых уравнений.

Для достижения поставленной цели неизбежно приходится использовать предположения, выходящие за рамки чистой термодинамики и приводящие к сужению области применимости теории. В этом состоит одна из причин, по которой такая постановка задачи позволяет рассмотреть сравнительно узкий класс термодинамических систем.

Задача интенсивно развивающегося в последние десятилетия направления термодинамической теории, известного под названием «рациональная термодинамика» [6], состоит в выделении из описанного обширного класса конститутивных уравнений подкласса термодинамически допустимых уравнений.

Разработаны методы исследования свойств конститутивных уравнений, вытекающих из термодинамических ограничений, для самых разнообразных термодинамических систем и свойств релаксационных функций сред с памятью [7]. Для любой феноменологической модели сред с памятью конститутивные уравнения должны учитывать предысторию состояния среды.

Кратко остановимся на ограничениях конститутивных уравнений (для теплового потока и внутренней энергии), вытекающих из второго начала термодинамики в форме Клаузиуса – Дюгема, применительно к модели теплопроводящих сред с памятью.

Две наиболее широко используемые в современной термодинамике формулировки второго начала восходят к двум классическим формулировкам:

а) в каждом циклическом процессе интеграл приведенного тепла неположителен (см. (1.6.21), Т. 1):

$$\oint \frac{dQ}{T} \leq 0 ; \quad (1.13.1)$$

б) для любого процесса выполняется неравенство

$$\int \frac{dQ}{T} \leq S_1 - S_2, \quad (1.13.2)$$

где Q – количество тепла, полученное системой к текущему моменту; T – абсолютная температура; S_1, S_2 – энтропия системы в начальном и конечном состоянии.

Термодинамический подход, базирующийся на современном варианте (формулировка б), принадлежит Клаузиусу. Если термодинамическая система является сплошной средой, то интеграл приведенного тепла можно представить в локальной формулировке и тогда неравенства (1.13.1), (1.13.2) сводятся к следующему виду [6]:

$$\oint -\frac{1}{\rho} \operatorname{div} \left[\frac{\vec{q}}{T} + \frac{K}{T} \right] dt \leq 0,$$

$$s(t_2) - s(t_1) \geq \int_{t_1}^{t_2} \left[-\frac{1}{\rho} \operatorname{div} \left(\frac{\vec{q}}{T} \right) + \frac{K}{T} \right] dt,$$

где ρ – плотность среды, \vec{q} – плотность теплового потока, K – внутреннее тепловыделение на единицу массы, s – удельная энтропия.

Последнее неравенство, которое можно представить в дифференциальной форме

$$s(t_1) \geq -\frac{1}{\rho} \operatorname{div} \left(\frac{\vec{q}}{T} \right) + \frac{K}{T}, \quad (1.13.3)$$

называется *неравенством Клаузиуса – Дюгема*.

В классической нелинейной теории теплопроводности, описывающей высокоинтенсивные и быстропротекающие тепловые процессы, новые интересные результаты получены в работах школы А. А. Самарского: обнаружены эффекты локализации тепла, режимы с обострением и т. д. В процессах такого типа, как правило, есть период, когда скорость изменения температуры неограниченно нарастает, что требует учета эффектов релаксации тепловых процессов, т. е. учета тепловой памяти.

Разработан эффективный метод построения нелинейного уравнения теплопроводности для сред с памятью [7], которое асимптотически переходит в классическое нелинейное уравнение, если память «выключается» путем замедления процесса. Получены свойства релаксационных функций, играющих в этих уравнениях роль нелинейных коэффициентов переноса.

Конститутивные уравнения для внутренней энергии E и плотности теплового потока \vec{q} можно представить в виде

$$E = E_0(T_0) + \beta(T_0, 0)T(t) + \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial z} \beta(T_0, \gamma) T(t - \gamma) d\gamma, \quad (1.13.4)$$

$$\bar{q} = -\alpha(T_0, 0)\nabla T(t) - \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial \gamma} \alpha(T_0, \gamma) \nabla T(t - \gamma) d\gamma, \quad (1.13.5)$$

где α и β называются *функциями релаксации* теплового потока и внутренней энергии соответственно; параметры с индексом «0» соответствуют некоторому равновесному состоянию.

Для выполнения второго начала термодинамики в форме неравенства Клаузиуса – Дюгема (1.13.3) необходимо, чтобы релаксационные функции удовлетворяли неравенствам [7]:

$$\int_0^\infty [\beta(T_0, \gamma) - \beta(T_0, \infty)] \cos \omega \gamma d\gamma \leq 0, \quad (1.13.6)$$

$$\alpha(T_0, 0) + \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial \gamma} \alpha(T_0, \gamma) \cos \omega \gamma d\gamma \geq 0. \quad (1.13.7)$$

Подставляя соотношения (1.13.4), (1.13.5) в уравнение баланса энергии, получим следующее уравнение теплопроводности:

$$\begin{aligned} & \beta(0)C \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + \int_0^\infty \beta'(\gamma)C [T(x, t - \gamma)] \frac{\partial T(x, t - \gamma)}{\partial t} d\gamma = \\ & = \int_0^\infty \alpha'(\gamma) \nabla [\lambda(T(x, t - \gamma)) \nabla T(x, t - \gamma)] d\gamma + K(x, t). \end{aligned} \quad (1.13.8)$$

При замедлении и ускорении процесса уравнение теплопроводности асимптотически переходит в уравнения разных типов: в первом случае (среды типа Фурье, $\alpha(0) \neq 0$) – в параболическое, во втором (среды типа Максвелла, $\alpha(0) = 0$) – в гиперболическое. Это значит, что при быстрых процессах решения уравнения теплопроводности могут обладать всем разнообразием волновых свойств, а при замедлении процессов решения постепенно переходят в характерные для классической нелинейной среды Фурье. Такие качественные особенности поведения решений при увеличении скорости изменения температуры могут существенно повлиять на ход режимов с обострением на заключительной стадии.

Рассмотрим простой частный случай уравнения (1.13.8). Предположим, что

$$\beta(\gamma) = 1, \quad \alpha(\gamma) = 1 - \exp\left(\frac{-\gamma}{\tau}\right). \quad (1.13.9)$$

Подставим функции (1.13.9) в (1.13.8) и сложим полученное уравнение с этим же уравнением, предварительно продифференцированным по времени и умноженным на τ . В результате

$$C(T) \frac{\partial T}{\partial t} + \tau \frac{\partial}{\partial t} \left[C(T) \frac{\partial T}{\partial t} \right] = \nabla[\lambda(T) \nabla T] + K + \tau \frac{\partial K}{\partial t}.$$

Таким образом, имеем термодинамически обоснованное построение нелинейного обобщения гиперболического уравнения теплопроводности для сред с памятью. Это уравнение даст наипростейшую возможность одновременного учета нелинейности и релаксации в процессах теплопроводности.

В заключение отметим, что термодинамические принципы при построении новых моделей играют важную конструктивную роль, значительно сужая область возможного поиска адекватных конститутивных уравнений.

Литература

1. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1974.
2. Де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964.
3. Базаров И. П., Геворкян Э. В., Николаев П. Н. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика. М.: Изд-во Московского ун-та, 1989.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1988.
5. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред: В 2 ч. М.: Наука, 1987.
6. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. М.: Мир, 1975.
7. Колпашиков В. Л., Шнип А. И. Термодинамика и модели неклассических сред. Минск, 1986 (Препринт / ИТМО АН БССР, № 9).

ПРИЛОЖЕНИЯ

ЭЛЕМЕНТЫ ТЕНЗОРНОГО ИСЧИСЛЕНИЯ

Приложение 1

Обозначения

Используем следующие обозначения: k – для компонентов смеси; a – для химических реакций в смеси; μ, ν – для тензорных индексов.

В трехмерном евклидовом пространстве физическую величину, имеющую вид тензора ранга α , обозначим как $\tilde{\mathbf{T}}$. Тензор состоит из 3^α компонентов. Скалярная величина представляет собой тензор нулевого ранга и обозначим ее, например, a .

Векторы являются тензорами первого ранга (обозначим их \mathbf{v}) и имеют компоненты v_μ ($\mu = 1, 2, 3$). Тензоры второго ранга $\tilde{\mathbf{T}}$ включают в себя компоненты $T_{\mu\nu}$ ($\mu, \nu = 1, 2, 3$).

В дальнейшем операции между величинами различного тензорного ранга будут указаны в символической форме, а после значка \leftrightarrow , означающего эквивалентность, запишутся как компоненты. Пользуемся только декартовой правосторонней системой координат. Кроме того, применяем правило, согласно которому по индексу, встречающемуся в выражении дважды (или много раз), автоматически производится суммирование. Поэтому, например, запишем $v_\mu = T_{\mu\nu} w_\nu$ ($\mu, \nu = 1, 2, 3$) вместо $v_\mu = \sum_{\nu=1}^3 T_{\mu\nu} w_\nu$ ($\mu = 1, 2, 3$), учитывая, что по повторяющемуся индексу идет суммирование от 1 до 3. Кроме того, не используем текущих индексов, так как они всегда принимают значения 1, 2, 3 и обозначают декартовы координаты тензорных величин.

Приложение 2

Основные положения и простейшие операции

Скаляры и векторы являются частным случаем тензорных величин, поэтому достаточно дать основные формулы тензорной алгебры.

Единичному тензору $\tilde{\mathbf{d}}$ соответствует матрица $[\delta_{\mu\nu}]$, т. е. $\tilde{\mathbf{d}} \leftrightarrow [\delta_{\mu\nu}]$,

где $\delta_{\mu\nu} = \begin{cases} 0, & \mu \neq \nu; \\ 1, & \mu = \nu; \end{cases}$ – дельта-символ Кронекера.

Тензоры $\tilde{\mathbf{R}} = \tilde{\mathbf{S}}$, если $R_{\mu\nu} = S_{\mu\nu}$, т. е. если равны все их элементы и соответственно равны матрицы $[R_{\mu\nu}] = [S_{\mu\nu}]$. Суммой (разностью) двух тензоров $\tilde{\mathbf{R}}$ и $\tilde{\mathbf{S}}$ называется тензор $\tilde{\mathbf{T}}$, компоненты которого получаются сложением (вычитанием) соответствующих компонентов тензоров $\tilde{\mathbf{R}}$ и $\tilde{\mathbf{S}}$. По определению

$$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{R}} \pm \tilde{\mathbf{S}} \leftrightarrow T_{\mu\nu} = R_{\mu\nu} \pm S_{\mu\nu}$$

или в матричной форме

$$[T_{\mu\nu}] = [R_{\mu\nu}] \pm [S_{\mu\nu}].$$

Произведение тензора $\tilde{\mathbf{T}}$ на скаляр a есть тензор $\tilde{\mathbf{S}}$, компоненты которого получаются умножением на a соответствующих компонентов тензора $\tilde{\mathbf{T}}$:

$$\tilde{\mathbf{S}} = a\tilde{\mathbf{T}} \leftrightarrow S_{\mu\nu} = aT_{\mu\nu}.$$

В дальнейшем матричный формализм не приводится, но операции над тензорами второго ранга всегда можно представить с помощью операций над матрицами.

Приложение 3

Симметричные и антисимметричные тензоры

Если компоненты тензора $\tilde{\mathbf{T}}$, различающиеся порядком индексов, поменять местами, то получится транспонированный тензор

$$\tilde{T}_{\mu\nu} = T_{\nu\mu}. \quad (1)$$

Тензор называется симметричным, если

$$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\tilde{\mathbf{T}}} \leftrightarrow T_{\mu\nu} = T_{\nu\mu}, \quad (2)$$

и антисимметричным, если

$$\tilde{\mathbf{T}} = -\tilde{\tilde{\mathbf{T}}} \leftrightarrow T_{\mu\nu} = -T_{\nu\mu}. \quad (3)$$

Из определений (2) и (3) следует, что симметричный тензор второго ранга имеет шесть, а антисимметричный – три независимых компонента. Так как компоненты любого тензора могут быть представлены в виде

$$T_{\mu\nu} = \frac{1}{2}(T_{\mu\nu} + T_{\nu\mu}) + \frac{1}{2}(T_{\mu\nu} - T_{\nu\mu}),$$

то в произвольном тензоре можно выделить симметричную

$$\tilde{\mathbf{T}}^s = \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{T}} + \tilde{\tilde{\mathbf{T}}}) \leftrightarrow T_{\mu\nu}^s = \frac{1}{2}(T_{\mu\nu} + T_{\nu\mu})$$

и антисимметричную

$$\tilde{\mathbf{T}}^a = \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{T}} - \tilde{\tilde{\mathbf{T}}}) \leftrightarrow T_{\mu\nu}^a = \frac{1}{2}(T_{\mu\nu} - T_{\nu\mu})$$

части, т. е. $\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{T}}^s + \tilde{\mathbf{T}}^a$.

Приложение 4

Тензорное произведение

Внешнее произведение двух тензоров произвольного ранга α и β дает тензор ранга $\alpha + \beta$. Таким образом, если \mathbf{v} и \mathbf{w} – два вектора, то соответствующий тензор второго ранга, определяемый внешним произведением

$$\mathbf{vw} \leftrightarrow (\mathbf{vw})_{\nu\mu} = v_\nu w_\mu,$$

называется диадой

$$\tilde{\mathbf{D}} \equiv \mathbf{vw} \leftrightarrow D_{\mu\nu} = v_\mu w_\nu, \quad (4)$$

а внешнее произведение, о котором идет речь, называется диадным произведением двух векторов. Диадное произведение двух векторов, или диада, есть тензор второго ранга, но в общем случае тензор второго ранга нельзя представить в виде диадного произведения двух векторов. Однако в трехмерном евклидовом пространстве общие соотношения для тензора и для диад эквивалентны друг другу. Поэтому все сказанное выше о симметричных свойствах тензоров справедливо и для диад. По аналогии с (1) существует транспонированная диада $\tilde{\mathbf{D}}$, определяемая соотношением

$$\widetilde{\mathbf{vw}} = \mathbf{wv} \leftrightarrow (\widetilde{\mathbf{vw}})_{\mu\nu} = v_\nu w_\mu.$$

Используя его, можно показать, что любую диаду $\tilde{\mathbf{D}} \equiv \mathbf{vw}$ можно разделить на части: симметричную

$$\tilde{\mathbf{D}}^s = \frac{1}{2}(\mathbf{vw} + \mathbf{wv}) \leftrightarrow D_{\mu\nu}^s = \frac{1}{2}(v_\mu w_\nu + w_\mu v_\nu)$$

и антисимметричную

$$\tilde{\mathbf{D}}^a = \frac{1}{2}(\mathbf{vw} - \mathbf{wv}) \leftrightarrow D_{\mu\nu}^a = \frac{1}{2}(v_\mu w_\nu - w_\mu v_\nu). \quad (5)$$

В трехмерном евклидовом пространстве существует тесная связь между $\tilde{\mathbf{D}}^a$ и векторным произведением двух обыкновенных (полярных) векторов. Если \mathbf{v} и \mathbf{w} – два полярных вектора, то их векторное произведение, определяемое, как обычно,

$$\mathbf{C}^a = \mathbf{v} \times \mathbf{w} \leftrightarrow C_\gamma^a = v_\mu w_\nu - w_\mu v_\nu \quad (\mu, \nu, \gamma \text{ cycl}), \quad (6)$$

дает аксиальный вектор \mathbf{C}^a . Сравнивая (5) и (6), видим, что вектор \mathbf{C}^a связан с антисимметричной диадой $\tilde{\mathbf{D}}^a$:

$$\mathbf{C}^a = 2\tilde{\mathbf{D}}^a \leftrightarrow C_\gamma^a = 2D_{\mu\nu}^a \quad (\text{cycl}).$$

Поскольку аксиальный вектор можно получить не только из антисимметричной диады, но и из любого антисимметричного тензора второго ранга типа (5)

$$T_\gamma^a = \frac{1}{2}(T_{\mu\nu} - T_{\nu\gamma}) \quad (\text{cycl}),$$

то все величины, которые могут быть представлены через антисимметричные тензоры (в частности, диады), можно выразить и через аксиальные векторы.

Из внешних произведений часто используется внешнее произведение вектора на тензор второго ранга. Оно при различной последовательности умножения дает тензор третьего ранга

$$\mathbf{v}\tilde{\mathbf{T}} \leftrightarrow (\mathbf{v}\tilde{\mathbf{T}})_{\mu\nu\gamma} = v_\mu T_{\nu\gamma}, \quad (7)$$

$$\tilde{\mathbf{T}}\mathbf{v} \leftrightarrow (\tilde{\mathbf{T}}\mathbf{v})_{\mu\nu\gamma} = T_{\mu\nu} v_\gamma \quad (8)$$

в соответствии с общим определением внешнего произведения.

Теперь определим внутреннее (или свернутое) произведение двух тензоров, которое часто называют скалярным. Внутреннее произведение тензоров произвольного ранга можно получить из внешнего произведения,

положив два соседних индекса равными друг другу и автоматически выполнив суммирование по этим одинаковым индексам. Всякое внутреннее произведение означается точкой (\cdot) между символами тензоров. (Поэтому, особенно в англоязычной литературе, внутреннее произведение иногда называют «точечным».) Подобным образом из внешних произведений (4), (7), (8) получаем следующие внутренние произведения:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} &\leftrightarrow v_{\mu} w_{\mu}, \\ \mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{T}} &\leftrightarrow (\mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{T}})_{\nu} = v_{\mu} T_{\mu\nu}, \\ \tilde{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{v} &\leftrightarrow (\tilde{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{v})_{\nu} = T_{\nu\mu} v_{\mu}. \end{aligned} \quad (9)$$

В уравнениях (9) определяется внутреннее произведение двух векторных величин, которое называется скалярным произведением двух векторов. Оно называется так, потому что результат умножения есть скаляр, равный сумме произведений соответствующих компонент векторов. Общее правило, вытекающее из определения данных внутренних произведений, можно сформулировать таким образом: внутреннее (или точечное) произведение двух произвольных тензоров ранга α и β всегда дает тензор ранга $\alpha + \beta - 2$. Следует заметить, что в общем случае $\mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{T}} \neq \tilde{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{v}$, т. е. коммутативный закон для умножения не выполняется. Если предыдущие правила распространить на внутреннее произведение двух тензоров второго ранга, то приходим к определению

$$\tilde{\mathbf{S}} \cdot \tilde{\mathbf{T}} \leftrightarrow (\tilde{\mathbf{S}} \cdot \tilde{\mathbf{T}})_{\mu\gamma} = S_{\mu\nu} T_{\nu\gamma}.$$

В случае двух тензоров второго ранга внешнее произведение может быть свернуто дважды, что обозначается двумя точками ($:$) между символами тензоров. Если $\tilde{\mathbf{S}}$ и $\tilde{\mathbf{T}}$ – тензоры второго ранга, то внутреннее произведение

$$\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{T}} : \tilde{\mathbf{S}} \leftrightarrow (\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{T}})_{\mu\gamma} = S_{\mu\nu} T_{\nu\mu} \quad (10)$$

определяет скаляр, поэтому уравнение (10) называется также скалярным произведением двух тензоров второго ранга. В общем случае тензорный ранг величины, определенной «двухточечным произведением», равен $\alpha + \beta - 4$ как результат двойного свертывания. Заметим, что в немецкой литературе вместо (10) часто используется определение

$$\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{T}} = S_{\mu\nu} T_{\mu\nu},$$

поскольку выбор в данном случае зависит только от договоренности.

След (шпур) тензора $\tilde{\mathbf{T}}$, т. е. инвариантный скаляр, определенный как сумма диагональных элементов тензора $\tilde{\mathbf{T}}$, можно записать следующим образом:

$$Sp\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{T}} : \tilde{\mathbf{\delta}} = T_{vv}.$$

Приложение 5

Тензорные производные

Приведем наиболее важные пространственные производные, выраженные с помощью набла-оператора:

$$\nabla \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_\mu}.$$

Скалярный градиент:

$$\nabla a = \text{grad} a \leftrightarrow (\nabla a)_\mu = \frac{\partial a}{\partial x_\mu}.$$

Векторный градиент:

$$\nabla \mathbf{v} = \text{Grad} \mathbf{v} \leftrightarrow (\nabla \mathbf{v})_{\mu\nu} = \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu}.$$

Векторный ротор:

$$\nabla \times \mathbf{v} = \text{rot} \mathbf{v} \leftrightarrow (\nabla \times \mathbf{v})_\gamma = \frac{\partial v_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu} \quad (\mu, \nu, \gamma \text{ cycl}).$$

Векторная дивергенция:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \text{div} \mathbf{v} \leftrightarrow (\nabla \cdot \mathbf{v}) = \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma}.$$

Тензорная дивергенция:

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{T}} = \text{Div} \tilde{\mathbf{T}} \leftrightarrow (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{T}})_\mu = \frac{\partial T_{v\mu}}{\partial x_v}.$$

Оператор Лапласа:

$$\nabla \cdot \nabla \equiv \text{divgrad} \equiv \Delta \leftrightarrow \sum_{\mu=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_\mu^2}.$$

Глава 2

ОСНОВЫ ТЕОРИИ КОНВЕКТИВНОГО ТЕПЛООБМЕНА

Процессы переноса в обобщенном смысле – это большая часть окружающих нас физических явлений в соразмерном человеку масштабе. Какие бы явления нами не наблюдались в окружающей жизни – будь то погодные и климатические, процессы в живых организмах и взаимодействие живых организмов с окружающей средой, процессы в экологических системах, технологические процессы, особенно в химических технологиях и в энергетике, – все это различные примеры явлений переноса. Отсюда следует чрезвычайная практическая важность изучения процессов переноса и законов, ими управляющих.

Конечно, объем знаний, излагаемый в настоящей главе, не может охватывать всю очерченную выше область науки, остановимся только на наиболее существенных и практически важных моментах. Поэтому более конкретно предмет изучения можно охарактеризовать как тепло- и массообмен в текучих системах, а еще несколько сузив область рассмотрения – как конвективный тепло- и массообмен. Он включает в себя краткий обзор основ теории конвективного переноса и решение конкретных задач, раскрывающих наиболее важные теоретические и практические аспекты данной дисциплины.

Фундаментальной основой этой главы должна быть механика, точнее – термомеханика сплошных сред. Подобно классической механике, возникшей в XVIII в., механика сплошных сред, созданная Эйлером, Лагранжем, Навье, Стоксом и другими учеными, к середине XIX в. стала достаточно строгой и, как казалось, завершенной теорией, базирующейся на эмпирически обоснованных постулатах. Дальнейшее развитие виделось лишь в приложениях общей теории к различного рода конкретным и практически важным проблемам. Однако в середине XX в. был дан новый импульс анализу, пересмотру и развитию оснований механики сплошных сред. Эти исследования, связанные с именем К. Трусделла и его школы, были инициированы стремлением обобщить теорию на случай больших деформаций и нелиней-

ных сред [1]. Этого удалось достичь за счет усовершенствования языка теории, а точнее – формулировки ее в объективных терминах, т. е. не связанных с какой-либо системой координат. Новый подход, называемый «рациональная механика», продемонстрировал свое преимущество не только при построении теории больших деформаций и нелинейных сред, но и при обобщении теории на случаи неклассических сред, таких как среды с памятью, среды с внутренними переменными состояниями, микрополярные среды и др. Изложение основ механики сплошных сред в таком подходе ведется с использованием объективистской формулировки тензорного исчисления, в которой все основные понятия определяются без использования их представлений в базисах или координатных системах; к таким представлениям прибегают только при необходимости проведения конкретных вычислений. В частности, тензор второго ранга в такой формулировке определяется как линейное отображение векторного пространства в себя или, проще говоря, линейная векторная функция векторного аргумента. Если векторы представить через их компоненты в некотором базисе, то такая функция будет представляться матрицей, причем из данного определения тензора вытекает то самое правило преобразования этой матрицы при замене базиса, о котором говорится в традиционном определении тензора (см. Приложения к гл. 1).

2.1. Общие положения теории переноса

2.1.1. Тензор напряжений и вектор теплового потока

Механика сплошных сред – это обобщение стандартной классической механики, т. е. механики точек или твердых тел на случай деформируемой сплошной среды (тела). В основе ее лежат те же законы механики, но переформулированные в терминах, применимых к сплошным средам, т. е. в полевой формулировке это второй закон механики Ньютона (или закон сохранения (баланса) импульса), закон сохранения энергии и закон сохранения массы.

При анализе внутреннего взаимодействия отдельных элементов сплошной среды рассматривается произвольная поверхность S с выбранным направлением внешней нормали \vec{n} , разделяющая изучаемые элементы, и в каждой материальной точке \vec{X} на ней вводятся две величины: усилие $\vec{\tau}(\mathcal{S}, \vec{X})$ (сила, приложенная к единице площади поверхности) и плотность потока тепла $Q_{\mathcal{S}}(\mathcal{S}, \vec{X})$ (количество тепла, протекающее через единицу площади поверхности в единицу времени).

Интуитивно понятно, что если несколько таких поверхностей касаются в некоторой материальной точке \vec{X} , т. е. имеют общую нормаль, то усилия к этим поверхностям в данной точке будут одинаковы. Это значит, что если

задана точка на поверхности, то усилие в этой точке зависит от свойств самой поверхности только через нормаль к ней. Математически это можно записать следующим образом:

$$\bar{\tau}(\mathcal{S}, \vec{X}) \equiv \bar{\tau}(\vec{n}_{\mathcal{S}}, \vec{X}). \quad (2.1.1)$$

Это утверждение составляет содержание так называемого постулата Коши.

Аналогичный постулат естественно предположить в отношении $Q(\mathcal{S}, \vec{X})$, т. е. по аналогии с (2.1.1) потребуем

$$Q_{\mathcal{S}}(\mathcal{S}, \vec{X}) \equiv Q_{\mathcal{S}}(\vec{n}_{\mathcal{S}}, \vec{X}). \quad (2.1.2)$$

Теорема Коши [1], которая вытекает из постулата Коши и баланса импульса, утверждает, что если поле усилий $\bar{\tau}(\vec{n}_{\mathcal{S}}, \vec{X})$ есть непрерывная функция от \vec{X} , то зависимость $\bar{\tau}(\vec{n}_{\mathcal{S}}, \vec{X})$ от вектора $\vec{n}_{\mathcal{S}}$ в (2.1.1) линейна, а в силу сказанного выше о тензорах это значит, что существует тензорное поле второго ранга $\bar{\bar{T}}(\vec{X})$ такое, что

$$\bar{\tau}(\vec{n}, \vec{X}) = \bar{\bar{T}}(\vec{X})\vec{n}. \quad (2.1.3)$$

Значение тензорного поля $\bar{\bar{T}}$ в точке \vec{X} называется *тензором напряжений*.

Из аналогичных соображений доказывается, что зависимость $Q(\vec{n}_{\mathcal{S}}, \vec{X})$ от $\vec{n}_{\mathcal{S}}$ также линейна. Согласно известной теореме о представлении линейной скалярной функции векторного аргумента, это означает, что существует такое векторное поле $\vec{q}(\vec{X})$, с помощью которого $Q(\vec{n}_{\mathcal{S}}, \vec{X})$ в (2.1.2) может быть представлена как

$$Q(\vec{n}_{\mathcal{S}}, \vec{X}) = \vec{q}(\vec{X})\vec{n}. \quad (2.1.4)$$

Значение векторного поля \vec{q} в точке \vec{X} называется *вектором теплового потока* в этой точке.

2.1.2. Уравнения баланса

Полевые формулировки законов сохранения были выведены в гл. 1: баланс массы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\text{grad } \rho) \cdot \vec{v} + \rho \text{ div } \vec{v} = 0, \quad (2.1.5)$$

баланс импульса

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\text{grad } \bar{v}) \bar{v} \right) = \text{div } \bar{\bar{T}} + \rho \bar{b}, \quad (2.1.6)$$

баланс момента импульса

$$\bar{\bar{T}} = \bar{\bar{T}}^T, \quad (2.1.7)$$

баланс внутренней энергии

$$\frac{\partial e}{\partial t} + (\text{grad } e) \cdot \bar{v} = -\text{div } \bar{q} + \text{tr}(\bar{\bar{T}}^T \text{grad } \bar{v}) + \rho Q_V. \quad (2.1.8)$$

Здесь ρ – плотность, e – удельная внутренняя энергия, \bar{v} – скорость, $\bar{\bar{T}}$ – тензор напряжений, tr – операция взятия следа тензора, \bar{q} – вектор теплового потока, Q_V – объемное тепловыделение на единицу массы, \bar{b} – массовая сила, индекс T означает транспонирование тензора.

Это четыре основных закона механики сплошных сред в эйлеровых переменных в дифференциальной (локальной) форме. Подробно об уравнениях баланса и законах сохранения см. п. 1.1–1.3.

2.1.3. Конститутивные уравнения

Уравнения (2.1.5)–(2.1.8) представляют собой фундаментальные законы механики, сформулированные для сплошных сред, и справедливы для любых деформируемых тел: твердых, жидких, газообразных, вязкоупругих и т. п. Однако в силу своей универсальности они имеют следующие особенности:

- уравнения не отражают термомеханических свойств тел;
- система уравнений является незамкнутой, и поэтому их недостаточно для описания динамики термомеханических процессов.

Следовательно, эти уравнения надо дополнить некоторыми соотношениями, отражающими свойства тел и замыкающими систему уравнений баланса, – материальными или конститутивными уравнениями (КУ). Долгое время считалось, что источником таких уравнений может служить либо эксперимент, либо физические теории, базирующиеся на молекулярно-кинетических представлениях о строении материи и выводящие макроскопические свойства на основе законов межмолекулярного взаимодействия большого числа частиц. Оказалось, однако, что возможно построить достаточно строгую феноменологическую теорию, в рамках которой на основе системы хорошо обоснованных постулатов можно значительно сузить про-

извол в выборе конститутивных уравнений, так что первоначально очерченный обширный класс КУ сведется к достаточно конкретному набору физически допустимых КУ.

В уравнениях (2.1.5)–(2.1.8) присутствуют два внешних параметра: \vec{b} – массовые силы и Q_V ; при наличии пары уравнений, которые связывали бы \vec{T} и \vec{q} (тензор напряжений и тепловой поток) с полем скорости \vec{v} и внутренней энергией e , система (2.1.5)–(2.1.8) была бы замкнутой.

Однако такой подход для практических целей оказывается излишне общим, поскольку нелокальность (т. е. чувствительность значений конститутивных функционалов в некоторой точке к величинам их аргументов в соседних точках) ограничивается настолько малой окрестностью, что она вполне может быть учтена через градиенты независимых переменных в рассматриваемой точке. Это значит, что конститутивные функционалы заменяются функциями, в которых набор аргументов дополнен градиентами независимых переменных. Кроме того, в этих функциях внутренняя энергия является очень неудобным параметром, поскольку не поддается прямому физическому измерению. Однако существует физическая величина, тесно связанная с внутренней энергией и легко поддающаяся измерению. Процесс изменения внутренней энергии тела всегда проявляется в изменении степени его нагретости, а эта степень характеризуется легко измеряемой физической величиной – температурой. Следовательно, удобно включить в рассмотрение еще одну переменную – температуру θ , и тогда, поскольку общее число переменных увеличилось, надо к двум упомянутым выше конститутивным уравнениям добавить третье, связывающее внутреннюю энергию с температурой, а в соответствии с принципом равноприсутствия Трусделла [1] – и со всеми другими аргументами конститутивных функций.

С учетом изложенного эти три конститутивных уравнения принимают вид

$$\begin{aligned}\vec{T} &= \hat{\vec{T}}(\theta, \vec{v}, \text{grad } \theta, \text{grad } \vec{v}), \\ \vec{q} &= \hat{\vec{q}}(\theta, \vec{v}, \text{grad } \theta, \text{grad } \vec{v}), \\ e &= \hat{e}(\theta, \vec{v}, \text{grad } \theta, \text{grad } \vec{v}).\end{aligned}\tag{2.1.9}$$

Обратим внимание, что в данных конститутивных функциях неявно присутствует и их зависимость от плотности ρ , поскольку по известным плотности в отсчетной конфигурации (константа), скорости и градиенту скорости плотность в лагранжевых переменных может быть восстановлена, а затем представлена через Эйлера переменные [1].

Если ограничиться рассмотрением класса сред, являющихся жидкостями, и только линейной зависимостью конститутивных функций от градиен-

тов, то из упомянутой выше феноменологической теории конститутивных уравнений однозначно следует, что КУ (2.1.9) должны иметь следующий вид:
для тензора напряжений

$$\bar{\bar{T}} = (-p + \zeta \operatorname{tr} \bar{\bar{D}}) \bar{\bar{I}} + 2\mu \bar{\bar{D}}, \quad (2.1.10)$$

где $\bar{\bar{D}} = \frac{1}{2}(\operatorname{grad} \bar{v} + (\operatorname{grad} \bar{v})^T)$, $\bar{\bar{I}}$ – единичный тензор;

для теплового потока

$$\bar{q} = -\lambda \operatorname{grad} \theta; \quad (2.1.11)$$

для внутренней энергии

$$e = \hat{e}(\rho, \theta) \approx \hat{e}(\theta). \quad (2.1.12)$$

Здесь феноменологические коэффициенты КУ p , ζ , μ и λ зависят от параметров состояния (плотности и температуры) и имеют следующий физический смысл: p – гидравлическое давление, ζ – объемная вязкость, μ – сдвиговая вязкость, λ – коэффициент теплопроводности. Обратим внимание, что введенная здесь объемная вязкость ζ связана с введенной в гл. 1 (п. 1.3) объемной вязкостью ξ соотношением $\zeta = \xi - 2\mu/3$.

Поскольку из условия устойчивости равновесного состояния функция $p = \hat{p}(\rho, \theta)$ должна быть такой, что $\frac{\partial \hat{p}(\rho, \theta)}{\partial \rho} > 0$ для любых ρ и θ , то зависимость \hat{p} от ρ является обратимой и можно построить обратную к \hat{p} функцию $\hat{p}^{-1}(p, \theta) \equiv \hat{\rho}(p, \theta)$:

$$\rho = \hat{\rho}(p, \theta). \quad (2.1.13)$$

С помощью (2.1.13) можно исключить ρ из параметров состояния в феноменологических коэффициентах и перейти к определению состояния через p и θ , так что p становится независимой переменной. Такой подход применяется в дальнейшем.

Уравнение (2.1.12) чаще всего употребляется в упрощенной форме (последнее выражение в (2.1.12)), поскольку для большинства жидкостей зависимость внутренней энергии от давления в наиболее актуальном интервале давлений незначительна. Из требования выполнимости второго начала термодинамики вытекают следующие свойства феноменологических коэффициентов: $\lambda \geq 0$; $\mu \geq 0$; $\zeta \geq 0$ (см. п. 1.11).

Соотношения (2.1.10)–(2.1.12) – это конститутивные уравнения, определяющие вязкую теплопроводную жидкость.

2.1.4. Система дифференциальных уравнений переноса

Уравнения переноса получаются подстановкой КУ (2.1.10)–(2.1.12) в уравнения баланса (2.1.5), (2.1.6), (2.1.8) (уравнение (2.1.7) выполняется тождественно в силу КУ (2.1.10)). При этом необходимо учитывать правила дифференцирования тензорных и векторных полей:

$$\operatorname{div} f = \operatorname{tr}(\operatorname{grad} f), \quad (2.1.14)$$

$$\operatorname{div}(f\bar{\bar{P}}) = f \operatorname{div}(\bar{\bar{P}}) + \bar{\bar{P}} \operatorname{grad} f. \quad (2.1.15)$$

Отсюда

$$\operatorname{div}(p\bar{\bar{I}}) = \operatorname{grad} p, \quad (2.1.16)$$

$$\operatorname{tr}(\bar{\bar{D}}) = \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\operatorname{grad} \bar{v} + (\operatorname{grad} \bar{v})^T) = \operatorname{div} \bar{v}, \quad (2.1.17)$$

$$\operatorname{div} \bar{\bar{D}} = \frac{1}{2} \operatorname{div}(\operatorname{grad} \bar{v} + (\operatorname{grad} \bar{v})^T) = (\Delta \bar{v} + \operatorname{grad}(\operatorname{div} \bar{v})), \quad (2.1.18)$$

$$\operatorname{div}(\bar{\bar{I}} \operatorname{div} \bar{v}) = \operatorname{grad}(\operatorname{div} \bar{v}). \quad (2.1.19)$$

Из (2.1.12) имеем

$$\frac{\partial \hat{e}(\rho, \vartheta)}{\partial t} = \frac{\partial \hat{e}(\vartheta)}{\partial t} = \frac{d\hat{e}(\vartheta)}{d\vartheta} \frac{\partial \vartheta}{\partial t} \equiv c_v \frac{\partial \vartheta}{\partial t}, \quad (2.1.20)$$

где $c_v = \frac{d\hat{e}(\vartheta)}{d\vartheta}$ – теплоемкость при постоянном объеме.

Подставляя конститутивные уравнения (2.1.10)–(2.1.12) в уравнения баланса (2.1.5), (2.1.6), (2.1.8) и используя (2.1.14)–(2.1.20), получаем общую форму уравнений переноса

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\operatorname{grad} \rho) \bar{v} + \rho \operatorname{div} \bar{v} = 0, \quad (2.1.21)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\operatorname{grad} \bar{v}) \bar{v} \right) = -\operatorname{grad} p + \operatorname{grad}(\zeta \operatorname{div} \bar{v}) + \operatorname{div} \left(\mu \left(\operatorname{grad} \bar{v} + (\operatorname{grad} \bar{v})^T \right) \right) + \rho \bar{b}, \quad (2.1.22)$$

$$\rho c_v \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial t} + (\text{grad} \vartheta) \cdot \vec{v} \right) = \text{div}(\lambda \text{grad} \theta) - p \text{div} \vec{v} + \zeta (\text{div} \vec{v})^2 + \\ + \mu \text{tr} \left(\text{grad} \vec{v} (\text{grad} \vec{v} + (\text{grad} \vec{v})^T) \right) + \rho Q_V. \quad (2.1.23)$$

Эта система замыкается уравнением состояния (2.1.13):

$$\rho = \hat{\rho}(p, \theta). \quad (2.1.24)$$

В уравнении (2.1.22) левая часть представляет собой силу инерции элемента жидкости, отнесенную к единице объема, а правая часть – разные виды внешних сил, также отнесенные к единице объема. Первый член в правой части – это сила, обусловленная неоднородностью поля давления, второй член – сила, обусловленная объемной вязкостью при сжатии или расширении среды, третий член – сила, обусловленная сдвиговой вязкостью, последний член – это сила внешних полей. В уравнении (2.1.23) левая часть представляет собой скорость изменения внутренней энергии на единицу объема элемента жидкости, а правая часть – разные источники этого изменения. Первый член в правой части – это скорость теплоподвода к единице объема жидкого элемента за счет теплового потока, обусловленного неоднородностью температуры, второй член – скорость совершения работы силами давления при сжатии или расширении среды, третий член – скорость совершения работы при сжатии или расширении среды силами, обусловленными объемной вязкостью, четвертый член – скорость совершения работы силами, обусловленными сдвиговой вязкостью и последний член – это внешний объемный источник тепла.

Частные формы уравнений переноса. Уравнения переноса для случая постоянных коэффициентов и пренебрежимо малой диссипации. Данная форма уравнений переноса применима при умеренных вариациях температуры, когда коэффициенты переноса изменяются незначительно, а вклад диссипации в тепловые процессы пренебрежимо мал. Она наиболее широко используется на практике. Этот случай вытекает из системы уравнений (2.1.21)–(2.1.23), если положить в них $\xi, \mu, \lambda = \text{const}$ и обнулить третий и четвертый члены в правой части (2.1.23). При этом коэффициенты переноса выносятся из-под дифференциальных операторов, используется соотношение (2.1.18), а композиция операторов градиента и дивергенции дает оператор Лапласа. В результате получаем систему уравнений

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\text{grad} p) \vec{v} + \rho \text{div} \vec{v} = 0, \quad (2.1.25)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\text{grad} \vec{v}) \vec{v} \right) = -\text{grad} p + \zeta \text{grad}(\text{div} \vec{v}) + \mu \Delta \vec{v} + \rho \vec{b}, \quad (2.1.26)$$

$$\rho c_v \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial t} + (\text{grad} \vartheta) \cdot \vec{v} \right) = \lambda \Delta \theta - p \text{div} \vec{v} + \rho Q_V, \quad \rho = \hat{\rho}(p, \theta). \quad (2.1.27)$$

Подслучай несжимаемой жидкости. Несжимаемая жидкость по определению – это жидкость, у которой плотность постоянна. Поэтому в уравнении неразрывности обнуляются все члены, содержащие дифференцирование плотности, и оно сводится к равенству нулю дивергенции от скорости. В результате система (2.1.25)–(2.1.27) трансформируется в следующую:

$$\text{div} \vec{v} = 0, \quad (2.1.28)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\text{grad} \vec{v}) \vec{v} \right) = -\text{grad} p + \mu \Delta \vec{v} + \rho \vec{b}, \quad (2.1.29)$$

$$\rho c_v \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial t} + (\text{grad} \vartheta) \cdot \vec{v} \right) = \lambda \Delta \theta + \rho Q_V. \quad (2.1.30)$$

Уравнения переноса для идеального газа. Этот случай получается из системы (2.1.25)–(2.1.27), если положить равными нулю коэффициенты вязкости и теплопроводности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\text{grad} \rho) \vec{v} + \rho \text{div} \vec{v} = 0, \quad (2.1.31)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\text{grad} \vec{v}) \vec{v} \right) = -\text{grad} p + \rho \vec{b}, \quad (2.1.32)$$

$$\rho c_v \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial t} + (\text{grad} \vartheta) \cdot \vec{v} \right) = -p \text{div} \vec{v} + \rho Q_V, \quad (2.1.33)$$

$$\rho = \hat{\rho}(p, \theta). \quad (2.1.34)$$

Любой из представленных выше вариантов систем уравнений переноса является замкнутой системой дифференциальных уравнений в частных производных и при задании начальных и краевых условий позволяет прогнозировать эволюцию изучаемой системы.

2.1.5. Краевые условия

Гидродинамические краевые условия. Для уравнения Навье – Стокса могут задаваться как динамические (для поля скорости), так и кинематические (для тензора напряжений) краевые условия.

На границе раздела вязкой жидкости с твердой поверхностью S , которая движется со скоростью \bar{v}_w , для жидкости принимаются условия прилипания:

$$\bar{v}|_S = \bar{v}_w, \text{ при } \bar{v}_w = 0 \text{ (неподвижная стенка) } \quad \bar{v}|_S = 0. \quad (2.1.35)$$

Для свободной границы (жидкость граничит с газом с нулевой вязкостью) задаются краевые условия для тензора напряжений

$$\bar{T}|_S \bar{n}_S = -P_0 \bar{n}_S, \quad (2.1.36)$$

где \bar{n}_S – единичная нормаль к граничной поверхности, направленная в сторону, противоположную от поверхности жидкости.

Для идеального газа используются условия непроницаемости (непротекания), требующие равенства нулю нормальной к поверхности компоненты скорости:

$$\bar{v}|_S \cdot \bar{n}_S = 0. \quad (2.1.37)$$

Термические краевые условия. На граничной поверхности задаются:

1) температура (граничные условия 1-го рода)

$$\theta|_S = \theta_w; \quad (2.1.38)$$

2) тепловой поток (граничные условия 2-го рода)

$$-\lambda(\text{grad}\theta)|_S \cdot \bar{n}_S = q_w; \quad (2.1.39)$$

3) тепловой поток, определяемый теплообменом между жидкостью и окружающей средой (граничные условия 3-го рода) по закону Ньютона

$$-\lambda(\text{grad}\theta)|_S \cdot \bar{n}_S = \alpha(\theta|_S - \theta_0) \quad (2.1.40)$$

или по закону лучистого теплообмена

$$-\lambda(\text{grad}\theta)|_S \cdot \bar{n}_S = \sigma\varepsilon((\theta|_S)^4 - \theta_0^4), \quad (2.1.41)$$

где σ – постоянная Стефана – Больцмана, ε – степень черноты поверхности, α – коэффициент теплообмена жидкости с окружающей средой.

2.1.6. Уравнения переноса в координатной форме

Представим наиболее широко употребляемый вариант системы уравнений переноса для несжимаемой жидкости с постоянными коэффициентами (2.1.28)–(2.1.30) в координатной форме.

В *декартовой* системе координат (x, y, z) с координатными ортами $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ дифференциальные операторы представляются как

$$\text{grad} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial}{\partial z} \vec{e}_z, \quad \text{div} = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}, \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (2.1.42)$$

Поэтому для несжимаемой жидкости уравнение (2.1.29) для трех компонент поля скорости v_x, v_y, v_z сводится к следующим трем уравнениям:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) + \rho b_x, \\ \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) + \rho b_y, \\ \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \nu \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + \rho b_z, \end{aligned} \quad (2.1.43)$$

где $\nu = \mu/\rho$ – кинематический коэффициент вязкости, м²/с.

Уравнение неразрывности (2.1.28) в декартовой системе координат принимает вид

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0. \quad (2.1.44)$$

Введем величину $a = \lambda/(\rho c)$ – коэффициент температуропроводности. С помощью (2.1.43) и (2.1.44) уравнение (2.1.30) записывается в виде

$$\left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + v_x \frac{\partial \theta}{\partial x} + v_y \frac{\partial \theta}{\partial y} + v_z \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) = a \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \right) + \frac{Q_V}{c}. \quad (2.1.45)$$

Компоненты тензора напряжений

$$T_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (2.1.46)$$

Чтобы представить эту систему уравнений переноса в *цилиндрической* системе координат (r, z, φ) , для краткости введем обозначения для следующих дифференциальных операторов относительно произвольного скалярного поля f :

$$\bar{v}\nabla f = v_r \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{v_\varphi}{r} \frac{\partial f}{\partial \varphi} + v_z \frac{\partial f}{\partial z}, \quad \Delta f = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} - v_z \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}. \quad (2.1.47)$$

Тогда с учетом (2.1.47) уравнение (2.1.29) для трех компонент поля скорости v_x, v_y, v_z сводится к трем уравнениям:

$$\frac{\partial v_r}{\partial t} + (\bar{v}\nabla)v_r - \frac{v_\varphi^2}{2} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial r} + v \left(\Delta v_r - \frac{v_r}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} \right) + b_r,$$

$$\frac{\partial v_\varphi}{\partial t} + (\bar{v}\nabla)v_\varphi + \frac{v_r v_\varphi}{r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \varphi} + v \left(\Delta v_\varphi - \frac{v_\varphi}{r^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} \right) + b_\varphi, \quad (2.1.48)$$

$$\frac{\partial v_z}{\partial t} + (\bar{v}\nabla)v_z = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + v \Delta v_z + b_z.$$

Уравнение неразрывности (2.1.28) и уравнение теплопереноса (2.1.30) принимают вид

$$\frac{1}{r} \frac{\partial (rv_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0, \quad (2.1.49)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\bar{v}\nabla)\theta = a\Delta\theta + \frac{Q_V}{c_v}. \quad (2.1.50)$$

Компоненты тензора напряжений относительно цилиндрической системы координат записываются следующим образом:

$$T_{rr} = -p + 2\mu \frac{\partial v_r}{\partial r}, \quad T_{\varphi\varphi} = -p + 2\mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{v_r}{r} \right), \quad T_{zz} = -p + 2\mu \frac{\partial v_z}{\partial z},$$

$$T_{r\varphi} = T_{\varphi r} = \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_\varphi}{\partial r} - \frac{v_\varphi}{r} \right), \quad T_{zr} = T_{rz} = \mu \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right), \quad (2.1.51)$$

$$T_{z\varphi} = T_{\varphi z} = \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_\varphi}{\partial z} \right).$$

Координатное представление компонент тензора напряжений требуется для формулировки некоторых типов граничных условий (см. п. 2.1.5).

2.1.7. Безразмерная форма уравнений переноса. Критерии подобия

Большинство величин, встречающихся в физике, являются размерными. Понятие размерности тесно связано с процессом измерения, в котором физическую величину сравнивают с некоторым ее эталоном (единица измерения). Численное значение отношения измеряемой величины к величине ее эталона вместе с указанием названия эталона и есть размерность этой величины. В такой записи название единицы измерения можно понимать как некий алгебраический множитель иной природы, нежели числовая, и обращаться с размерными величинами по правилам алгебры с учетом этого обстоятельства. Однако не все размерности являются независимыми друг от друга. Многие величины связаны между собой соотношениями, выражающими физические законы или представляющие одни величины через другие и т. д. Эти связи должны проявляться и в связях между соответствующими размерностями. Следовательно, можно выделить некоторое количество основных (независимых) единиц измерения, а все остальные выразить через них. Это будут составные единицы измерения. В то же время наличие таких связей между размерностями означает, что некоторые комбинации размерных величин могут оказаться безразмерными. Выбор системы единиц измерения означает выбор эталонов для основных размерностей. Для задач термомеханики достаточно четырех основных размерностей: длина L , время t , масса m и температура T . Все остальные выражаются через них. Очевидно, что любая физически обоснованная зависимость размерных величин должна быть такой, чтобы ее вид не зависел от выбора системы единиц измерения. На этом принципе основана *теория размерности* [2], в которой получена так называемая П-теорема, устанавливающая условия выполнения этого принципа.

Рассмотрим размерную величину a , которая является функцией независимых размерных величин a_1, a_2, \dots, a_n :

$$a = f(a_1, a_2, \dots, a_k, a_{k+1}, \dots, a_n). \quad (2.1.52)$$

Пусть первые k ($k \leq n$) величин a_1, a_2, \dots, a_k имеют простые размерности (из системы единиц измерения), которые обозначены следующим образом:

$$[a_1] = A_1, \quad [a_2] = A_2, \quad [a_k] = A_k.$$

Тогда размерности остальных величин запишем как (вид степенного одночлена)

$$[a] = A_1^{m_1} A_2^{m_2} \dots A_k^{m_k}, \quad [a_{k+1}] = A_1^{p_1} A_2^{p_2} \dots A_k^{p_k}, \quad \dots, \quad [a_n] = A_1^{q_1} A_2^{q_2} \dots A_k^{q_k}.$$

Так как соотношение (2.1.52) не должно зависеть от системы единиц измерения, выберем систему единиц такой, чтобы k аргументов функции f имели фиксированные значения, равные единице. Тогда в этой относительной системе единиц измерения численные параметры a, a_{k+1}, \dots, a_n примут вид [2]

$$\Pi = \frac{a}{a_1^{m_1} a_2^{m_2} \dots a_k^{m_k}}, \quad \Pi_1 = \frac{a_{k+1}}{a_1^{p_1} a_2^{p_2} \dots a_k^{p_k}}, \quad \dots, \quad \Pi_{n-k} = \frac{a_n}{a_1^{q_1} a_2^{q_2} \dots a_k^{q_k}},$$

где a, a_1, \dots, a_n – численные значения величин в первоначальной системе единиц измерения. Видно, что значения $\Pi, \Pi_1, \dots, \Pi_{n-k}$ имеют нулевую размерность относительно единиц измерения A_1, A_2, \dots, A_k . Поэтому данные величины можно рассматривать как безразмерные:

$$\Pi = f \left(\underbrace{1, 1, \dots, 1}_k, \Pi_1, \dots, \Pi_{n-k} \right). \quad (2.1.53)$$

Таким образом, доказана следующая теорема.

П-теорема. Связь между $n + 1$ размерными величинами a, a_1, \dots, a_n , независимая от выбора системы единиц измерения из k простых единиц, принимает вид соотношения между $n + 1 - k$ величинами $\Pi, \Pi_1, \dots, \Pi_{n-k}$, представляющими собой безразмерные комплексы из $n + 1$ размерных величин.

Из этой теоремы также следует, что представление физических зависимостей через безразмерные параметры позволяет сократить общее число параметров, определяющих проблему, вследствие чего упрощается исследование задачи. Для такого представления выбирают характерные значения для всех переменных (константы обезразмеривания) и вводят безразмерные переменные как отношение их размерных величин к характерным значениям. При этом размерные константы задачи и константы обезразмеривания образуют некоторые безразмерные комплексы (критерии), число которых значительно меньше числа размерных констант. Таким образом, одному набору фиксированных значений критериев соответствует обширное множество наборов размерных констант, которым отвечают подобные режимы. Подобие полей физических величин имеет место, если отношение значений этих величин для подобных процессов в сходственных точках в сходственные моменты времени является величиной постоянной. Такое семейство

подобных процессов описывается одним набором определяющих безразмерных критериев, вследствие чего их также называют критериями подобия.

Таким образом, имеем следующие преимущества обезразмеривания:

- сокращение числа независимых параметров;
- один решенный безразмерный вариант соответствует обширному классу размерных задач;
- все параметры имеют порядок, близкий к единице, что позволяет эффективнее использовать технологические ресурсы вычислительных средств.

Проиллюстрируем это на конкретном примере. Пусть в некоторый объем V с характерным поперечным размером L , ограниченный от окружения тонкой стенкой, втекает жидкость с объемным расходом J и начальной температурой θ_0 (рис. 2.1). Протекая через объем, жидкость через стенку площадью S обменивается теплом с окружающей средой, имеющей температуру θ_m и коэффициент теплоотдачи α . Свойства жидкости: μ – вязкость, ρ – плотность, c_v – теплоемкость, λ – теплопроводность. Как видим, задача определяется не менее чем 10 размерными параметрами.

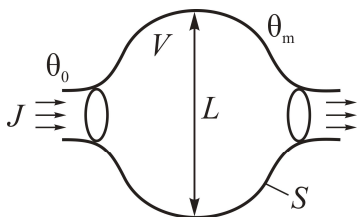


Рис. 2.1. Течение и теплообмен в объеме V

Система уравнений (2.2.28)–(2.1.30) и краевые условия (2.1.40):

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\text{grad} \vec{v}) \vec{v} = -\frac{1}{\rho} \text{grad} p + \nu \Delta \vec{v}, \quad (2.1.54)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\text{grad} \theta) \vec{v} = \frac{\lambda}{\rho c} \Delta \theta, \quad (2.1.55)$$

$$\nabla \vec{v} = 0, \quad (2.1.56)$$

$$-\lambda \frac{\partial \theta}{\partial n} \Big|_S = \alpha (\theta|_S - \theta_m). \quad (2.1.57)$$

Обезразмеривание. Для всех величин выбираются характерные значения: $U = Q/L^2$ – скорость; характерное время (несколькими способами): $\tau_c = L^2/\nu$ – кинематическое, $\tau_h = L/U$ – гидродинамическое, $\tau_t = L^2/a$ – термическое; $p = \rho U^2$ – давление; $\Delta \theta = \theta_m - \theta_0$ – температура.

Безразмерные переменные: $\tilde{v} = \vec{v}/U$ – скорость, $\tilde{x} = \vec{x}/L$ – координата, $\tilde{t} = t/\tau_c$ – время, $\tilde{\theta} = \frac{\theta - \theta_0}{\theta_m - \theta_0}$ – температура, $\tilde{P} = \frac{P}{\rho U^2}$ – давление.

Безразмерные дифференциальные операторы: $\widetilde{\text{div}} = L \text{div}$, $\widetilde{\Delta} = L^2 \Delta$.

Выразим из этих соотношений (используя константу τ_h) размерные переменные через безразмерные и подставим в (2.1.54):

$$\frac{\partial \widetilde{\mathbf{v}}}{\partial \widetilde{t}} + (\widetilde{\text{grad}} \widetilde{\mathbf{v}}) \widetilde{\mathbf{v}} = -\widetilde{\text{grad}} \widetilde{p} + \frac{1}{\text{Re}} \widetilde{\Delta} \widetilde{\mathbf{v}}. \quad (2.1.58)$$

Здесь константы образовали безразмерный комплекс $\text{Re} = uL/\nu$, называемый критерием Рейнольдса. Повторяя эту процедуру для соотношений (2.1.55)–(2.1.57), получим

$$\frac{\partial \widetilde{\theta}}{\partial \widetilde{t}} + (\widetilde{\text{grad}} \widetilde{\theta}) \widetilde{\mathbf{v}} = \frac{1}{\text{Pe}} \widetilde{\Delta} \widetilde{\theta}, \quad (2.1.59)$$

$$\widetilde{\Delta} \widetilde{\mathbf{v}} = 0, \quad (2.1.60)$$

$$-\widetilde{\text{grad}} \widetilde{\theta}|_s \cdot \vec{n} = \text{Bi} (\widetilde{\theta}|_s - 1). \quad (2.1.61)$$

Здесь тоже появляются безразмерные комплексы: $\text{Pe} = uL/a$ – критерий Пекле и $\text{Bi} = \alpha L/\lambda_f$ – критерий Био (α – заданный внешний параметр, см. п. 2.3). В результате вместо 10 свободных параметров имеем три: Re , Pe , Bi .

Если использовать при обезразмеривании гидродинамическое характерное время $\tau_h = L/U$, то уравнения (2.1.45), (2.1.46) принимают вид

$$\frac{\partial \widetilde{\mathbf{v}}}{\partial \text{Fo}} + (\widetilde{\text{grad}} \widetilde{\mathbf{v}}) \widetilde{\mathbf{v}} \text{Pe} = \text{Pr} \widetilde{\Delta} \widetilde{\mathbf{v}}, \quad (2.1.62)$$

$$\frac{\partial \widetilde{\theta}}{\partial \text{Fo}} + (\widetilde{\text{grad}} \widetilde{\theta}) \widetilde{\mathbf{v}} \text{Pe} = \widetilde{\Delta} \widetilde{\theta}, \quad (2.1.63)$$

где $\text{Fo} = at/L^2$ – число Фурье, имеющее смысл безразмерного времени.

При условии $\text{Pr} = 1$ уравнения теплопроводности (2.1.63) и движения (2.1.62) становятся тождественными относительно переменных θ и \mathbf{v} , что означает подобие распределений температур и скоростей.

Приведем некоторые критерии (числа) подобия в гидродинамических, тепловых и диффузионных процессах:

$\text{Re} = uL/\nu$ – критерий Рейнольдса (отношение сил инерции к вязкости);

$\text{Pe} = ud/a$ – критерий Пекле (отношение конвективных и кондуктивных составляющих теплообмена);

$\text{Bi} = \alpha L/\lambda_s$ – критерий Био (отношение внутреннего и внешнего термических сопротивлений, λ_s – теплопроводность твердого тела);

$Pe/Re = v/a = Pr$ – критерий Прандтля (характеризует подобие полей скоростей и температур);

$$Nu = \frac{\alpha L}{\lambda} \text{ или } Nu = \frac{q_s L}{\lambda(\vartheta_s - \vartheta_0)} \text{ – число Нуссельта;}$$

$Sc = \nu/D$ – критерий Шмидта (аналог числа Прандтля для задач диффузии, D – коэффициент диффузии);

$$Le = a/D \text{ – критерий Льюиса;}$$

$Fr = U^2/Lg$ – критерий Фруда (отношение гравитационных сил к силам инерции, g – ускорение свободного падения);

$Gz = PeL/d$ – критерий Гретца (L/d – отношение длины трубы к ее диаметру);

$St = \alpha/(c_p \rho u)$ – число Стентона (отношение эффективной теплоотдачи с поверхности к конвективному теплопереносу);

$$Fo = at/L^2 \text{ – число Фурье (критерий гомохронности);}$$

$Gr = \beta g \Delta T L^3 / \nu^2$ – критерий Грасгофа (отношение сил плавучести к силам вязкости).

2.2. Базовые поля течений вязкой жидкости

В этом разделе будем рассматривать течения вязкой несжимаемой жидкости с постоянными материальными коэффициентами. Наша задача – отыскать точные решения уравнений гидродинамики. Поскольку уравнения гидродинамики, как следует из предыдущего раздела, являются нелинейными даже при постоянных коэффициентах в силу того, что скорость в инерционных членах уравнений входит квадратично, точных их решений сравнительно мало. Поэтому важно найти эти решения, что обусловлено следующими причинами:

- в методическом аспекте;
- как основа многих экспериментальных методик для определения материальных параметров жидкости;
- как набор базовых течений, которые присутствуют в технологических процессах;
- как начальные приближения для различных приближенных методов решения;
- как задачи для анализа численных методов.

По форме математической задачи точные решения можно разделить на два типа:

- с выпадением в уравнениях нелинейных членов в силу специфической геометрии задачи;
- с сохранением нелинейных членов.

Два типа точных решений по форме представления:

- выражаются в элементарных функциях;
- выражаются специальными функциями, построенными на основе обыкновенных дифференциальных уравнений, получаемых с помощью автономной переменной из уравнений гидродинамики.

2.2.1. Слоистые течения

Характерный признак слоистого течения – наличие только одной, отличной от нуля компоненты скорости. Это значит, что все частички жидкости движутся по траекториям, повторяющим одну из координатных линий. Характерные свойства слоистых течений проанализируем в декартовой системе координат. Рассмотрим в этой системе координат в отсутствие внешних сил слоистое течение, в котором отлична от нуля только X -компонента скорости:

$$v_x \equiv U \neq 0, \quad v_y = 0, \quad v_z = 0. \quad (2.2.1)$$

Тогда из (2.1.44) имеем

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \Rightarrow \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \Rightarrow U = U(y, z, t). \quad (2.2.2)$$

С учетом (2.2.1) из (2.1.43) вытекает, что

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial p}{\partial z} = 0 \quad \text{или} \quad p = p(x, t).$$

Конвективные члены в первом из уравнений (2.1.43) выпадают, поскольку

$$U \underbrace{\frac{\partial U}{\partial x}}_0 + v_y \underbrace{\frac{\partial U}{\partial y}}_0 + v_z \underbrace{\frac{\partial U}{\partial z}}_0 \Rightarrow 0.$$

После преобразования из (2.1.43) следует уравнение для слоистых течений в данном случае:

$$\rho \frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right). \quad (2.2.3)$$

Если продифференцировать уравнение (2.2.3) по x , то в силу (2.2.2) получим

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial p}{\partial x} = \text{const}. \quad (2.2.4)$$

В цилиндрических координатах уравнения для слоистых течений аналогичным образом получаются из (2.1.48):

течение вдоль координатных линий z

$$v_z \equiv U \neq 0, \quad \rho \frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial U}{\partial r} \right), \quad \frac{\partial p}{\partial z} = \text{const}; \quad (2.2.5)$$

течение вдоль координатных линий φ

$$v_\varphi \equiv u \neq 0, \quad \rho \frac{u^2}{2} = \frac{\partial p}{\partial r}, \quad \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{u}{r^2} \right] = \rho \frac{\partial u}{\partial t}, \quad \frac{\partial p}{\partial \varphi} = 0. \quad (2.2.6)$$

В последнем случае, в отличие от предыдущих, уравнение для еще одной компоненты скорости, кроме v_φ , не вырождается в нуль. Это первое из уравнений (2.2.6), которое состоит из остающихся ненулевыми членов уравнения для компоненты скорости v_r . Оно не требует специального решения и служит лишь для определения поля давления, после того как поле скорости $v_\varphi \equiv u$ найдено.

2.2.2. Течение Пуазейля и Куэтта

Рассмотрим стационарное слоистое течение, описываемое уравнением (2.2.3), в геометрии, показанной на рис. 2.2, т. е. в зазоре между двумя неподвижными плоскими поверхностями, заполненными жидкостью. Единственная отличная от нуля компонента скорости направлена вдоль оси x и так же направлен градиент давления.

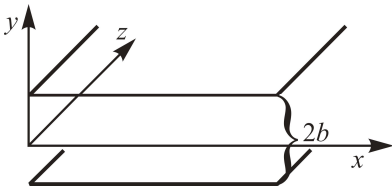


Рис. 2.2. Геометрия задачи и система координат для плоского течения Пуазейля

Будем рассматривать стационарную задачу. Вдоль z все параметры считаем одинаковыми, поэтому скорость U от z не зависит. Следовательно, из (2.2.3) имеем

$$\frac{dp(x)}{dx} = \mu \frac{d^2 U(y)}{dy^2}. \quad (2.2.7)$$

Поскольку градиент давления, согласно (2.2.4), постоянен, зависимость $p(x)$ можно представить как

$$p(x) = \frac{dp}{dx} x \quad \text{или} \quad \frac{dp}{dx} = \frac{p(L) - p(0)}{L} = \frac{\Delta p}{L},$$

где L – длина канала.

Граничные условия (2.1.30) на стенках канала в данном случае принимают вид

$$U(b) = U(-b) = 0. \quad (2.2.8)$$

В результате интегрирования (2.2.7) с граничным условием (2.2.8) получим поле скорости для плоского течения Пуазейля:

$$U = -\frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} (b^2 - y^2) = -\frac{1}{2\mu} \frac{\Delta p}{L} (b^2 - y^2). \quad (2.2.9)$$

Такое поле скорости называется плоским течением Пуазейля и применяется для описания ламинарного течения в плоских прямоугольных каналах, в которых один поперечный размер много больше другого (см. задачи 1, 2, 6).

Рассмотрим другой случай в этой же геометрии: при этом начало системы координат удобнее разместить на нижней стенке зазора (рис. 2.3). В данном случае градиент давления направлен так же, но верхняя стенка канала может двигаться вдоль оси x со скоростью v .

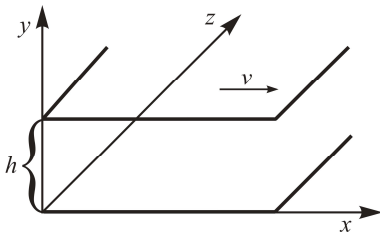


Рис. 2.3. Геометрия задачи и система координат для течения Пуазейля – Куэтта

Тогда уравнение (2.2.7) остается в силе, а граничные условия трансформируются:

$$U = 0 \quad \text{при} \quad y = 0, \quad U = v \quad \text{при} \quad y = h. \quad (2.2.10)$$

Интегрирование (2.2.7) с граничными условиями (2.2.10) дает поле скорости

$$U = \frac{y}{h} v - \frac{h^2}{2\mu} \frac{dp}{dx} \frac{y}{h} \left(1 - \frac{y}{h}\right). \quad (2.2.11)$$

Это течение при отсутствии градиента давления называется течением Куэтта, а при его наличии – течением Пуазейля – Куэтта.

На рис. 2.4 представлено семейство профилей скорости в этом течении для различных градиентов давления. Прямая линия на графике соответствует течению Куэтта, а кривые слева – течению Пуазейля – Куэтта для спутного направления результирующей силы, действующей на элементарный объем жидкости и обусловленной градиентом давления (кривые справа от прямой), а также для противоположного направления этой силы (кривые слева от прямой).

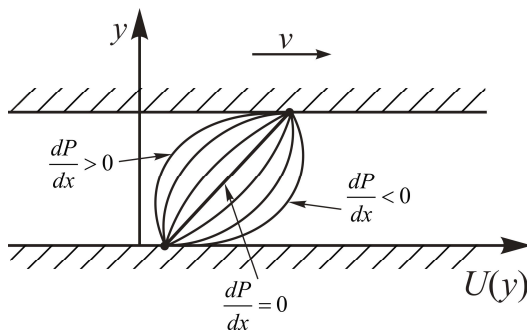


Рис. 2.4. Профили скорости в течении Пуазейля – Куэтта

Интересно отметить, что в последнем случае существуют режимы, в которых есть область возвратного течения жидкости, например для случая крайнего левого профиля скорости (рис. 2.4). Следовательно, возможен такой режим, когда при наличии течения результирующий расход жидкости через канал будет равен нулю. Рассчитать параметры такого режима можно, проинтегрировав профиль скорости (2.2.11) по высоте зазора и приравняв его к нулю. Из полученного соотношения находим связь между скоростью верхней стенки и градиентом давления, обеспечивающую режим с нулевым расходом:

$$v = \frac{h^2}{6\mu} \frac{dp}{dx}.$$

2.2.3. Течение Хагена – Пуазейля в трубе

На рис. 2.5 показана геометрия течения и представлена также используемая система координат. В этой геометрии рассмотрим слоистое течение с единственной отличной от нуля z -компонентой скорости $v_z \equiv U \neq 0$.

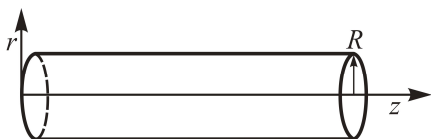


Рис. 2.5. Геометрия задачи и система координат для течения Хагена – Пуазейля

При стационарном течении от (2.2.5) в этом случае остаётся только

$$\mu \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dU}{dr} \right) = \frac{dp}{dz}, \quad \frac{dp}{dz} = \text{const.} \quad (2.2.12)$$

Граничные условия:

$$U = 0 \quad \text{при } r = R, \quad U < \infty \quad \text{при } r = 0. \quad (2.2.13)$$

Интегрирование (2.2.12) с граничными условиями (2.2.13) дает

$$U(r) = -\frac{1}{4\mu} \frac{dp}{dz} (R^2 - r^2) = \frac{1}{4\mu} \frac{\Delta p}{L} (R^2 - r^2). \quad (2.2.14)$$

Можно найти скорость на оси трубы U_{\max} , положив в (2.2.14) $r = 0$:

$$U_{\max} = \frac{1}{4\mu} \frac{\Delta p R^2}{L}.$$

Интегрируя распределение (2.2.14) по сечению трубы, найдем объемный расход жидкости:

$$G = \int_0^R U(r) 2\pi r dr = \frac{\pi R^4 \Delta p}{8\mu L}. \quad (2.2.15)$$

Это формула Хагена – Пуазейля.

Средняя по сечению скорость вычисляется как

$$U_{\text{cp}} = \frac{G}{\pi R^2} = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^R U(r) 2\pi r dr = \frac{R^2 \Delta p}{8\mu L} = \frac{U_{\max}}{2}.$$

Формула Хагена – Пуазейля используется для восстановления вязкости по экспериментальным данным при определении вязкости капиллярным вискозиметром. Метод капиллярной вискозиметрии заключается в измерении объемного расхода жидкости G через тонкий капилляр при заданном перепаде давлений Δp . Зная геометрические параметры капилляра, можно вычислить вязкость с помощью соотношения, получаемого из (2.2.15):

$$\mu = \frac{\pi R^4 \Delta p}{8GL}.$$

2.2.4. Установившееся течение между двумя вращающимися коаксиальными цилиндрами

Рассмотрим геометрию, показанную на рис. 2.6. Зазор между двумя коаксиальными цилиндрами с радиусами r_1 и r_2 заполнен жидкостью. Вдоль

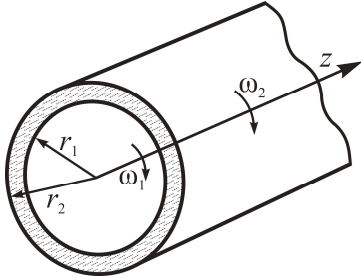


Рис. 2.6. Геометрия задачи и система координат для течения между вращающимися цилиндрами

оси z все параметры постоянны и течение отсутствует. Цилиндры вращаются с угловыми скоростями ω_1 и ω_2 – для внутреннего и внешнего цилиндров соответственно. Очевидно, что имеем слоистое течение с одной отличной от нуля компонентой скорости v_φ (см. уравнения (2.2.6)). Поскольку будет рассматриваться стационарное решение, уравнения примут вид

$$v_\varphi \equiv u = u(r) \neq 0, \quad \rho \frac{u^2}{2} = \frac{dp}{dr}, \quad \frac{dp}{d\varphi} = 0, \quad \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{du}{dr} \right) - \frac{u}{r^2} = 0. \quad (2.2.16)$$

Граничные условия для (2.2.16):

$$u(r) = r_1 \omega_1 \quad \text{при} \quad r = r_1, \quad u(r) = r_2 \omega_2 \quad \text{при} \quad r = r_2. \quad (2.2.17)$$

Общее решение последнего уравнения в (2.2.16) имеет вид

$$u = C_1 r + C_2 \frac{1}{r}. \quad (2.2.18)$$

Находя константы C_1 и C_2 в (2.2.18) с помощью граничных условий (2.2.17), получаем решение для поля скорости в данной задаче:

$$u(r) = \frac{1}{r_2^2 - r_1^2} \left[r(\omega_2 r_2^2 - \omega_1 r_1^2) - \frac{r_1^2 r_2^2}{r} (\omega_2 - \omega_1) \right]. \quad (2.2.19)$$

Для малых зазоров между цилиндрами (случай, когда $\xi = \frac{r_2 - r_1}{r_2} \ll 1$)

выражение (2.2.19) можно линеаризовать по параметру ξ и показать, что оно сводится к решению задачи Куэтта (2.2.11) при $v = 0$.

Найденное решение позволяет ответить на практически важный вопрос: какой крутящий момент нужно приложить к внешнему цилиндру дли-

ной h при неподвижном внутреннем, чтобы он вращался с заданной угловой скоростью? Если определить касательную силу, приложенную к единице площади поверхности цилиндра со стороны жидкости в направлении координатной линии φ (напряжение), то этот момент легко рассчитывается как произведение напряжения на площадь цилиндра и плечо силы, т. е. r_2 . Указанное касательное напряжение есть не что иное, как компонента $T_{r\varphi}$ тензора напряжений \bar{T} . Поэтому искомый момент выражается как

$$M_2 = T_{r\varphi} \Big|_{r=r_2} (2\pi r_2 h) r_2. \quad (2.2.20)$$

Компонента тензора напряжений $T_{r\varphi} = \mu \left(\frac{du}{dr} - \frac{u}{r} \right)$ (см. (2.1.51) в п. 2.1.6).

Подставив это выражение с учетом (2.2.19) в (2.2.20) при $\omega_1 = 0$, найдем

$$M_2 = 2\pi\mu h \frac{r_1^2 r_2^2}{r_2^2 - r_1^2} \omega_2. \quad (2.2.21)$$

Такое же выражение получится, если рассмотреть крутящий момент, приложенный со стороны жидкости к неподвижному внутреннему цилиндру. Это равенство моментов вытекает также из общих законов баланса моментов в механике.

Из найденного решения можно также вывести частный случай для одного цилиндра, вращающегося в заполненном покоящейся жидкостью пространстве. Для этого достаточно положить $\omega_2 = 0$ и совершить предельный переход при $r_2 \rightarrow \infty$. В результате для поля скорости и для момента, действующего на цилиндр, можно записать

$$u = \frac{r_1^2 \omega_1}{r}, \quad M_1 = 2\pi\mu h r^2 \omega_1.$$

Полученные решения имеют важные практические применения. Например, на их основе строится теория смазки, в которой рассчитываются потери на трение и несущая сила подшипников скольжения. В отличие от рассмотренного здесь идеализированного случая в этой теории цилиндры (вал и обойма подшипника) не являются соосными и имеют небольшой эксцентриситет, хотя оси их остаются параллельными. Тогда за счет перераспределения поля давления в зазоре в его узкой части возникает несущая сила, приложенная к валу, что и обеспечивает работу подшипника. Задача о течении в таком подшипнике может решаться методами теории возмущений, где нулевым (невозмущенным) приближением является рассмотренная здесь осесимметричная задача.

Другой важный практический аспект найденного решения – использование его в методе ротационной вискозиметрии. Простейший ротационный вискозиметр представляет собой цилиндрическую емкость с приводом для вращения, в которой соосно с ней с маленьким зазором между стенками расположен неподвижный цилиндр с датчиком крутящего момента, приложенного к нему. Емкость, включая зазор между цилиндрами, заполняется исследуемой жидкостью и приводится во вращение с фиксированной угловой скоростью ω . В установившемся режиме измеряется приложенный к внутреннему цилиндру крутящий момент M . По этим данным и геометрическим параметрам вискозиметра с помощью соотношения, вытекающего из (2.2.20), вычисляется вязкость исследуемой жидкости (см. задачи 3–5):

$$\mu = \frac{M_2 (r_2^2 - r_1^2)}{2\pi h \omega_2 r_1^2 r_2^2}.$$

Неустойчивость Тейлора. В рассмотренной задаче о течении между коаксиальными цилиндрами имеется существенное отличие для двух режимов течения: с неподвижным внутренним цилиндром и с неподвижным внешним. Данное отличие обусловлено различным характером центробежных сил, действующих на частицы жидкости при их движении по круговым траекториям в зазоре и стремящихся прижать частицы к внешнему цилиндру. В первом случае эти силы убывают по мере удаления от поверхности внешнего цилиндра, т. е. при движении против сил инерции. Процесс можно сравнить с жидкостью в поле силы тяжести со слоями различной плотности, убывающей с высотой. Такая жидкость является абсолютно устойчивой, поскольку, если в результате возмущения частица жидкости из верхнего слоя смещается вниз и попадает в более плотные слои, по законам плавучести она стремится всплыть и восстановить равновесие. Аналогично, если возмущение сместит ее вверх, то она попадет в более легкие слои и будет тонуть снова, восстанавливая равновесное состояние.

Во втором режиме движения инерционные силы, наоборот, возрастают по мере удаления от поверхности внешнего цилиндра. Здесь аналогом будет жидкость в поле тяжести со слоями, плотность которых растет с высотой. Нетрудно понять, что такая ситуация является неустойчивой, поскольку при любом смещении частицы жидкости вверх или вниз силы плавучести будут провоцировать ее дальнейшее движение в том же направлении. Из этих рассуждений следует, что во втором режиме течения, когда вращается внутренний цилиндр, могут появиться неустойчивости, приводящие к перестройке поля течения. В работах Тейлора было отмечено, что существует критическая скорость вращения цилиндра, выше которой одномерное слоистое течение перестраивается и в поперечном сечении зазора (вдоль оси цилиндра)

ров) появляется система парных тороидальных вихрей, вращающихся в противоположных направлениях (рис. 2.7). Как показывает опыт, такая неустойчивость действительно имеет место (рис. 2.8).

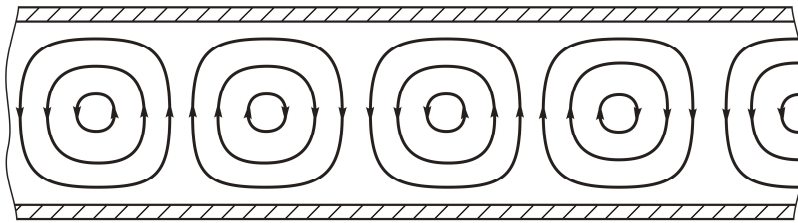


Рис. 2.7. Вихри Тейлора

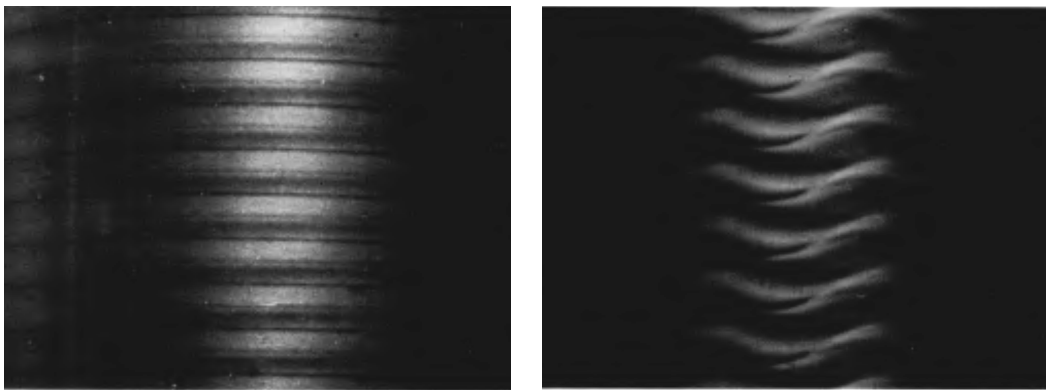


Рис. 2.8. Осесимметричные ламинарные вихри Тейлора. Машинное масло, содержащее для визуализации течения алюминиевый порошок, заполняет зазор между неподвижным внешним стеклянным цилиндром и вращающимся внутренним металлическим цилиндром с относительным радиусом 0,896. Скорость вращения на снимке слева в 1,16 раза больше той, для которой Тейлор предсказывает возникновение регулярно расположенных тороидальных вихрей, видных на снимке. Радиальная компонента скорости течения направлена внутрь (широкие темные горизонтальные кольца) и наружу (светлые). На снимке справа при скорости вращения в 8,5 раза большей критической течение оказывается двоякопериодическим с шестью волнами по окружности вихрей

Эти вихри по мере дальнейшего роста скорости вращения после их возникновения претерпевают новые бифуркации, приводящие к появлению новых структур. Заметим, что именно по причине возможности возникновения неустойчивости Тейлора в ротационном вискозиметре используется вращение только наружного цилиндра.

2.2.5. Плоская стенка в жидкости, внезапно приведенная в движение

Пусть полупространство, заполненное вязкой жидкостью, ограничено плоской твердой стенкой (рис. 2.9). До начального момента времени и жидкость и стенка покоились, а в момент $t_0 = 0$ стенка начала двигаться вдоль своей плоскости со скоростью u_0 . Уравнение (2.2.3) в этом случае сводится к виду

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (2.2.22)$$

а начальные и краевые условия записываются следующим образом:

$$\text{для } t < 0 \quad y \in [0, \infty), \quad u(t, y) = 0, \quad (2.2.23)$$

$$\text{для } t \geq 0 \quad u(t, y)|_{y=0} = u_0, \quad u(t, y)|_{y \rightarrow \infty} \rightarrow 0.$$

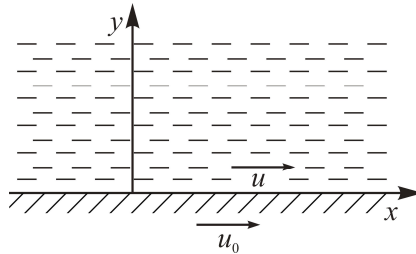


Рис. 2.9. Геометрия задачи и система координат

Введем автомодельную переменную

$$\eta = \frac{y}{2\sqrt{\nu t}}$$

и будем искать решение в виде

$$u = u_0 f(\eta).$$

В результате (2.2.22) трансформируется в

$$f'' + 2\eta f' = 0, \quad (2.2.24)$$

а краевые условия (2.2.23) – в

$$\begin{cases} f = 1 & \text{при } \eta = 0; \\ f \rightarrow 0 & \text{при } \eta \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (2.2.25)$$

Общее решение уравнения (2.2.24) имеет вид

$$f = C_1 + C_2 \int \exp(-S^2) dS.$$

Учет граничных условий (2.2.25) позволяет найти константы, которые не определены, в результате получаем решение задачи, выраженное через функцию ошибок:

$$u(y) = u_0 \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{y/(2\sqrt{vt})} \exp(-S^2) dS \right).$$

Профили функции $f(\eta) = u/u_0$ и скорости u показаны на рис. 2.10. Как видно из рисунка, при $\eta = 1,6$ имеем $u = 0,1u_0$. Обозначим через δ толщину слоя жидкости, прилегающей к стенке, которая пришла в движение вследствие движения стенки. Границей этого слоя условно примем значение координаты y в точке, где $u = 0,1u_0$.

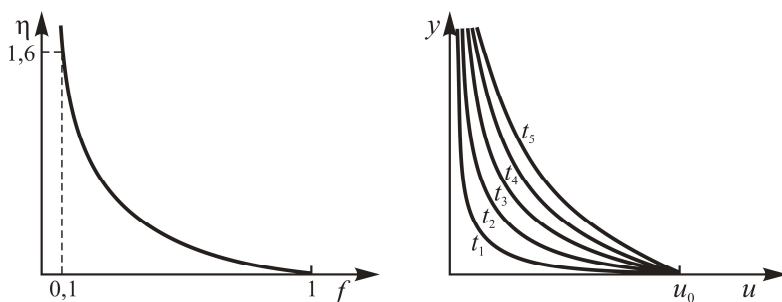


Рис. 2.10. Профили автомодельной функции f и скорости u

Из сказанного выше следует, что $1,6 = \eta_\delta = \frac{\delta}{2\sqrt{vt}}$. Тогда $\delta(t) = 2 \cdot 1,6\sqrt{vt}$,

т. е. $\delta \sim \sqrt{t}$. Таким образом, толщина слоя жидкости, пришедшего в движение вместе с пластиной, растет пропорционально корню квадратному от времени.

2.2.6. Неслоистые течения. Плоское течение вблизи критической точки

Рассмотрим тело, расположенное в набегающем на него потоке. Для определенности будем считать течение плоским (рис. 2.11), т. е. тело, изображенное на рисунке, протяженным и перпендикулярным плоскости рисунка. Видно, что тело искривляет линии тока и поток разделяется на две половины,

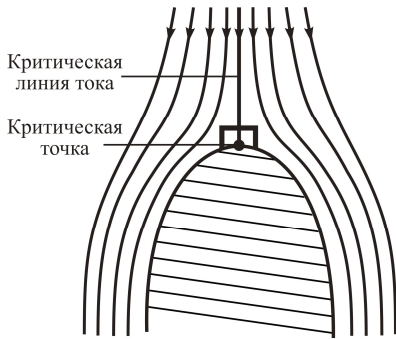


Рис. 2.11. Понятие о критической точке

обтекающие тело справа и слева. При этом всегда существует пограничная линия тока, которая делит поток на эти половины и не уходит ни вправо, ни влево, а упирается в вершину тела. Такая линия тока называется критической, а точка, в которую она упирается, – критической точкой. Если рассмотреть малую окрестность критической точки (например, ограниченную прямоугольником на рис. 2.11), то кривизной поверхности тела можно пренебречь и рассмотреть задачу о течении в этой окрестности

в упрощенной постановке (рис. 2.12). Плоский поток набегает из бесконечности на плоскую стенку, разделяясь на две половины и уходя вправо и влево. Начало декартовой системы координат расположено в критической точке, как показано на рисунке.

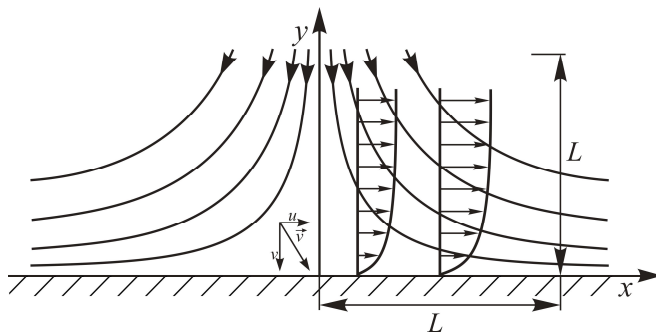


Рис. 2.12. Геометрия задачи и система координат

Поскольку поток плоский и, следовательно, z -компонента скорости равна нулю, уравнения гидродинамики (2.1.37), (2.1.38) для x -компоненты $V_x \equiv u$ и y -компоненты $V_y \equiv v$ скорости \vec{V} в стационарном случае примут вид

$$\rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = - \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (2.2.26)$$

$$\rho \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = - \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right), \quad (2.2.27)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (2.2.28)$$

Функция тока. Введем так называемую функцию тока ψ , определяемую следующими соотношениями:

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (2.2.29)$$

Как легко убедиться подстановкой (2.2.29) в (2.2.28), введение функции тока эквивалентно тому, что уравнение неразрывности (2.2.28) выполняется тождественно. Затем, дифференцируя уравнение (2.2.26) по x , а уравнение (2.2.27) – по y и вычитая первое из второго, исключаем из них давление, сводя к одному уравнению:

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \nu \frac{\partial^3 \psi}{\partial y^3}. \quad (2.2.30)$$

Таким образом, с помощью введения функции тока достигаются следующие преимущества:

- 1) система из трех уравнений сводится к одному уравнению;
- 2) функция ψ имеет удобный физический смысл – ее изолинии являются линиями тока.

Поясним последнее утверждение. Пусть функция тока $\psi(x, y)$ известна. Рассмотрим семейство ее изолиний, т. е. линий равного значения этой функции, и градиент функции тока в некоторой точке на ее изолинии (рис. 2.13). Как известно, вектор градиента функции указывает направление ее скорейшего возрастания и, следовательно, перпендикулярен к ее изолинии. На рисунке показан этот вектор и его компоненты, а также компоненты вектора скорости. Скалярное произведение вектора скорости на вектор градиента функции тока выражается, как видно из рисунка, следующим образом:

$$\vec{V} \cdot \text{grad } \psi = V_x (\text{grad } \psi)_x + V_y (\text{grad } \psi)_y = \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial y} = 0.$$

Равенство нулю скалярного произведения этих векторов означает, что они взаимно перпендикулярны. Следовательно, вектор скорости в каждой точке изолинии функции тока является касательным к ней, поскольку он перпендикулярен вектору $\text{grad } \psi$, являющемуся перпендикуляром к этой линии. Иными словами, изолинии функции тока описывают траектории частиц жидкости для данного поля скорости, т. е. являются линиями тока. Отсюда происходит название функции ψ .

Можно также показать, что разность значений функции тока для двух изолиний равна расходу потока жидкости, заключенного между этими изолиниями (линиями тока).

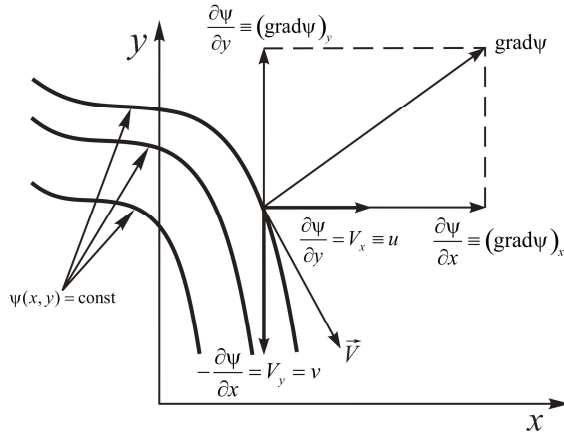


Рис. 2.13. Понятие о функции тока

Отметим, что введение функции тока является стандартным приемом при решении двумерных задач для несжимаемой жидкости. Это позволяет упростить постановку задачи и ее решение, а также дает возможность наглядного представления результатов.

Постановка задачи. Если перейти в (2.2.26), (2.2.27) от вязкой жидкости к идеальной, т. е. положить $\mu = 0$, то получившаяся таким образом из (2.2.26)–(2.2.28) система уравнений будет иметь простое решение:

$$\psi = axy, \quad u = ax, \quad v = -ay, \quad p = p_0 - \frac{\rho}{2} a^2 (x^2 + y^2), \quad (2.2.31)$$

здесь $a = \text{const}$ характеризует интенсивность течения. Нетрудно убедиться, что линии тока течения, описываемого решением (2.2.31), полностью аналогичны картине течения на рис. 2.11. В самом деле, построим семейство изолиний функции тока (2.2.31), положив левую часть этого соотношения равной константе: $axy = C$. Из данного соотношения следует, что семейство линий тока в этом течении описывается уравнением

$$y = \frac{C}{ax},$$

в котором каждому значению константы C соответствует своя траектория. Как видим, траектории частиц жидкости или линии тока являются гиперболами, что соответствует картине течения на рис. 2.11.

Согласно решению (2.2.31), скорость v зависит от координаты y линейно, поэтому константу интенсивности потока можно определить как

$$a = -\frac{\partial v}{\partial y}. \quad (2.2.32)$$

На бесконечном расстоянии от стенки $(u/v) \rightarrow 0$, т. е. линии тока параллельны оси y , что тоже соответствует картине плоскопараллельного потока в невозмущенном состоянии.

Сформулируем краевые условия на бесконечности для исходной задачи (2.2.26)–(2.2.28) аналогично тому, какими они являются в решении (2.2.31), т. е. для заданного a [1/с] положим, что при $y \rightarrow \infty$ имеет место, как и в (2.2.32), $\frac{\partial v}{\partial y} \rightarrow -a$. Добавляя к этому стандартные условия прилипания для вязкой жидкости на стенке и задавая значение давления в критической точке $(0, 0)$, получаем следующие краевые условия для системы (2.2.26)–(2.2.28):

$$u(x,0) = 0, \quad v(x,0) = 0, \quad p(0,0) = p_0; \quad \left. \frac{\partial v}{\partial y} \right|_{y \rightarrow \infty} \rightarrow -a. \quad (2.2.33)$$

Краевые условия для скорости можно также переформулировать в терминах функции тока:

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{y=0} = 0, \quad p(0,0) = p_0; \quad \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} \right|_{y \rightarrow \infty} \rightarrow a. \quad (2.2.34)$$

Будем искать решение в предположении, что, как и в (2.2.31), ψ зависит от x линейно:

$$\psi = xf(y). \quad (2.2.35)$$

Тогда, согласно (2.2.29), имеем

$$v = -f(y), \quad u = xf'(y), \quad (2.2.36)$$

а решение для p будем искать в виде, аналогичном (2.2.31):

$$p - p_0 = \frac{\rho a^2}{2} (x^2 + F(y)). \quad (2.2.37)$$

Подставляя (2.2.36) в (2.2.26)–(2.2.28) (или (2.2.35) – в (2.2.30)), получим

$$f'^2 - ff'' = a^2vf'''. \quad (2.2.38)$$

Если необходимо также найти поле давления, то после решения уравнения (2.2.37) его можно восстановить по уравнению, получаемому подстановкой (2.2.36) в (2.2.27):

$$ff' = \frac{a^2 F'}{2} - \nu f'' . \quad (2.2.39)$$

Граничные условия для (2.2.38), (2.2.39) вытекают из (2.2.33) или (2.2.34):

$$f(0) = 0, \quad f'(0) = 0, \quad F(0) = p_0; \quad f'|_{y \rightarrow \infty} \rightarrow a . \quad (2.2.40)$$

Преобразуем систему так, чтобы исключить параметры a и ν из (2.2.38), (2.2.39). Введем пока произвольные параметры α и A и определим новую переменную η и новую функцию $\varphi(\eta)$:

$$\eta = \alpha y, \quad f(y) = A\varphi(\eta), \quad \text{т. е. } \varphi(\eta) \equiv \frac{1}{A} f\left(\frac{\eta}{\alpha}\right). \quad (2.2.41)$$

При подстановке их в (2.2.38) получим

$$\alpha^2 A^2 (\varphi'^2 - \varphi\varphi'') = a^2 + \nu A \alpha^3 \varphi''' . \quad (2.2.42)$$

Пользуясь произвольностью α и A , потребуем, чтобы все коэффициенты в (2.2.42) были равны a^2 :

$$\alpha^2 A^2 = a^2, \quad \nu A \alpha^3 = a^2,$$

откуда находим неизвестные параметры

$$\alpha = \sqrt{\frac{a}{\nu}}, \quad A = \sqrt{\nu a} . \quad (2.2.43)$$

Подставив найденные в (2.2.43) значения параметров α и A в (2.2.42), получим

$$\varphi''' + \varphi\varphi'' - \varphi^2 + 1 = 0 . \quad (2.2.44)$$

При этом граничные условия (2.2.40) примут вид

$$\varphi(0) = 0, \quad \varphi'(0) = 0, \quad \varphi'(\eta)|_{\eta \rightarrow \infty} \rightarrow 1, \quad (2.2.45)$$

а соотношения (2.2.41) трансформируются в

$$\eta = \sqrt{\frac{a}{\nu}} y, \quad f(y) = \sqrt{a\nu} \varphi(\eta) . \quad (2.2.46)$$

Краевая задача (2.2.44), (2.2.45) может быть решена (например, в виде рядов Тейлора), и специальная функция $\varphi(\eta)$ и ее производная найдены в явном виде. Тогда функцию тока и поле скоростей с помощью (2.2.35), (2.2.36) и (2.2.46) можно представить следующим образом:

$$\psi(x, y) = x\sqrt{av}\varphi\left(\sqrt{\frac{a}{v}}y\right), \quad v(y) = -\sqrt{av}\varphi\left(\sqrt{\frac{a}{v}}y\right), \quad u(x, y) = xa\varphi'\left(\sqrt{\frac{a}{v}}y\right). \quad (2.2.47)$$

На рис. 2.14 приведены профили функций $\varphi(\eta)$ и $\varphi'(\eta)$, которые, согласно (2.2.47), связаны с компонентами скорости. При этом кривая для $\varphi'(\eta)$, начиная со значения $\eta = 2,4$, менее чем на 1% отличается от своего асимптотического значения, равного единице. Это значит, что продольная к стенке компонента скорости претерпевает полное изменение в пределах ограниченного пристеночного слоя, а вне его остается практически постоянной. Как видно из рисунка и из соотношений (2.2.47), профиль поперечной к стенке компоненты скорости, начиная с этого же значения η , становится линейным ($\partial v/\partial y = -a$). Следовательно, условие (2.2.33), которое ставилось на бесконечности, начинает выполняться с достаточной точностью уже за пределами указанного пристеночного слоя. Для толщины слоя $y = \delta$, в котором $u = 0,99u_\infty$, имеем $\eta = 2,4 = \sqrt{a\delta/v}$, откуда

$$\delta = 2,4\sqrt{\frac{v}{a}}. \quad (2.2.48)$$

Выберем вблизи критической точки объем конечного размера L такой, что $L \gg \delta$, тогда с достаточной точностью можно считать, что $v \approx -ay$. Полагая, что поперечная скорость при $y = L$ равна v_0 , можно найти a :

$$a = \frac{v_0}{L}. \quad (2.2.49)$$

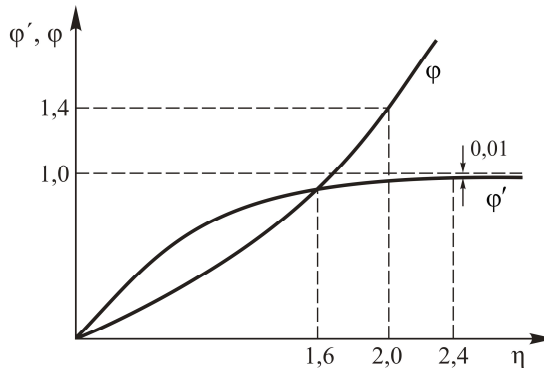


Рис. 2.14. Автомодельные кривые

Подставив (2.2.49) в (2.2.48), получим

$$\delta = 2,4 \sqrt{\frac{\nu L}{v_0}} = 2,4L \sqrt{\frac{\nu}{v_0 L}} = 2,4L \frac{1}{\sqrt{Re}}. \quad (2.2.50)$$

Таким образом, находим, что толщина пристеночного слоя обратно пропорциональна \sqrt{Re} и не зависит от x . Этот факт отражает достаточно общие закономерности в гидродинамике, которые в дальнейшем будут рассмотрены в теории пограничного слоя.

Однако перед этим сделаем небольшое отступление.

2.3. Задача теплопроводности в твердом теле при граничном условии 3-го рода. Регулярный режим

Как известно, в теории теплопроводности твердых тел при формулировке краевых задач граничные условия сводятся к заданию трех условий теплообмена на ограждающих поверхностях:

- 1) граничное условие 1-го рода: задается температура на поверхности как функция точки поверхности и времени;
- 2) граничное условие 2-го рода: задается плотность теплового потока как функция точки поверхности и времени;
- 3) граничное условие 3-го рода связывает температуру твердой стенки с температурой окружающей среды с помощью заданного значения коэффициента теплообмена α (закон Ньютона).

Заметим, что в случае контакта двух тел используется граничное условие 4-го рода, когда требуются равенства температур и тепловых потоков на поверхности контакта (см. п. 5.7).

Необходимо отметить следующее. В граничном условии 3-го рода неизвестная температура поверхности твердого тела связана с известной температурой окружающей среды с помощью заданного значения коэффициента теплообмена α . Однако в отличие от аналогичного условия для уравнения теплообмена в жидкости в данном случае при обезразмеривании граничного условия 3-го рода для твердого тела появляется критерий Био $Bi = \alpha \delta / \lambda_s$, в который входит коэффициент теплопроводности твердого тела λ_s , а не коэффициент теплопроводности жидкости. Этим он отличается от числа Nu , которое используется в формулировке задач теплообмена в жидкости, обтекающей твердое тело (см. ниже п. 2.5–2.9).

Для примера рассмотрим плоскую стенку толщиной 2δ . Пусть стенка нагревается окружающей средой с температурой T_c . В начальный момент температура стенки постоянна и равна $T_0 < T_c$ (рис. 2.15).

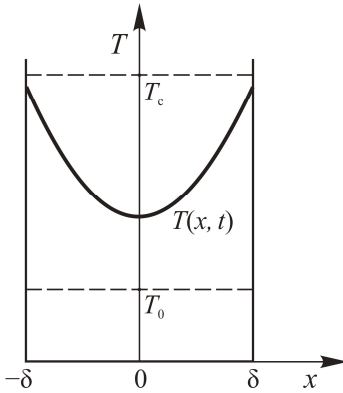


Рис. 2.15. Распределение температуры в неограниченной пластине

Сформулируем постановку задачи теплопроводности:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (2.3.1)$$

$$T(x, 0) = T_0, \quad (2.3.2)$$

$$\lambda_s \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=\delta} = \alpha [T_c - T(\delta, t)], \quad (2.3.3)$$

$$-\lambda_s \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=-\delta} = \alpha [T_c - T(-\delta, t)]. \quad (2.3.4)$$

В симметричном случае вместо (2.3.4) можно написать

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = 0. \quad (2.3.5)$$

В безразмерных переменных

$$\Theta = \frac{T(x, t) - T_0}{T_c - T_0}, \quad \xi = \frac{x}{\delta}$$

граничное условие (2.3.3) принимает вид

$$\left. \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} \right|_{\xi=1} = -\frac{\alpha \delta}{\lambda_s} \Theta \Big|_{\xi=1} = -\text{Bi} \Theta \Big|_{\xi=1}, \quad (2.3.6)$$

где критерий $Bi = \alpha\delta/\lambda_s$ (λ_s – коэффициент теплопроводности твердого тела); коэффициент теплообмена α считается заданным (как в условии (2.1.61)).

Частное решение уравнения теплопроводности (2.3.1) после применения метода разделения переменных при симметричном граничном условии (2.3.5) имеет вид

$$\Theta = D \cos k\xi \exp(-k^2 at).$$

Для определения k используется граничное условие (2.3.3). В результате получаем характеристическое уравнение

$$\operatorname{ctg}\beta = \frac{\beta}{Bi}, \quad \beta = k\delta. \quad (2.3.7)$$

Коэффициент D определяется из начального условия (2.3.2). Число корней характеристического уравнения (2.3.7) бесконечно велико:

$$\beta_1 < \beta_2 < \dots < \beta_n.$$

Несколько первых корней затабулировано [2].

Общее решение рассматриваемой задачи имеет вид

$$\Theta = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos \beta_n \xi \exp(-\beta_n^2 Fo), \quad (2.3.8)$$

где

$$A_n = (-1)^{n+1} \frac{2Bi\sqrt{Bi^2 + \beta_n^2}}{\beta_n(Bi^2 + Bi + \beta_n^2)}.$$

Таким образом, относительная температура Θ есть функция числа Fo , относительной координаты ξ и критерия Bi , т. е. $\Theta = \Theta(\xi, Fo, Bi)$.

Анализ полученного решения показывает:

а) если $Bi \rightarrow \infty$, то температура поверхности пластины становится равной температуре окружающей среды T_c , а температурный перепад между центральным слоем и поверхностью пластины наибольший;

б) если критерий Bi мал ($Bi < 0,1$), то все члены ряда ничтожно малы по сравнению с первым и $\Theta = 1 - \cos \sqrt{Bi} \xi \exp(-BiFo)$. В этом случае температура поверхности близка к температуре центрального слоя, т. е. перепад между ними наименьший.

Как уже отмечалось, в (2.3.8) значения корней характеристического уравнения быстро возрастают с увеличением номера члена ряда. Поэтому,

чем больше величина числа Fo , тем меньше величина старшего члена ряда по сравнению с величинами предшествующих членов. Таким образом, после некоторого значения Fo , т. е. через определенный промежуток времени, с большой степенью точности закон нагревания тела может быть выражен формулой

$$\Theta = 1 - A_1 \cos \beta_1 \xi \exp(-\beta_1^2 Fo). \quad (2.3.9)$$

Логарифмируя $\Theta_1 = 1 - \Theta$, получаем

$$\ln \Theta_1 = \ln(1 - \Theta) = \ln \frac{T - T_0}{T_c - T_0} = \ln(A_1 \cos \beta_1 \xi) - \beta_1^2 Fo, \quad (2.3.10)$$

т. е. в координатах $(\ln \Theta_1, Fo)$ закон нагревания (охлаждения) при больших Fo выражается прямой линией. Такой режим называется регулярным.

Темпом изменения температуры в данной точке тела можно назвать величину

$$m = \frac{\ln(T_c - T_1) - \ln(T_c - T_2)}{t_2 - t_1},$$

где T_1 и T_2 – температуры в данной точке тела в моменты времени t_1 и t_2 . Из (2.3.10) следует, что в регулярном режиме для всех точек тела

$$m = \beta_1^2 \frac{a}{\delta^2}.$$

Таким образом, процесс нагревания (охлаждения) можно разделить на три стадии. Первая стадия представляет собой неупорядоченный режим, характерный тем, что здесь большую роль играет начальное распределение температуры и зависимость температуры от времени описывается рядом (2.3.8). Во второй стадии, называемой регулярным (упорядоченным) режимом, зависимость температуры от времени определяется простой экспонентой. В этом случае распределение температуры не зависит от начального распределения, так как A_1 входит в качестве множителя, т. е. определяет масштаб, а не существо процесса. Третья стадия соответствует стационарному состоянию (при $Fo \rightarrow \infty$ имеем $T = T_c$). Метод регулярного режима эффективно использовался в работах Г. М. Кондратьева.

2.4. Элементы теории пограничного слоя

2.4.1. Понятие о пограничном слое. Уравнения пограничного слоя

Теория пограничного слоя впервые разработана в 1904 г. Л. Прандтлем. Она применяется при описании задач внешнего обтекания тел в случае больших чисел Рейнольдса, когда либо велика скорость течения, либо мала вязкость. Эта теория по существу является приближенным методом описания данного класса задач, который выполняется тем точнее, чем больше число Рейнольдса. Она являет собой удивительный пример приближенной теории, которая для огромного класса практически важных задач позволяла формулировать их в достаточно простой форме, чтобы получать аналитические решения, и в то же время, несмотря на приближенный характер, давала возможность получать результаты с высокой точностью. Она сыграла важную роль в создании физических основ теории полета, которая зарождалась как раз в это время в связи с рождением авиации.

В п. 2.2.6 при рассмотрении задачи внешнего обтекания тела потоком (течение в окрестности критической точки) было установлено, что переход гидродинамических параметров потока от их значений на поверхности обтекаемого тела к значениям на бесконечности локализован в области, прилегающей к поверхности, и поперечный размер этой области характеризуется параметром $\bar{\delta}$. Кроме того, показано (см. (2.2.50)), что

$$\bar{\delta} \approx L \frac{1}{\sqrt{Re}}. \quad (2.4.1)$$

Эта относительно тонкая зона течения, прилегающая к поверхности обтекаемого тела, называется пограничным слоем. Подчеркнем, что этот слой не вводится искусственно, а его существование вытекает из характера картины течения, в котором в ближайшей от обтекаемой поверхности зоне происходит 99% изменения скорости и только 1% изменения происходит за пределами этой зоны. Именно расстояние до границы данной зоны условно можно принимать за толщину пограничного слоя.

На рис. 2.16 показана качественная картина обтекания тела потоком и характерные профили скорости вблизи поверхности тела, где примерная граница области существенного изменения гидродинамических параметров показана штриховой. Поскольку в силу соотношения (2.4.1) радиус искривления поверхности велик по сравнению с величиной $\bar{\delta}$, течение можно рассматривать в локальной системе координат и поверхность считать плоской.

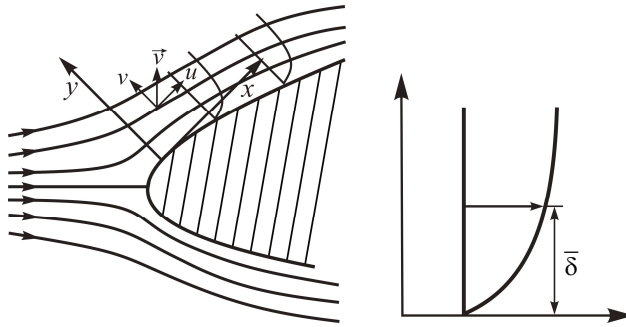


Рис. 2.16

По существу вывод уравнений пограничного слоя – это упрощение системы уравнений гидродинамики с учетом малого параметра $\bar{\delta}$ или $1/\sqrt{\text{Re}}$.

Запишем общую систему уравнений гидродинамики (2.1.43), (2.1.44) в локальной декартовой системе координат, в которой ось X лежит на обтекаемой поверхности, в безразмерном виде. Выберем характерный размер задачи L так, чтобы в интересующей нас области для безразмерных величин имело место $\partial u/\partial x \sim 1$. При обезразмеривании принимается в качестве характерной скорости скорость невозмущенного потока U , тогда ρU^2 – характерное давление; $\tau = L/U$ – характерное время. Общая обезразмеренная таким образом система уравнений имеет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (2.4.2)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right), \quad (2.4.3)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (2.4.4)$$

Система решается при граничных условиях

$$u = v = 0 \text{ при } y = 0, \quad u \rightarrow 1 \text{ при } y \rightarrow \infty. \quad (2.4.5)$$

Оценим порядок входящих в (2.4.2)–(2.4.4) членов. Введем безразмерную толщину пограничного слоя $\delta = \bar{\delta}/L$ ($\delta \ll 1$). Выполняемая оценка включает следующую последовательность шагов:

1) из (2.4.5) следует, что $u \sim 1$;

2) поскольку в силу принятого обезразмеривания $\frac{\partial u}{\partial x} \sim 1$, то второй член

в (2.4.4) для выполнения равенства должен быть того же порядка, т. е. $\frac{\partial v}{\partial y} \sim 1$;

3) из последнего выражения вытекает, что $v \sim \delta$, так как, согласно определению понятия пограничного слоя, основные изменения поля скорости происходят в слое толщиной δ , условно это можно записать как $y \sim \delta$;

4) по полученной на предыдущем шаге оценке $v \sim \delta$, а согласно принятому обезразмериванию $x \sim 1$, отсюда $\frac{\partial v}{\partial x} \sim \delta$ и $\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \sim \delta$;

5) поскольку характерный размер выбран так, что $\frac{\partial u}{\partial x} \sim 1$, а $x \sim 1$, то $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \sim 1$;

6) из $y \sim \delta$ (шаг 3) и $u \sim 1$ (шаг 1) следует $\frac{\partial u}{\partial y} \sim \frac{1}{\delta}$ и $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \sim \frac{1}{\delta^2}$;

7) из $\frac{\partial v}{\partial y} \sim 1$ (шаг 2) и $y \sim \delta$ (шаг 3) следует $\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \sim \frac{1}{\delta}$;

8) поскольку система уравнений обезразмерена так, что максимальный порядок входящих в нее членов не более единицы, то это касается и входящего в правую часть (2.4.2) члена $\frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$; тогда из оценки $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \sim \frac{1}{\delta^2}$ (шаг 6) следует $\frac{1}{\text{Re}} \sim \delta^2$ (ср. с (2.4.1), это оценка зависимости толщины пограничного слоя от числа Рейнольдса);

9) из проведенных оценок видно, что в уравнении (2.4.3) нет членов более высокого порядка, чем δ , тогда это должно быть справедливо и для $\frac{\partial p}{\partial y}$, т. е. $\frac{\partial p}{\partial y} \sim \delta$; отсюда с учетом $y \sim \delta$ (шаг 3) следует $\Delta p \sim \delta^2$ или $p(x, y, t) \approx P(x, t)$, где P – давление в невозмущенном потоке (заданная функция).

Для производных по времени оценок не даем, поскольку для стационарных задач они равны нулю, а для нестационарных определяются порядком остальных членов.

Подытожим проведенные оценки, переписав уравнения (2.4.2)–(2.4.4) с указанием порядка величины входящих в них членов. В подстрочных комментариях к уравнениям ниже под каждым сомножителем слагаемого первым символом указан порядок величины сомножителя, а в скобках – номер

шага, на котором оценка данного порядка получена. В надстрочных комментариях указан итоговый порядок величины данного слагаемого. Порядок производных по времени определяется порядком наибольшего члена в соответствующем уравнении:

$$\frac{\overset{1}{\partial u}}{\overset{1}{\partial t}} + u \frac{\overset{1}{\partial u}}{\overset{1(1)}{\partial x} \overset{1(2)}{\partial x}} + \nu \frac{\overset{1}{\partial u}}{\overset{\delta(3)}{\partial y} \overset{1/\delta(6)}{\partial y}} = - \frac{\overset{1}{\partial p}}{\overset{p \rightarrow P(9)}{\partial x}} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\overset{\delta^2}{\partial^2 u}}{\overset{\delta^2(8)}{\partial x^2} \overset{1(5)}{\partial x^2}} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\overset{1}{\partial^2 u}}{\overset{\delta^2(8)}{\partial y^2} \overset{1/\delta^2(6)}{\partial y^2}}, \quad (2.4.6)$$

$$\frac{\overset{\delta}{\partial v}}{\overset{\delta}{\partial t}} + u \frac{\overset{\delta}{\partial v}}{\overset{1(1)}{\partial x} \overset{\delta(4)}{\partial x}} + \nu \frac{\overset{\delta}{\partial v}}{\overset{\delta(3)}{\partial y} \overset{1(2)}{\partial y}} = - \frac{\overset{\delta}{\partial p}}{\overset{\delta(9)}{\partial y}} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\overset{\delta}{\partial^2 v}}{\overset{\delta^2(8)}{\partial x^2} \overset{\delta(4)}{\partial x^2}} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\overset{\delta}{\partial^2 v}}{\overset{\delta^2(8)}{\partial y^2} \overset{1/\delta(7)}{\partial y^2}}, \quad (2.4.7)$$

$$\frac{\overset{1}{\partial u}}{\overset{1(2)}{\partial x}} + \frac{\overset{1}{\partial v}}{\overset{1(2)}{\partial y}} = 0. \quad (2.4.8)$$

Отбрасывая в (2.4.6)–(2.4.8) все члены порядка менее единицы приходим к выводу, что уравнение (2.4.7) целиком исчезает, в уравнении (2.4.6) пропадает пятый член, а давление задается известной функцией P . В результате система (2.4.6)–(2.4.8) преобразуется к виду

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \nu \frac{\partial u}{\partial y} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (2.4.9)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (2.4.10)$$

Это и есть уравнения пограничного слоя Прандтля. Система из трех уравнений сократилась до двух уравнений. Однако она осталась замкнутой, так как число неизвестных функций также уменьшилось на единицу, поскольку давление заменилось известной функцией.

Система (2.4.9), (2.4.10) решается при граничных условиях

$$u = v = 0 \quad \text{при } y = 0 \quad \text{и} \quad u \rightarrow U(x, t) \quad \text{при } y \rightarrow \infty. \quad (2.4.11)$$

Заметим, что выведенная система уравнений пограничного слоя все-таки является приближенной и ее результаты тем более точны, чем лучше выполняются положенные в основу вывода предположения.

2.4.2. Пограничный слой на плоской пластине

Рассмотрим полубесконечную пластину, обтекаемую плоскопараллельным потоком вдоль ее плоскости (рис. 2.17). Начало координат выбираем на передней кромке пластины, так что ось x направлена вниз по потоку. При $x \rightarrow -\infty$ невозмущенный поток однороден и имеет только одну, отличную от нуля компоненту x -скорости, равную u_∞ , давление в потоке однородное, $P = \text{const}$. Уравнения (2.4.9), (2.4.10) для стационарного течения в этом случае запишем в форме

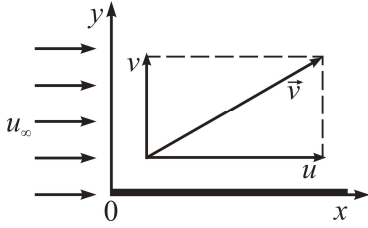


Рис. 2.17

При $x \rightarrow -\infty$ невозмущенный поток однороден и имеет только одну, отличную от нуля компоненту x -скорости, равную u_∞ , давление в потоке однородное, $P = \text{const}$. Уравнения (2.4.9), (2.4.10) для стационарного течения в этом случае запишем в форме

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (2.4.12)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (2.4.13)$$

В силу симметрии задачи можно ограничиться рассмотрением картины течения только в верхней половине плоскости xu . С учетом этого граничные условия для данной задачи имеют вид

$$u = v = 0 \quad \text{при} \quad y = 0, \quad u = u_\infty \quad \text{при} \quad y = \infty. \quad (2.4.14)$$

Решение задачи. В задаче с данной постановкой не существует характерного размера. Это позволяет предположить, что профиль скорости аффинноподобен, т. е. зависимость u от y для различных x отличается только масштабным множителем $u/u_\infty = \varphi(y/\bar{\delta})$, причем $\bar{\delta} = \bar{\delta}(x)$. Если предположить, что $\bar{\delta} \sim \sqrt{x}$ (как и в задаче о течении вблизи критической точки), то систему (2.4.12), (2.4.13) можно упростить. Выберем в этой зависимости коэффициент пропорциональности так, чтобы $\bar{\delta}$ имела размерность длины:

$$\bar{\delta} = \sqrt{\frac{\nu x}{u_\infty}}. \quad (2.4.15)$$

Это эквивалентно тому, что ищем решение в виде

$$u = u_\infty \varphi(\eta), \quad \eta = y \sqrt{\frac{u_\infty}{\nu x}} \equiv \frac{y}{\bar{\delta}}. \quad (2.4.16)$$

Введем, как и в п. 2.2, функцию тока ψ следующим образом:

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (2.4.17)$$

Подстановка (2.4.17) в (2.4.12) и (2.4.13) сводит эту систему к одному уравнению относительно ψ (при этом (2.4.13) выполняется тождественно)

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = v \frac{\partial^3 \psi}{\partial y^3}. \quad (2.4.18)$$

После введения функции тока (2.4.17) искомый вид решения для (2.4.18) согласно (2.4.16), (2.4.17) примет вид

$$\psi = \sqrt{v x u_\infty} f(\eta) = \sqrt{v x u_\infty} f\left(y \sqrt{\frac{u_\infty}{v x}}\right), \quad (2.4.19)$$

где

$$f'(\eta) \equiv \varphi(\eta).$$

Иными словами, ищем решение уравнения (2.4.18) в форме (2.4.19). При этом, если $\psi(x, y)$ будет найдена, то поле скоростей рассчитывается по вытекающим из (2.4.17) формулам

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y} = \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} = u_\infty f'(\eta), \quad (2.4.20)$$

$$v = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{u_\infty}{2} \sqrt{\frac{v}{u_\infty x}} (\eta f' - f). \quad (2.4.21)$$

Подставляя искомый вид решения (2.4.19) для ψ в уравнение (2.4.18), после некоторых преобразований получим

$$2f''' + ff'' = 0. \quad (2.4.22)$$

При этом граничные условия (2.4.14) с помощью (2.4.20), (2.4.21) трансформируются в следующие граничные условия для уравнения (2.4.22):

$$f = 0, \quad f' = 0 \quad \text{при} \quad \eta = 0; \quad f' \rightarrow 1 \quad \text{при} \quad \eta \rightarrow \infty. \quad (2.4.23)$$

Краевая задача (2.4.22), (2.4.23) определяет f как некоторую специальную функцию. Она может быть вычислена (например, в виде рядов Тейлора).

Эта специальная функция $f(\eta)$ и ее производная $f'(\eta)$ найдены в явном виде, свойства функции f графически представлены на рис. 2.18, 2.19. На рис. 2.18 показана зависимость $f'(\eta)$, которая, согласно (2.4.20), является нормированным профилем продольной компоненты скорости. Здесь важно отметить ее характеристики:

$$f'(\infty) - f'(5) = 0,01 f'(\infty), \quad \text{tg}\beta = \alpha = 0,332, \quad \int_0^{\infty} (1 - f'(\xi)) d\xi = 1,7208. \quad (2.4.24)$$

Эти характеристики ниже будут использованы для расчета практически важных параметров этого течения.

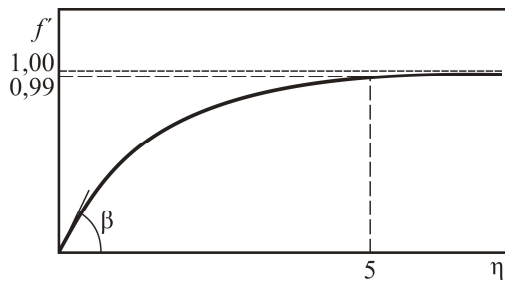


Рис. 2.18. Зависимость f' от безразмерной координаты η

На рис. 2.19 приведена качественная зависимость выражения $\eta f' - f = \frac{v}{u_{\infty}} \sqrt{\frac{u_{\infty} x}{v}}$, представляющего собой, согласно (2.4.21), нормированную y -компоненту скорости, от автомодельной переменной η . На бесконечности она не спадает к нулю, а выходит на асимптотику, указанную на рис. 2.19. Отсюда вытекает, что

$$v_{\infty} = 0,860 u_{\infty} \sqrt{\frac{v}{x u_{\infty}}}.$$

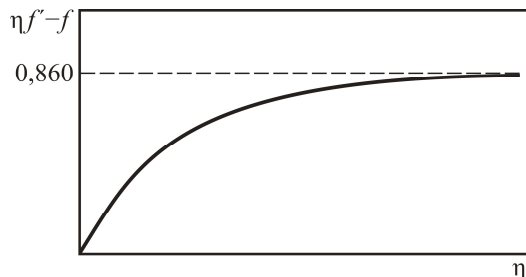


Рис. 2.19. Зависимость выражения $\eta f' - f$ от безразмерной координаты η

Появление поперечной компоненты скорости в изначально плоскопараллельном потоке объясняется тем, что прилегающий к поверхности слой жидкости приторможен в силу нулевых граничных условий для скорости на поверхности, поэтому набегающий на него поток вынужден отклоняться к периферии, чтобы обтекать этот слой.

Снова обратим внимание на то, что теория пограничного слоя – это приближенная теория, ее предсказания будут достоверны только при условии выполнения предположений, на которых основан ее вывод. Таким предположением является малость толщины пограничного слоя по сравнению с характерным размером задачи. В данной задаче, поскольку пластина полубесконечна, характерным размером по существу является расстояние от передней кромки пластины до точки или области, представляющей интерес, т. е. до значения координаты x в этом месте. В то же время характеристикой толщины пограничного слоя является величина $\bar{\delta}$, как следует из ее определения. Потому критерием, характеризующим правомочность приближения пограничного слоя, является малость отношения

$$\frac{\bar{\delta}}{x} = \frac{1}{\sqrt{\frac{u_\infty x}{\nu}}} = \frac{1}{\sqrt{Re_x}}.$$

Отсюда видно, что в области вблизи передней кромки пластины (малые x) данное условие не выполняется и полученные выше результаты справедливы только в зоне, где $x \gg \frac{\nu}{u_\infty}$. Этим объясняется наличие нефизической сингу-

лярности в полученных решениях при $x \rightarrow 0$. Однако указанное обстоятельство не снижает практической ценности данных решений, так как оценки показывают, что в большей части практически важных случаев относительная величина зоны, где приближение пограничного слоя неправомерно, мала.

2.4.3. Сопротивление трения

Рассмотрим сопротивление, которое испытывает пластина в движущемся потоке. Оно обусловлено касательными силами вязкого трения, приложенными к поверхности со стороны жидкости. Касательное усилие в нашем случае – это x -я компонента поля усилий $\vec{\tau}(\vec{n}, \vec{x})$ на поверхности, которая, согласно теореме Коши (п. 2.1.1), определяется как

$$\tau_x = \vec{\tau} \cdot \vec{e}_x = \vec{e}_x \cdot \vec{T}\vec{n},$$

где \vec{e}_x – орт координатной оси x ; $\vec{n} = \vec{e}_y$ – нормаль к поверхности, совпадающая здесь с ортом координатной оси y . Выражение $\vec{e}_x \cdot \overline{\overline{T}} \vec{e}_y$ по определению есть компонента T_{xy} тензора напряжений в декартовой системе координат, которая согласно (2.1.46) определяется как

$$T_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right).$$

В итоге касательное напряжение на поверхности пластины запишется следующим образом:

$$\tau_x|_{y=0} = T_{xy}|_{y=0} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \Big|_{y=0} = \mu \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{y=0}.$$

Последнее равенство в этом выражении вытекает из граничных условий (2.4.14).

Используя (2.4.20) и (2.4.16) с учетом (2.4.24), находим

$$\tau_x|_{y=0}(x) = \mu \frac{\partial u(x, 0)}{\partial y} = \mu u_\infty \sqrt{\frac{u_\infty}{\nu x}} f''(0) = (f''(0) = \alpha) = 0,332 \mu u_\infty \sqrt{\frac{u_\infty}{\nu x}}. \quad (2.4.25)$$

Удобно ввести локальный безразмерный коэффициент сопротивления $C'_f(x)$ согласно соотношению

$$C'_f(x) = \frac{\tau_x|_{y=0}(x)}{(\rho u_\infty^2)/2} = 0,664 \sqrt{\frac{\nu}{u_\infty x}} = \frac{0,664}{\sqrt{\text{Re}_x}}, \quad (2.4.26)$$

где Re_x – локальное число Рейнольдса.

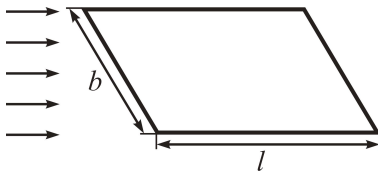


Рис. 2.20

Сила сопротивления пластины конечных размеров (рис. 2.20) рассчитывается интегрированием касательного напряжения по площади пластины

$$W = b \int_0^l \tau_x|_{y=0}(x) dx.$$

Подставляя (2.4.25), находим

$$W = \alpha \mu b u_\infty \sqrt{\frac{u_\infty}{\nu}} \int_{x=0}^l \frac{dx}{\sqrt{x}} = 0,664 b u_\infty \sqrt{\mu \rho l u_\infty}.$$

Введем полный безразмерный коэффициент сопротивления

$$C_f = \frac{W}{\frac{1}{2}\rho u_\infty^2 bl} = \frac{4\alpha}{\sqrt{\frac{u_\infty l}{\nu}}} = \frac{1,328}{\sqrt{\text{Re}}}. \quad (2.4.27)$$

Эта формула служит для практических расчетов сопротивления обтекаемых тел в форме прямоугольника.

2.4.4. Толщина пограничного слоя

Выше дано определение пограничного слоя как области, прилегающей к поверхности обтекаемого тела, в которой происходит основное изменение гидродинамических параметров потока от их значений на поверхности обтекаемого тела до значений на бесконечности. Однако строго определенной границы этого слоя нет, поскольку параметры изменяются асимптотически. Поэтому толщина его определяется условно, по какому-либо искусственно выбранному критерию. Например, одним из таких критериев может быть такой: границей пограничного слоя для данного значения продольной координаты является точка, в которой значение продольной скорости только на 1% отличается от ее значения на бесконечности, т. е. $u|_{y=\infty} - u|_{y=\delta} = 0,01u_\infty$. В п. 2.4.2 было установлено, что зависимость $u/u_\infty = f'(\eta)$ обладает свойством (2.4.24)

$$f'(\infty) - f'(5) = 0.01f'(\infty).$$

Отсюда следует, что при $y = \delta$

$$\eta = y\sqrt{\frac{u_\infty}{\nu x}} = 5. \quad (2.4.28)$$

Подставляя в (2.4.28) $y = \delta$, находим выражение для определения толщины пограничного слоя по данному критерию

$$\delta = 5\sqrt{\frac{\nu x}{u_\infty}}. \quad (2.4.29)$$

Более физичный критерий – так называемая толщина вытеснения. По этому критерию характеристикой толщины пограничного слоя является толщина слоя неподвижной (заторможенной) жидкости, прилегающей к поверхности, обтекаемого потоком с однородной продольной скоростью u_∞ , при которой в слое обеспечивается такой же дефицит расхода, как и в реаль-

ном пограничном слое. Иными словами, реальный профиль продольной скорости потока заменяется ступенчатым, с неподвижным слоем вблизи поверхности и постоянной скоростью вне этого слоя (рис. 2.21). Условие равенства дефицита расхода в модельном профиле и в реальном имеет вид

$$\int_0^{\infty} (u_{\infty} - u(y)) dx = \delta_b u_{\infty}, \quad (2.4.30)$$

где δ_b – толщина вытеснения.

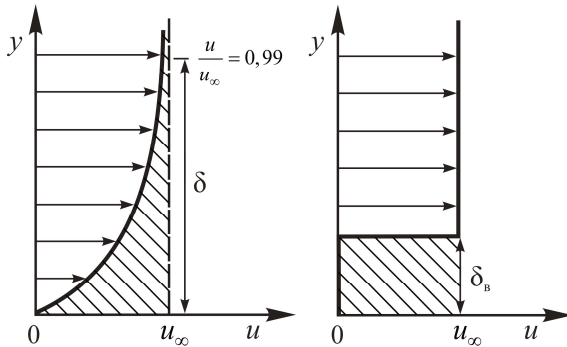


Рис. 2.21. К расчету толщины вытеснения

Следовательно, с учетом (2.4.20), (2.4.30) имеем

$$\delta_b = \frac{1}{u_{\infty}} \int_0^{\infty} (u_{\infty} - u(y)) dx = \int_0^{\infty} \left(1 - f' \left(y \sqrt{\frac{u_{\infty}}{\nu x}} \right) \right) dx = \left(\sqrt{\frac{u_{\infty}}{\nu x}} \right)^{-1} \int_0^{\infty} (1 - f'(\xi)) d\xi.$$

Отсюда с помощью последнего из соотношений (2.4.24) находим

$$\delta_b = 1,7208 \sqrt{\frac{\nu x}{u_{\infty}}}. \quad (2.4.31)$$

Данная характеристика толщины пограничного слоя удобна тем, что позволяет оценить, насколько сильно обтекаемое тело деформирует внешний поток.

2.5. Системы уравнений ламинарного конвективного теплопереноса

В этом разделе наряду с конвективными процессами, т. е. явлениями, связанными с течением среды, рассматривается также перенос тепла, обусловленный молекулярным механизмом переноса, или кондуктивный перенос тепла. Процессы, в которых проявляется совместное действие этих двух механизмов, называются процессами конвективного теплопереноса.

С формальной стороны это означает, что уравнения гидродинамики решаются совместно с уравнением теплопереноса, т. е. рассматривается полная система уравнений переноса (2.1.21)–(2.1.24). Далее будем изучать только конвективный теплоперенос, хотя надо иметь в виду, что в силу формального совпадения законов кондуктивного теплопереноса (закон Фурье) и диффузионного массопереноса (закон Фика) все задачи конвективного теплопереноса можно трактовать как задачи конвективного массопереноса, если заменить в них температуру на концентрацию примеси, коэффициент температуропроводности – на коэффициент диффузии, а тепловой поток – на диффузионный поток массы.

2.5.1. Уравнения теплового пограничного слоя

Рассмотрим вначале задачи конвективного переноса при внешнем обтекании тел. Такие задачи возникают, когда обтекающий поток и поверхность обтекаемого тела имеют разные температуры или на поверхности обтекаемого тела задан тепловой поток. Как известно из предыдущего раздела, для гидродинамических задач такого рода хорошо работает приближение пограничного слоя, которое основано на наличии малого параметра $\bar{\delta}$ (толщина пограничного слоя) или $1/\sqrt{\text{Re}}$. Подобие формы уравнения гидродинамики и теплопереноса (см. (2.1.62) и (2.1.63)) позволяет ожидать, что такое же приближение должно существовать и для задач теплопереноса, где малым параметром будет $\frac{1}{\sqrt{\text{Pe}}} = \frac{1}{\sqrt{\text{RePr}}}$ или соответственно $\bar{\delta}_T$ (толщина

термического пограничного слоя). В данном случае термический пограничный слой – это прилегающая к обтекаемой поверхности зона, где происходит практически полное изменение температуры обтекающей среды – от температуры поверхности к температуре обтекающего потока на бесконечном удалении от поверхности. Это приближение может быть выведено на основе оценок членов в уравнении теплопереноса, аналогичных тем, которые применялись при выводе уравнений гидродинамического пограничного слоя с учетом того, что основное изменение температуры потока от его значения на обтекаемой поверхности до величины, практически не отличающейся от ее значения на бесконечности, происходит внутри прилегающего к поверхности слоя толщиной $\bar{\delta}_T$.

В теории переноса с постоянными коэффициентами (2.1.28)–(2.1.30) гидродинамическая задача может быть решена отдельно от тепловой в рамках теории пограничного слоя. Выбирая локальную систему координат и проводя обезразмеривание так же, как и в п. 2.4.1, уравнения гидродинамического пограничного слоя (2.4.12), (2.4.13) в стационарном случае запишем как

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (2.5.1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (2.5.2)$$

Дополним их уравнением стационарного теплопереноса (2.1.59) для безразмерной температуры $\vartheta = \frac{T - T_\infty}{T_w - T_\infty}$ в этой же системе координат:

$$u \frac{\partial \vartheta}{\partial x} + v \frac{\partial \vartheta}{\partial y} = \frac{1}{\text{Pe}} \left(\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial y^2} \right), \quad (2.5.3)$$

где T_∞ и T_w – температуры набегающего потока и обтекаемой поверхности.

Оценим порядок входящих в (2.5.3) членов по аналогии с п. 2.4.1 с учетом того, что безразмерные толщины пограничных слоев – это величины одного порядка, т. е. $\delta_T \sim \delta$. При этом конечно $\delta_T \ll 1$ и согласно обезразмериванию $\vartheta \sim 1$. Оценку, как и ранее, будем проводить в виде последовательности шагов. Из оценок п. 2.4.1 известно:

1) $u \sim 1$,

2) $v \sim \delta$;

3) далее с учетом $\vartheta \sim 1$, $x \sim 1$ имеем $\frac{\partial \vartheta}{\partial x} \sim 1$;

4) из $\vartheta \sim 1$, $y \sim \delta_T$ следует $\frac{\partial \vartheta}{\partial y} \sim \frac{1}{\delta_T}$;

5) аналогично шагу 3 получаем $\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} \sim 1$;

6) из аргументов, использованных на шаге 4, вытекает $\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial y^2} \sim \frac{1}{\delta_T^2}$;

7) поскольку система уравнений обезразмерена так, что максимальный порядок входящих в нее членов не более единицы, это касается и входящего в правую часть (2.5.3) члена, т. е. $\frac{1}{\text{Pe}} \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} \sim 1$; отсюда и из оценки $\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial y^2} \sim \frac{1}{\delta_T^2}$

(шаг 6) следует $\frac{1}{\text{Pe}} \sim \delta_T^2$ (независимая оценка зависимости толщины теплового пограничного слоя от числа Пекле).

Подытожим проведенные в (2.5.3) оценки, расставляя порядки величин в этом уравнении таким же образом, как описано в п. 2.4.1:

$$u \frac{\partial \vartheta}{\partial x} + v \frac{\partial \vartheta}{\partial y} = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial y^2}. \quad (2.5.4)$$

Отбрасывая в (2.5.4) все члены порядка менее единицы, приходим к выводу, что в результате в нем исчезает третий член и уравнение сводится к следующему:

$$u \frac{\partial \vartheta}{\partial x} + v \frac{\partial \vartheta}{\partial y} = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial y^2}. \quad (2.5.5)$$

Уравнения (2.5.1), (2.5.2), (2.5.5) – это и есть *система уравнений теплового пограничного слоя*. Уравнения гидродинамики (2.5.1), (2.5.2) решаются отдельно, а затем эти решения используются в (2.5.5).

2.5.2. Аналогия Рейнольдса

Анализ системы уравнений теплового пограничного слоя позволяет, не прибегая к их решению, получить практически важные следствия о некоторой аналогии термических и гидродинамических процессов при конвективном теплопереносе. Это так называемая аналогия Рейнольдса. На ее основе можно по данным о гидравлическом сопротивлении рассчитать характеристики теплоотдачи и наоборот. Замечательным ее свойством является то, что она одинаково справедлива для ламинарных и турбулентных течений, для внешней и внутренней теплоотдачи.

Для вывода аналогии Рейнольдса сведем уравнения (2.5.1), (2.5.2) и (2.5.5) к форме, не содержащей Re. С этой целью введем новые переменные:

$$\bar{v} = v\sqrt{\text{Re}}, \quad \bar{y} = y\sqrt{\text{Re}}. \quad (2.5.6)$$

Подставляя (2.5.6) в (2.5.1), (2.5.2) и (2.2.5), получим

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial^2 u}{\partial \bar{y}^2}, \quad (2.5.7)$$

$$u \frac{\partial \theta}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{1}{\text{Pr}} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{y}^2}, \quad (2.5.8)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} = 0. \quad (2.5.9)$$

Как уже отмечалось в п. 2.1.7, при $\text{Pr} = 1$ уравнения (2.5.7) и (2.5.8) становятся тождественными относительно u и θ . Решение этой системы уравнений будет иметь вид

$$u = f_u(x, \bar{y}), \quad v = f_v(x, \bar{y}), \quad \theta = f_\theta(x, \bar{y}, \text{Pr}). \quad (2.5.10)$$

Возвращаясь в (2.5.10) к исходным переменным и размерному виду (размерные переменные отмечены тильдой), получим

$$\frac{\tilde{u}}{u_\infty} = f_u\left(\frac{\tilde{x}}{L}, \frac{\tilde{y}}{L} \sqrt{\text{Re}}\right), \quad \frac{\tilde{v}}{u_\infty} = f_v\left(\frac{\tilde{x}}{L}, \frac{\tilde{y}}{L} \sqrt{\text{Re}}\right), \quad (2.5.11)$$

$$\frac{T - T_w}{T_\infty - T_w} = f_\theta\left(\frac{\tilde{x}}{L}, \frac{\tilde{y}}{L} \sqrt{\text{Re}}, \text{Pr}\right).$$

Аналогия Рейнольдса должна выражаться в терминах числа Нуссельта $\text{Nu} = \frac{\alpha L}{\lambda} = \frac{q_w L}{(T_w - T_\infty)\lambda}$. Его можно трактовать как безразмерный коэффициент теплоотдачи между исследуемой жидкостью и стенкой (об отличии числа Nu от критерия Bi см. в п. 2.3):

$$\text{Nu} = \frac{\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial \tilde{y}} \right|_{\tilde{y}=0} L}{(T_w - T_\infty)\lambda} = \frac{\left. \frac{\partial T}{\partial \tilde{y}} \right|_{\tilde{y}=0} L}{T_w - T_\infty}. \quad (2.5.12)$$

С помощью (2.5.11) тепловой поток на поверхности выражается как

$$q_w = \lambda \left. \frac{\partial T}{\partial \tilde{y}} \right|_{\tilde{y}=0} = \frac{\lambda}{L} \sqrt{\text{Re}} (T_w - T_\infty) \bar{f}_\theta\left(\frac{\tilde{x}}{L}, \text{Pr}\right), \quad (2.5.13)$$

где

$$\bar{f}_\theta(x, \text{Pr}) = \left. \frac{\partial}{\partial y} f_\theta(x, y, \text{Pr}) \right|_{y=0}.$$

Подставляя (2.5.13) в (2.5.12), получим

$$\text{Nu} = \sqrt{\text{Re}} \bar{f}_\theta\left(\frac{\tilde{x}}{L}, \text{Pr}\right). \quad (2.5.14)$$

Рассмотрим теперь введенный в п. 2.4.3 безразмерный коэффициент сопротивления $C'_f(x)$ (см. (2.4.26)):

$$C'_f = \frac{T_{xy}(\tilde{x})}{\frac{1}{2}\rho u_\infty^2} = \frac{\mu \left. \frac{\partial \tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{y})}{\partial \tilde{y}} \right|_{\tilde{y}=0}}{\frac{1}{2}\rho u_\infty^2}.$$

Подставляя сюда выражение для \tilde{u} из (2.5.11), находим

$$C'_f = \frac{2}{\sqrt{\text{Re}}} \bar{f}_u \left(\frac{\tilde{x}}{L} \right), \quad (2.5.15)$$

где

$$\bar{f}_u(x) = \left. \frac{\partial}{\partial y} f_u(x, y) \right|_{y=0}.$$

Комбинируя (2.5.14) и (2.5.15), получаем

$$\text{Nu} = \frac{1}{2} C'_f \text{Re} \bar{f} \left(\frac{\tilde{x}}{L}, \text{Pr} \right), \quad (2.5.16)$$

где

$$\bar{f}(x, \text{Pr}) = \frac{\bar{f}_\theta(x, \text{Pr})}{\bar{f}_u(x)}.$$

Это выражение и есть аналогия Рейнольдса. Оно связывает безразмерный коэффициент сопротивления и число Нуссельта (безразмерный коэффициент теплоотдачи). Заметим, что при $\text{Pr} = 1$ функция $\bar{f} = 1$. Тогда $\text{Nu} = C'_f \text{Re} / 2$. Благодаря отмеченной в начале данного раздела универсальности этого соотношения, оно во многих случаях дает возможность получать оценки для теплоотдачи по данным о гидравлическом сопротивлении и наоборот.

2.5.3. Свободная конвекция. Уравнения Буссинеска для свободно-конвективного теплообмена. Критерии подобия для свободной конвекции

В предыдущих разделах речь шла о конвективном теплопереносе в условиях, когда течение среды обусловлено внешними причинами, например перепадом давлений, вентилятором, ветром, движением тела в среде, если система координат связана с телом, и т. п. Существует однако обширный класс явлений конвективного теплообмена, в которых само наличие теплообмена является причиной течения среды. Такая ситуация имеет место, если рассматриваемая система находится в поле массовых сил (скажем, в поле

силы тяжести). Если система однородна, то массовая сила также однородна и компенсируется однородным градиентом гидростатического давления, так что система остается в неподвижном равновесии. При возникновении неоднородности температуры в силу теплового расширения образуется неоднородность плотности, а следовательно, и неоднородность массовой силы, которая, как правило, не может быть скомпенсирована градиентом давления, а значит, должна привести к появлению течения. Проще говоря, более нагретые и менее плотные слои жидкости всплывают вверх, а более холодные опускаются. Возникающее течение, в свою очередь, модифицирует перенос тепла и, таким образом, наблюдается процесс, в котором оба явления – теплообмен и течение – взаимосвязаны. Такие процессы называют свободной конвекцией или естественной конвекцией. Свободная конвекция широко распространена в окружающей нас жизни и является главным фактором при формировании климатических явлений в атмосфере, в процессах горения, в теплообменном оборудовании, формировании теплового режима жилых помещений и т. д.

В отличие от других задач конвективного переноса в задачах свободно-конвективного теплопереноса нельзя решить гидродинамическую задачу отдельно от тепловой (как, например, указывалось в п. 2.5.1), а затем найденное поле скорости использовать в уравнении теплопереноса. Здесь обе задачи взаимосвязаны и их надо решать совместно. При этом даже если жидкость слабосжимаемая, фактором сжимаемости (точнее – термическим расширением) пренебречь нельзя, поскольку он является ключевым в возникновении данного явления. Этими обстоятельствами обусловлены трудности в отыскании решений задач свободно-конвективного переноса.

Полная система уравнений конвективного переноса (п. 2.1.4, уравнения (2.1.21)–(2.1.24)) описывает и свободно-конвективный перенос, поскольку учитывает эффекты сжимаемости и в уравнении (2.1.22) содержит член, определяющий массовую силу. Однако такая система слишком сложная для решения и, кроме того, ее необязательно решать в полном виде, поскольку для большинства практически важных задач она может быть сведена к более простому виду в приближенной формулировке практически без потери точности. Это названное по имени ее автора приближение Буссинеска основано на том, что относительная величина вариаций плотности в свободно-конвективных течениях невелика и кинематика данных течений может описываться на основе соответствующего аппарата для несжимаемых жидкостей.

Для вывода уравнения Буссинеска запишем полную систему уравнений переноса (2.1.21)–(2.1.24):

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{\rho} (\text{grad } \rho) \cdot \bar{v} + \text{div } \bar{v} = 0, \quad (2.5.17)$$

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\text{grad } \bar{v}) \bar{v} = -\frac{1}{\rho} \text{grad } p + \frac{\lambda}{\rho} \text{grad}(\text{div } \bar{v}) + \nu \Delta \bar{v} + \bar{g}, \quad (2.5.18)$$

$$\rho c_v \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\text{grad } \theta) \cdot \bar{v} \right) = k \Delta \theta - p \text{div } \bar{v}, \quad (2.5.19)$$

$$\rho = \hat{\rho}(p, \theta). \quad (2.5.20)$$

Вывод приближения Буссинеска основывается на предположении о том, что $(\Delta p / \rho) \ll 1$. Это означает, что в уравнении (2.5.17) первые два члена можно отбросить, а сжимаемость учитывать только в члене, отвечающем за силовые параметры (подчеркнут в правой части (2.5.18)), и в уравнении состояния (2.5.20).

Поскольку движущей силой конвективных течений являются изменения плотности и они малы, разложим уравнение (2.5.20) в ряд Тейлора около равновесных значений, ограничившись только линейными членами:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(p, \theta) &= \hat{\rho}(p_e, \theta_e) + \frac{\partial \hat{\rho}(p_e, \theta_e)}{\partial \theta} (\theta - \theta_e) + \frac{\partial \hat{\rho}(p_e, \theta_e)}{\partial p} (p - p_e) + \dots = \\ &= \rho_e (1 - \beta(\theta - \theta_e) + \beta_p (p - p_e)), \end{aligned} \quad (2.5.21)$$

где $\rho_e = \hat{\rho}(p_e, \theta_e)$, $\beta = -\frac{1}{\hat{\rho}} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \theta} \Big|_{\substack{p=p_e \\ \theta=\theta_e}}$, $\beta_p = \frac{1}{\hat{\rho}} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial p} \Big|_{\substack{p=p_e \\ \theta=\theta_e}}$.

Рассмотрим все параметры как их равновесные значения плюс малые добавки:

$$\theta = \theta_e + \theta', \quad p = p_e + p', \quad \rho = \rho_e + \rho'.$$

Здесь p_e не постоянно, а равно гидростатическому давлению. Интегрируя (2.5.18) в равновесном состоянии ($\bar{v} = 0$), получим

$$p_e(\vec{x}) = p_0 + \rho_{\text{cp}} \bar{g} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0). \quad (2.5.22)$$

Если h есть характерный вертикальный размер (вдоль \bar{g}), то характерный перепад давлений будет

$$\delta p = \rho_{\text{cp}} g h.$$

Этот перепад приведет к изменению плотности

$$\delta\rho_p = \beta_p \rho_{\text{ср}}^2 gh,$$

так что

$$\frac{\delta\rho_p}{\rho_{\text{ср}}} = \beta_p \rho_{\text{ср}} gh.$$

С другой стороны, вариации температуры $\Delta\theta$ являются причиной изменения плотности

$$\frac{\delta\rho_\theta}{\rho_{\text{ср}}} = \beta\Delta\theta.$$

Поскольку $\beta \approx 3 \cdot 10^{-3}$ 1/К (газы) и $\sim 0,5 \cdot 10^{-3}$ 1/К (жидкости), а $\beta_p \approx 3 \cdot 10^{-5}$ 1/Па (газы) и $\sim 0,5 \cdot 10^{-3}$ 1/Па (жидкости), то нетрудно убедиться, что при умеренных перепадах температуры

$$\frac{\delta\rho_p}{\rho_{\text{ср}}} \ll \frac{\delta\rho_\theta}{\rho_{\text{ср}}} \ll 1. \quad (2.5.23)$$

Отсюда следует, что в (2.5.21) последний член в скобках можно опустить, т. е. использовать

$$\rho = \rho_{\text{ср}} (1 - \beta\theta'). \quad (2.5.24)$$

В силу последнего знака неравенства в (2.5.23) в уравнениях (2.5.13)–(2.5.19) будем учитывать изменения плотности только в силовом члене (подчеркнут), в остальных жидкость рассматриваем как несжимаемую. Тогда уравнения (2.5.13)–(2.5.19) принимают вид

$$\text{div } \vec{v} = 0, \quad (2.5.25)$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\text{grad } \vec{v}) \cdot \vec{v} = - \frac{1}{\rho} \text{grad } p + \nu \Delta \vec{v} + \vec{g}, \quad (2.5.26)$$

$$\rho c_v \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\text{grad } \theta) \cdot \vec{v} \right) = \lambda \Delta \theta. \quad (2.5.27)$$

Рассмотрим подчеркнутый член в (2.5.26) с учетом (2.5.22), (2.5.24), линеаризуя его по малой добавке $\beta\theta'$:

$$\frac{1}{\rho} \text{grad } p = \frac{\text{grad} (p_0 + \rho_{\text{cp}} \bar{g} \cdot (\bar{x} - \bar{x}_0) + p')}{\rho_{\text{cp}} (1 - \beta \theta')} = \frac{\rho_{\text{cp}} \bar{g} + \text{grad } p'}{\rho_e (1 - \beta \theta')} = \bar{g} + \frac{\text{grad } p'}{\rho_{\text{cp}}} + \bar{g} \beta \theta'.$$

Подставляя это в (2.5.26), получим

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\text{grad } \bar{v}) \bar{v} = -\frac{1}{\rho_{\text{cp}}} \text{grad } p' + \nu \Delta \bar{v} - \beta \theta' \bar{g}. \quad (2.5.28)$$

Система (2.5.25), (2.5.27), (2.5.28) и есть система уравнений свободно-конвективного переноса в приближении Буссинеска. Из нее явным образом видно, что уравнения взаимосвязаны, поскольку в уравнение для скорости (2.5.28) входит температура, а в уравнение для температуры (2.5.17) – скорость. Поэтому решать их необходимо совместно.

Обезразмерим систему (2.5.25), (2.5.27), (2.5.28). Пусть заданы характерный размер L и характерный перепад температуры $\Delta \theta = \theta_1 - \theta_0$. Построим остальные характерные значения по параметрам задачи:

$$\text{скорость } U = \frac{\nu}{L}, \quad \text{время } \tau = \frac{L^2}{\nu}, \quad \text{давление } P = \rho_{\text{cp}} U^2 = \frac{\rho_{\text{cp}} \nu^2}{L^2}.$$

Обезразмеривая стандартным образом, получим связь размерных и безразмерных (с тильдой) параметров и операторов:

$$\bar{v} = \frac{\nu}{L} \tilde{v}, \quad \bar{x} = L \tilde{x}, \quad t = \frac{L^2}{\nu} \tilde{t}, \quad \theta = \theta_0 + \tilde{\theta} \delta \theta, \quad p' = \frac{\rho_{\text{cp}} \nu^2}{L^2} \tilde{p}, \quad (2.5.29)$$

$$\text{grad} = \frac{1}{L} \widetilde{\text{grad}}, \quad \Delta = \frac{1}{L^2} \widetilde{\Delta}, \quad \text{div} = \frac{1}{L} \widetilde{\text{div}}.$$

Подставляя (2.5.29) в (2.5.25), (2.5.27) и (2.5.28), найдем безразмерную систему уравнений свободно-конвективного переноса:

$$\widetilde{\text{div}} \tilde{v} = 0, \quad (2.5.30)$$

$$\frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{t}} + (\widetilde{\text{grad}} \tilde{v}) \tilde{v} = -\widetilde{\text{grad}} \tilde{p} + \tilde{\Delta} \tilde{v} - \text{Gr} \tilde{\theta} \frac{\bar{g}}{g}, \quad (2.5.31)$$

$$\frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \tilde{t}} + (\widetilde{\text{grad}} \tilde{\theta}) \cdot \tilde{v} = \text{Pr} \tilde{\Delta} \tilde{\theta}, \quad (2.5.32)$$

где все размерные параметры, входящие в уравнение (2.5.31), образовали безразмерный комплекс, называемый критерием Грасгофа

$$\text{Gr} = \frac{\beta g \Delta \theta L^3}{\nu^2}. \quad (2.5.33)$$

Если на границах задан тепловой поток q_w , а не перепад температуры, то вместо $\Delta \theta$ используется $q_w L / \lambda$ и тогда критерий Грасгофа модифицируется:

$$\text{Gr} = \frac{\beta g q_w L^4}{\nu^2 \lambda}.$$

Употребляется часто также число Рэлея

$$\text{Ra} = \text{Gr Pr} = \frac{\beta g q_w L^4}{\nu \lambda a} = \frac{\beta g \Delta \theta L^3}{\nu a}.$$

Данные безразмерные критерии характеризуют отношение сил плавучести к силам вязкости и являются показателем интенсивности свободной конвекции.

2.5.4. Уравнения конвективного теплопереноса в каналах

Другой класс задач теории конвективного теплообмена – это задачи внутреннего теплообмена. К ним принадлежат процессы конвективного теплопереноса жидкости, движущейся в канале. Этот вид конвективного теплопереноса имеет большое практическое значение, поскольку широко распространен во многих технологических процессах, таких как процессы химических технологий, энергетики, теплообменного оборудования, нефтепереработки и др.

Здесь рассматривается лишь небольшой круг наиболее важных задач этого типа. Прежде всего ограничимся изучением прямолинейных каналов круглого сечения, т. е. проще говоря – труб. Второе ограничение – исследование теплообмена на участке развитого гидродинамического течения. Понятие развитого течения связано с начальным участком течения – зоны, прилегающей к входному концу трубы. В этой зоне происходит перестройка формы профиля скорости от плоского, как правило, во входном сечении трубы до параболического профиля Пуазейля (2.2.14), который рассмотрен в п. 2.2.3 для бесконечно длинной трубы. Эта перестройка схематично показана на рис. 2.22 и понять ее можно из представления о пограничном слое в пристеночной зоне входного участка, в котором наблюдается переход профиля скорости от нулевого значения на стенке до однородного в ядре потока.

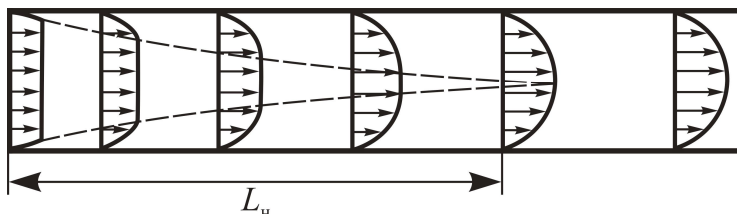


Рис. 2.22. Формирование профиля Пуазейля

Толщина этого пограничного слоя по мере удаления от края трубы растет до тех пор, пока его граница, имеющая форму кольца в каждом сечении, не сомкнется на оси трубы на некотором расстоянии от входа. Примерно в этом месте и формируется пуазейлев профиль скорости, который далее вниз по потоку уже не меняется. Участок развитого течения это и есть та зона, где профиль скорости уже сформировался и далее остается неизменным.

Из решения задачи о течении в круглой полуограниченной трубе можно найти следующую оценку для длины начального участка:

$$L_n = 0,057d \operatorname{Re},$$

где $d = 2R$ – диаметр трубы, а диапазон характерных чисел Рейнольдса для ламинарных течений $\operatorname{Re} = 10 - 2000$. Отсюда видно, что длина начального участка составляет от одного до нескольких десятков калибра трубы. Область развитого течения – это область вне начального участка, т. е. на расстоянии не менее чем L_n от входа в канал. Из приведенных оценок ясно, что в большинстве практически важных случаев длина начального участка занимает относительно малую часть длины трубы и их можно рассматривать в предположении развитого течения.

Рассмотрим уравнения конвективного теплообмена в круглой трубе в области развитого течения в цилиндрической системе координат при условии азимутальной симметрии и стационарного течения. Полная система уравнений переноса (см. (2.1.21), (2.1.24)) для этой геометрии имеет вид

$$\mu \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{du}{dr} \right) = \frac{dp}{dz}, \quad \frac{\partial p}{\partial z} = \text{const}, \quad u = u(z); \quad (2.5.34)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial z} = \alpha \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right), \quad \alpha = \frac{\lambda}{\rho c}. \quad (2.5.35)$$

Уравнение (2.5.34) так же, как и в теории пограничного слоя, может решаться отдельно от уравнения (2.5.35) и его решение уже получено выше, – это профиль Пуазейля (2.2.14), который нашли в п. 2.2.3:

$$u(r) = \frac{1}{4\mu} \frac{\Delta P}{L} R^2 \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right). \quad (2.5.36)$$

Объемный расход жидкости G и средняя по сечению скорость \bar{u} выражаются отсюда как

$$G = \frac{\pi R^4}{8\mu} \frac{\Delta P}{L} = \bar{u} \pi R^2, \quad \bar{u} = \frac{G}{\pi R^2} = \frac{R^2 \Delta P}{8\mu L}. \quad (2.5.37)$$

Введем безразмерные переменные

$$\theta = \frac{T - T_1}{\Delta T}, \quad \tilde{r} = \frac{r}{R}, \quad \tilde{z} = \frac{z}{L}, \quad \tilde{t} = \frac{ta}{R^2}$$

и безразмерные параметры

$$l = \frac{L}{2R}, \quad \text{Gz} = \text{Pe}l = \frac{2R\bar{u}}{a} \frac{L}{2R} = \frac{L\bar{u}}{a}$$

– критерий Гретца (см. п. 2.17). Тогда (2.3.35) с учетом (2.5.36), (2.5.37) принимает вид

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tilde{t}} + \left(2\text{Gz}(1 - \tilde{r}^2) \frac{\partial \theta}{\partial \tilde{z}} - \frac{4}{l^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tilde{z}^2} \right) = \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left(\tilde{r} \frac{\partial \theta}{\partial \tilde{r}} \right). \quad (2.5.38)$$

Поскольку в типичных случаях для порядков безразмерных параметров в (2.5.38) имеет место $\text{Gz} \approx 1$ и $1/l^2 \approx 10^{-2} - 10^{-5}$, вторым слагаемым в скобках можно пренебречь по сравнению с первым и уравнение сводится к

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tilde{t}} + 2\text{Gz}(1 - \tilde{r}^2) \frac{\partial \theta}{\partial \tilde{z}} = \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left(\tilde{r} \frac{\partial \theta}{\partial \tilde{r}} \right). \quad (2.5.39)$$

Физически это означает, что пренебрегается малым кондуктивным переносом тепла вдоль трубы по сравнению с большим конвективным переносом. Подобный прием использовался и при выводе уравнения теплового пограничного слоя. Уравнение (2.5.39) это и есть уравнение конвективного переноса в круглых каналах (см. задачу 7).

Аналогичное уравнение можно получить для любой формы поперечного сечения канала. Оно будет отличаться от (2.5.39) только выражением для зависимости скорости от поперечных координат (выражение в скобках в левой части равенства) и формой поперечного лапласиана (правая часть равенства).

2.6. Конвективный теплообмен при обтекании плоской пластины

Рассмотрим полубесконечную пластину, обтекаемую плоскопараллельным потоком вдоль ее плоскости, в геометрической и в гидродинамической постановке, такой же, как и в п. 2.4.2. Отличие от задачи, рассмотренной в упомянутом разделе, состоит в том, что ситуация неізотермична: набегающий поток имеет температуру T_∞ , а поверхность пластины поддерживается при температуре T_w (рис. 2.23), т. е. это задача внешнего конвективного теплообмена, которая решается на основе безразмерной системы уравнений теплового пограничного слоя (2.5.1), (2.5.2) и (2.5.5):

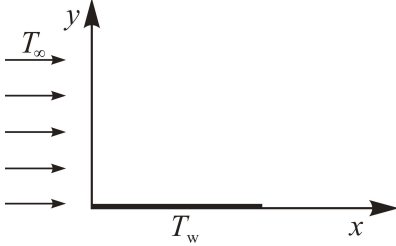


Рис. 2.23

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (2.6.1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (2.6.2)$$

$$u \frac{\partial \vartheta}{\partial x} + v \frac{\partial \vartheta}{\partial y} = \frac{1}{\text{Pe}} \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial y^2}. \quad (2.6.3)$$

Здесь и ниже одноименные размерные и безразмерные переменные отличаются наличием тильды у размерных.

Решение для гидродинамического пограничного слоя (2.6.1), (2.6.2) известно (см. п. 2.4.2) и выражается через автомодельную переменную η (2.4.16):

$$\eta = \tilde{y} \sqrt{\frac{u_\infty}{\nu \tilde{x}}} = y \sqrt{\frac{u_\infty L}{\nu x}}, \quad (2.6.4)$$

поле скорости в безразмерном виде выражается через специальную функцию f :

$$u = \frac{\tilde{u}}{u_\infty} = f'(\eta),$$

$$v = \frac{\tilde{v}}{u_\infty} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\nu}{\tilde{x} u_\infty}} (\eta f' - f) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\nu}{x L u_\infty}} (\eta f' - f),$$

которая является решением дифференциального уравнения (2.4.22)

$$ff'' + 2f''' = 0$$

при граничных условиях

$$f(0) = f'(0) = 0, \quad f'(\infty) = 1.$$

Уравнение теплового погранслоя (2.6.3), в котором

$$\vartheta = \frac{T - T_\infty}{T_w - T_\infty},$$

решается при следующих граничных условиях:

$$\theta|_{y=0} = 1; \quad \theta|_{y=\infty} = 0.$$

Ищем решение этого уравнения через ту же автомодельную переменную (2.6.4), что и для гидродинамического пограничного слоя, т. е.

$$\vartheta = \theta(\eta). \quad (2.6.5)$$

Подставляем (2.6.5) в (2.6.3):

$$\frac{d^2\theta}{d\eta^2} + \frac{\text{Pr}}{2} f \frac{d\theta}{d\eta} = 0.$$

Интегрирование этого уравнения дает

$$\theta(\eta) \equiv \theta_1(\eta, \text{Pr}) = \frac{\int_{\eta}^{\infty} \exp\left(-\frac{\text{Pr}}{2} \int_{\zeta}^{\infty} f(\zeta) d\zeta\right) d\xi}{\int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{\text{Pr}}{2} \int_{\zeta}^{\infty} f(\zeta) d\zeta\right) d\xi}.$$

Для вычисления теплового потока на стенке найдем производную

$$\left. \frac{d\theta}{d\eta} \right|_{\eta=0} = - \frac{\exp\left(-\frac{\text{Pr}}{2} \int_0^{\xi} f(\zeta) d\zeta\right)}{\int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{\text{Pr}}{2} \int_0^{\zeta} f(\zeta) d\zeta\right) d\xi} = a_1(\text{Pr}).$$

В диапазоне критерия Прандтля $0,6 < \text{Pr} < 10$, который покрывает его значения для большинства газов и жидкостей (кроме жидких металлов),

для функции $a_1(\text{Pr})$ найдена аналитическая аппроксимация (Э. Польгаузен), выполняющаяся с точностью менее 1%:

$$a_1(\text{Pr}) = 0,332\sqrt[3]{\text{Pr}}.$$

Вычислим удельный тепловой поток на стенке

$$\begin{aligned} q_w(x) &= -\lambda \left. \frac{d\theta(x, y)}{dy} \right|_{y=0} = -\lambda \left. \frac{d\theta \left(y \sqrt{\frac{u_\infty}{\nu x}} \right)}{dy} \right|_{y=0} = \\ &= -\lambda \sqrt{\frac{u_\infty}{\nu x}} (T_w - T_\infty) \left. \frac{d\theta}{d\eta} \right|_{\eta=0} = 0,332\sqrt[3]{\text{Pr}} \lambda \sqrt{\frac{u_\infty}{\nu x}} (T_w - T_\infty). \end{aligned} \quad (2.6.6)$$

Отсюда находим локальное число Нуссельта (п. 2.1.7), выбирая в качестве характерного размера расстояние от передней кромки пластины до текущей точки

$$\text{Nu} = \frac{q_w(x)x}{(T_w - T_\infty)\lambda} = 0,332\sqrt[3]{\text{Pr}} \sqrt{\text{Re}_x}. \quad (2.6.7)$$

Для пластины конечных размеров, выбранных так же, как на рис. 2.20, вычислим полный тепловой поток, интегрируя локальный тепловой поток (2.6.6) по площади пластины:

$$Q = b \int_0^l q_w(x) dx = 0,332\sqrt[3]{\text{Pr}} \lambda b (T_\infty - T_w) \sqrt{\frac{u_\infty}{\nu}} \frac{\sqrt{l}}{1/2} = 2 \cdot 0,332\sqrt[3]{\text{Pr}} \sqrt{\text{Re}} \lambda b (T_w - T_\infty).$$

Тогда среднее число Нуссельта находится как

$$\text{Nu}_{\text{cp}} = \frac{Q}{lb(T_w - T_\infty)\lambda} = 0,664\sqrt[3]{\text{Pr}} \sqrt{\text{Re}}. \quad (2.6.8)$$

Это соотношение используется для практических расчетов интенсивности теплообмена на поверхностях с внешним обдувом (см. задачи 10, 11, 17, 18).

Аналогичные критериальные зависимости возникают при решении других задач теплообмена, а также при аппроксимации экспериментальных данных. Так расчет теплоотдачи при поперечном обтекании одиночного цилиндра жидкостью можно проводить по формуле $\text{Nu} = 0,25\text{Re}^{0,6}\text{Pr}^{0,4}$, а при обтекании воздухом – $\text{Nu} = 0,22\text{Re}^{0,6}$ (задача 19).

2.7. Свободно-конвективный теплообмен около вертикальной пластины

Рассмотрим вертикальную полубесконечную пластину, ограниченную снизу и погруженную в жидкую среду, занимающую все пространство. Температура жидкости вдали от пластины T_∞ , температура на ее поверхности T_w . Система находится в поле силы тяжести, а плотность жидкости уменьшается с ростом температуры. Как описывалось в п. 2.5.3, в таких условиях около пластины должно возникнуть свободно-конвективное течение и теплообмен с ней будет формироваться этим явлением. Геометрия задачи и выбранная система координат показаны на рис. 2.24.

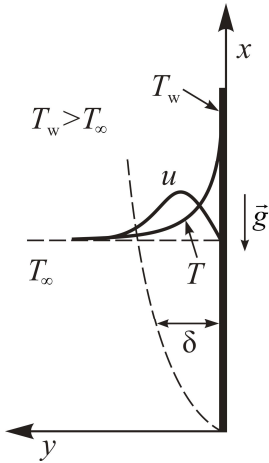


Рис. 2.24. Геометрия задачи свободно-конвективного теплообмена

Полная система уравнений свободно-конвективного переноса (2.5.25), (2.5.27) и (2.5.28) в данной геометрии для стационарного случая имеет вид

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_{cp}} \frac{\partial p'}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + (T - T_\infty) \beta g, \quad (2.7.1)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_{cp}} \frac{\partial p'}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right), \quad (2.7.2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (2.7.3)$$

$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right). \quad (2.7.4)$$

Здесь также справедливо приближение пограничного слоя. Используя, как и в п. 2.4.1, 2.5.1, оценки порядка входящих в уравнения членов, можно показать, что в приближении пограничного слоя $p' = \text{const}$, уравнение (2.7.2) исчезает (оно $\sim \delta$), а в уравнениях (2.7.1), (2.7.4) исчезают вторые производные по x . В результате (2.7.1)–(2.7.4) сводится к

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = v \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + (T - T_\infty) \beta g, \quad (2.7.5)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (2.7.6)$$

$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = a \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}, \quad a = \frac{\lambda}{\rho_{cp} c_v}. \quad (2.7.7)$$

Граничные условия для этой задачи имеют вид

$$u = v = 0, \quad T = T_w \text{ при } y = 0; \quad T \rightarrow T_\infty \text{ при } y \rightarrow \infty. \quad (2.7.8)$$

Решение (найдено Э. Польгаузенем). Введем, как и в п. 2.4.2, функцию тока (2.4.17):

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (2.7.9)$$

При этом уравнение (2.7.6) выполняется тождественно, а подставляя (2.7.9) в (2.7.5) и (2.7.7), получаем

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = v \frac{\partial^3 \psi}{\partial y^3}, \quad (2.7.10)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial y} = a \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}. \quad (2.7.11)$$

Граничные условия (2.7.8) при этом трансформируются:

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{y=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|_{y \rightarrow \infty} \rightarrow 0, \quad T|_{y=0} = T_w, \quad T|_{y \rightarrow \infty} \rightarrow T_\infty. \quad (2.7.12)$$

Э. Польгаузен нашел автомодельную переменную, позволяющую упростить уравнения:

$$\eta = C y x^{1/4}, \quad C = \left[\frac{\beta g (T_w - T_\infty)}{4 v^2} \right]^{1/4}. \quad (2.7.13)$$

Решение искалось в виде

$$\psi = 4Cx^{3/4} f(\eta), \quad T - T_\infty = (T_w - T_\infty)\theta(\eta). \quad (2.7.14)$$

Подставляя (2.7.14) в (2.7.10), (2.7.11), задачу сводим к системе уравнений

$$f''' + 3ff'' - 2(f')^2 + \theta = 0, \quad (2.7.15)$$

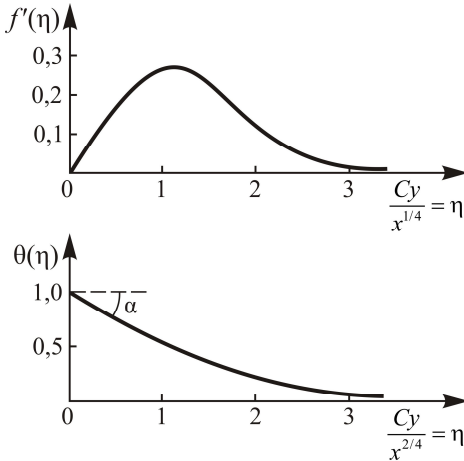
$$\theta'' + 3Pr f\theta' = 0, \quad (2.7.16)$$

а граничные условия (2.7.12) при этом трансформируются в

$$f|_{\eta=0} = f'|_{\eta=0} = 0, \quad f'|_{\eta \rightarrow \infty} \rightarrow 0, \quad \theta|_{\eta=0} = 1, \quad \theta|_{\eta \rightarrow \infty} \rightarrow 0. \quad (2.7.17)$$

Краевая задача (2.7.15)–(2.7.17) может быть решена (например, в виде рядов Тейлора) и найдены специальные функции f и θ , а также производная $f'(\eta)$. Однако в отличие от

ранее рассмотренных случаев здесь система взаимосвязана и обе функции зависят от Pr , т. е. $f = f(\eta, Pr)$, $\theta = \theta(\eta, Pr)$. Для воздуха и других двухатомных газов $Pr = 0,73$. Рассмотрим этот случай: функции f' и θ имеют вид, показанный на рис. 2.25



($f'(\eta) = \frac{u}{4C^2 x^{1/2}}$). При этом наклон касательной к кривой $\theta(\eta)$ в точке $\eta = 0$ определяется соотношением

Рис. 2.25. Распределения скоростей и температур около нагретой вертикальной пластины

$$\operatorname{tg} \alpha = -\theta'|_{\eta=0} = 0,508. \quad (2.7.18)$$

Из данного решения можно найти, используя (2.7.13) и (2.7.18), тепловой поток на высоте $x = h$ от нижней кромки пластины:

$$\begin{aligned} q(h) &= -\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0} = -\lambda (T_w - T_\infty) \theta'|_{\eta=0} Ch^{-1/4} = 0,508 \left[\frac{\beta g (T_w - T_\infty)}{4\nu^2} \right]^{1/4} \lambda (T_w - T_\infty) h^{-1/4} = \\ &= 0,359 \left[\frac{\beta g (T_w - T_\infty) h^3}{\nu^2} \right]^{1/4} \frac{\lambda (T_w - T_\infty)}{h} = 0,359 \operatorname{Gr}_h^{1/4} \frac{\lambda (T_w - T_\infty)}{h}, \end{aligned}$$

где $Gr_h = \frac{\beta(T_w - T_\infty)h^3}{\nu^2}$ – локальное число Грасгофа, построенное по расстоянию от нижней кромки пластины h . Отсюда локальное число Нуссельта

$$Nu_h = \frac{q(h)h}{\lambda(T_w - T_\infty)} = 0,395 Gr_h^{1/4}. \quad (2.7.19)$$

Для пластины конечной длины l и ширины b полный тепловой поток будет

$$\begin{aligned} Q &= b \int_0^l q(h)dh = 0,359b \left[\frac{\beta g(T_w - T_\infty)}{\nu^2} \right]^{1/4} \lambda(T_w - T_\infty) \int_0^l h^{-1/4} dh = \\ &= 0,359b \left[\frac{\beta g(T_w - T_\infty)}{\nu^2} \right]^{1/4} \lambda(T_w - T_\infty) \frac{3}{4} l^{3/4} = 0,269b Gr_l^{1/4} \lambda(T_w - T_\infty). \end{aligned} \quad (2.7.20)$$

Используя (2.7.20), получаем формулу для практических расчетов:

$$Nu_{cp} = \frac{Q}{bl \lambda(T_w - T_\infty)} = 0,269 Gr_l^{1/4}. \quad (2.7.21)$$

Напомним, что формула (2.7.21) справедлива только для двухатомных газов ($Pr \approx 0,73$).

На практике широко используется формула, обобщающая экспериментальные данные для $0,5 < Pr < 10$ и $5 \cdot 10^2 < GrPr < 2 \cdot 10^7$ [3] (см. задачи 12–15, 20, 21):

$$Nu_{cp} = 0,54(Gr Pr)^{1/4}.$$

В случае свободной конвекции жидких металлов применяется формула (см. задачу 16)

$$Nu_{cp} = 0,53(Gr Pr^2)^{1/4}.$$

2.8. Конвективный теплообмен при течении жидкости в круглой трубе при постоянном тепловом потоке на стенке

Рассмотрим достаточно длинную (бесконечную) трубу в области развитого гидродинамического течения. Изучим случай, когда на стенке трубы задана постоянная по периметру и по длине плотность теплового потока q_w (рис. 2.26).

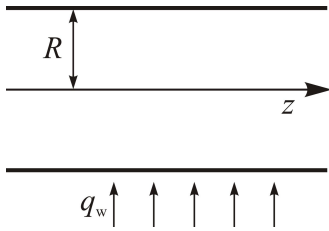


Рис. 2.26. Геометрическая схема задачи теплообмена в трубе при постоянном q_w на стенке

Запишем уравнение (2.5.39) в размерном виде

$$2\rho C_p \bar{u} \left(1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2\right) \frac{\partial T}{\partial z} = \lambda \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right). \quad (2.8.1)$$

Граничные условия в этом случае вытекают из условия постоянства плотности теплового потока на стенке и нулевого потока на оси (следствие симметрии задачи):

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} = q_w, \quad \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0. \quad (2.8.2)$$

Проинтегрируем (2.8.1) по сечению трубы:

$$2\rho C_p \bar{u} \int_0^R \frac{\partial T}{\partial z} \left(1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2\right) r dr = \lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_0^R = R q_w. \quad (2.8.3)$$

Введем средневзвешенную по сечению канала температуру в трубе:

$$\begin{aligned} \bar{T}(z) &= \frac{2\pi \int_0^R T(r, z) u(r) r dr}{2\pi \int_0^R u(r) r dr} = \frac{4\bar{u} \pi \int_0^R T(r, z) \left(1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2\right) r dr}{\bar{u} \pi R^2} = \\ &= \frac{4 \int_0^R T(r, z) \left(1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2\right) r dr}{R^2}. \end{aligned} \quad (2.8.4)$$

Дифференцируя (2.8.4) по z , получим

$$\frac{d\bar{T}(z)}{dz} = \frac{4}{R^2} \int_0^R \frac{\partial T(r, z)}{\partial z} \left(1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2\right) r dr,$$

и, подставляя результат в (2.8.3), найдем

$$2\rho C_p \bar{u} \frac{R^2}{4} \frac{d\bar{T}}{dz} = Rq_w.$$

Интегрирование этого уравнения от 0 до z дает

$$\bar{T}(z) = Az + T_0, \quad (2.8.5)$$

где

$$A = \frac{2q_w}{\rho C_p \bar{u} R}, \quad (2.8.6)$$

а T_0 – средневзвешенная температура в нулевом сечении ($z = 0$).

В силу изложенного будем искать решение задачи (2.8.1), (2.8.2) в виде

$$T(r, z) = T_0 + Az + \theta(r) = T_0 + \frac{2q_w}{\rho C_p \bar{u} R} z + \theta(r). \quad (2.8.7)$$

Подставляя (2.8.7) в (2.8.1), получаем

$$4 \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right) = \frac{\lambda R}{q_w} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \theta(r)}{\partial r} \right). \quad (2.8.8)$$

Введем безразмерные переменные

$$\vartheta = \frac{\lambda \theta}{q_w R}, \quad \tilde{r} = \frac{r}{R}. \quad (2.8.9)$$

Подставляем (2.8.9) в (2.8.8):

$$4(1 - \tilde{r}^2) = \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left(\tilde{r} \frac{d\vartheta}{d\tilde{r}} \right). \quad (2.8.10)$$

Граничные условия (2.8.2) принимают вид

$$\left. \frac{d\vartheta}{d\tilde{r}} \right|_{\tilde{r}=1} = 1, \quad \left. \frac{d\vartheta}{d\tilde{r}} \right|_{\tilde{r}=0} = 0. \quad (2.8.11)$$

Интегрируя (2.8.10) дважды, получим

$$\vartheta = 4 \left(-\frac{\tilde{r}^4}{16} + \frac{\tilde{r}^2}{4} \right) + C_1 \ln(\tilde{r}) + C_2. \quad (2.8.12)$$

Из последнего граничного условия в (2.8.11) очевидно следует

$$C_1 = 0. \quad (2.8.13)$$

Граничное условие (2.8.11) при $r = 1$ выполняется автоматически. Поэтому для определения константы C_2 пользуемся дополнительным условием, согласно которому средневзвешенное значение от $\vartheta(r)$ должно быть равно нулю. Это требование вытекает из того, что зависимость средневзвешенной температуры от z в решении (2.8.7) полностью учтена первыми двумя слагаемыми, поэтому средневзвешенное значение последнего слагаемого должно быть равно нулю. В безразмерном виде это выглядит как

$$\int_0^1 \vartheta(\tilde{r})(1 - \tilde{r}^2) \tilde{r} d\tilde{r} = 0. \quad (2.8.14)$$

Подставляя (2.8.12) в (2.8.14) и учитывая (2.8.13), после интегрирования находим $C_2 = -7/24$.

Таким образом, из (2.8.12)–(2.8.14) имеем

$$\vartheta = -\frac{\tilde{r}^4}{4} + \tilde{r}^4 - \frac{7}{24}. \quad (2.8.15)$$

В результате общее решение (2.8.7) в размерном виде будет

$$T(r, z) = \frac{2q_w}{\rho C_p \bar{u} R} z + \frac{q_w R}{\lambda} \left(-\frac{1}{4} \left(\frac{r}{R} \right)^4 + \left(\frac{r}{R} \right)^2 - \frac{7}{24} \right). \quad (2.8.16)$$

Выразим результат в терминах числа Нуссельта

$$\text{Nu} = \frac{2Rq_w}{\lambda(T(R, z) - \bar{T}(z))} = \frac{2Rq_w}{\lambda \left(\frac{2q_w}{\rho C_p \bar{u}} \frac{z}{R} + \frac{q_w R}{\lambda} \frac{11}{24} - \frac{2q_w z}{\rho C_p \bar{u} R} \right)} = \frac{48}{11} = 4,36. \quad (2.8.17)$$

Заметим, что задача о конвективном теплообмене в трубе, на стенке которой вместо теплового потока задается линейно изменяющаяся по z температура $T_w(z) = T_0 + Az$, где A – заданный инкремент нарастания температуры, будет иметь решение, совпадающее с (2.8.16), за исключением первого члена, где множителем перед z будет инкремент A . В этом случае тепловой поток на стенке находится из соотношения (2.8.6).

2.9. Теплообмен в круглой трубе при постоянной температуре стенки (задача Гретца – Нуссельта)

Рассматривается полностью развитое стационарное течение. На стенке трубы задаются тепловые граничные условия 1-го рода, т. е. фиксируется значение температуры стенки. Температура стенки везде однородна по периметру, при этом в левой половине трубы ($z < 0$) она равна T_0 , а в точке $z = 0$ скачкообразно меняется на T_c и остается такой во всей правой половине трубы ($z \geq 0$) (рис. 2.27).

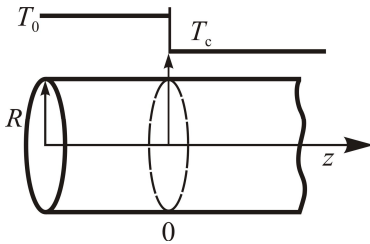


Рис. 2.27. Геометрическая схема задачи теплообмена в трубе при постоянной температуре стенки

Поскольку, согласно п. 2.5.4, продольным кондуктивным переносом пренебрегаем, температура жидкости при $z = 0$ также будет равна T_0 . Таким образом, как и в п. 2.8, решается уравнение (2.8.1), но с другими граничными условиями. Запишем это уравнение с несколько отличающимся обезразмериванием:

$$\text{Pe}(1 - \tilde{r}^2) \frac{\partial \theta}{\partial \tilde{z}} = \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left(\tilde{r} \frac{\partial \theta}{\partial \tilde{r}} \right), \quad (2.9.1)$$

где

$$\tilde{r} = \frac{r}{R}, \quad \tilde{z} = \frac{z}{R}, \quad \theta = \frac{T - T_c}{T_0 - T_c}, \quad \text{Pe} = \frac{2R\bar{u}}{a}.$$

Описанные выше граничные условия формулируются следующим образом:

$$\theta|_{\tilde{z}=0} = 1, \quad \theta|_{\tilde{r}=1} = 0, \quad \left. \frac{\partial \theta}{\partial \tilde{r}} \right|_{\tilde{r}=0} = 0. \quad (2.9.2)$$

Ищем решение методом разделения переменных, т. е. представляем искомое решение в виде произведения двух функций, из которых одна зависит от \tilde{r} , вторая – от \tilde{z} :

$$\theta(\tilde{z}, \tilde{r}) = \varphi(\tilde{z})\psi(\tilde{r}). \quad (2.9.3)$$

Подставляя (2.9.3) в (2.9.1), имеем

$$\varphi\psi' + \frac{1}{\tilde{r}}\varphi\psi' = (1 - \tilde{r}^2)\text{Pe}\psi\varphi'. \quad (2.9.4)$$

Разделив соотношение (2.9.4) на произведение $\varphi\psi$, после преобразований получим уравнение с разделяющимися переменными

$$\frac{\text{Pe}\varphi'}{\varphi} = \frac{\psi'' + \frac{1}{r}\psi'}{\psi(1-r^2)} = \text{const} \equiv -\varepsilon^2, \quad (2.9.5)$$

где ε^2 – константа разделения. Такое ее представление сложилось исторически и объясняется соображениями удобства. Постоянство левой и правой частей в равенстве (2.9.5) следует из того, что левая часть зависит только от \tilde{z} , а правая – только от \tilde{r} и их равенство может иметь место только при условии их постоянства. Из (2.9.5) получаем два независимых дифференциальных уравнения:

$$\frac{d\varphi}{dz} = -\frac{\varepsilon^2}{\text{Pe}}\varphi, \quad (2.9.6)$$

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \varepsilon^2(1-r^2)\psi = 0. \quad (2.9.7)$$

Общее решение (2.9.6) легко находится:

$$\varphi(z) = A \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{2\text{Pe}}z\right), \quad (2.9.8)$$

где A – подлежащая определению константа. Из граничных условий (2.9.2) следуют граничные условия для уравнения (2.9.7)

$$\left.\frac{d\psi}{d\tilde{r}}\right|_{\tilde{r}=0} = 0, \quad \psi|_{\tilde{r}=1} = 0. \quad (2.9.9)$$

Введем новую переменную

$$\xi = \tilde{r}\varepsilon, \quad \text{так что } \psi = \psi(\xi). \quad (2.9.10)$$

С помощью (2.9.10) преобразуем (2.9.7):

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial\psi}{\partial\xi} + \varepsilon^2\left(1 - \frac{\xi^2}{\varepsilon^2}\right)\psi = 0. \quad (2.9.11)$$

Ищем решение (2.9.11) в виде степенного ряда с постоянными коэффициентами

$$\psi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n \xi^n. \quad (2.9.12)$$

Отметим, что, согласно (2.9.12), $\left. \frac{d\psi}{dr} \right|_{r=0} = b_1$, поэтому из первого краевого условия в (2.9.9) получаем $b_1 = 0$. Подставляя (2.9.12) в (2.9.11) и собирая коэффициенты при одинаковых степенях ξ , находим рекуррентные соотношения

$$\begin{cases} b_0 = 1, \\ b_1 = 0, \\ b_2 = -\frac{b_0}{4}, \\ b_3 = -\frac{b_1}{\nu} = 0, \\ \dots \\ b_{k+2} = \frac{1}{(k+2)^2} \left(\frac{b_{k-2}}{\varepsilon^2} - b_k \right), \quad k \geq 2. \end{cases} \quad (2.9.13)$$

Так как первые два нечетных коэффициента в (2.9.13) равны нулю, а общая формула выражает каждый нечетный коэффициент через два предыдущие нечетные, то отсюда следует, что отличны от нуля только четные коэффициенты. Поэтому (2.9.12) можно представить рядом только по четным степеням:

$$\psi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} b_{2n} \xi^{2n}. \quad (2.9.14)$$

Согласно (2.9.13), коэффициент b_0 входит во все остальные четные коэффициенты как множитель, поэтому в (2.9.14) его можно вынести за скобки ряда и в общем решении (2.9.3) включить в неопределенную константу A . Следовательно, на данном этапе без ограничения общности можно положить $b_0 = 1$. Тогда рекуррентные соотношения (2.9.13) только для четных степеней можно переписать:

$$\begin{cases} b_0 = 1, \\ b_2 = -\frac{b_0}{4} = -\frac{1}{4}, \\ b_4 = \frac{1}{16} \left(\frac{1}{\varepsilon^2} - \frac{1}{4} \right), \\ \dots \\ b_{2n} = \frac{1}{(2n)^2} \left(\frac{b_{2n-4}}{\varepsilon^2} - b_{2n-2} \right). \end{cases} \quad (2.9.15)$$

Перейдем теперь от переменной ξ к исходной переменной r . Согласно (2.9.10), функцию (2.9.14) теперь можно представить как

$$\psi(\varepsilon r, \varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} b_{2n}(\varepsilon r)^{2n}. \quad (2.9.16)$$

Наличие второго аргумента ε у этой функции отражает тот факт, что коэффициенты b_{2n} , которые ее определяют, зависят от ε , как видно из (2.9.15). Для нахождения неопределенной константы ε воспользуемся вторым из краевых условий (2.9.9). Подставляя в него (2.9.16), получим алгебраическое уравнение

$$F(\varepsilon) := \psi(\varepsilon, \varepsilon) = 0.$$

Оказывается, это уравнение имеет дискретное счетное множество (спектр) корней или собственных чисел. Приведем здесь значения нескольких первых корней:

$$\varepsilon_0 = 2,705, \quad \varepsilon_1 = 6,66, \quad \varepsilon_2 = 10,3, \dots \quad (2.9.17)$$

Каждому такому собственному числу ε_n соответствует собственная функция $\psi_n(r)$, определяемая как

$$\psi_n(r) := \psi(\varepsilon_n r, \varepsilon_n), \quad (2.9.18)$$

которая является решением уравнения (2.9.7) и удовлетворяет краевым условиям (2.9.9). Первые три собственные функции, соответствующие корням (2.9.17), показаны на рис. 2.28. Как видно из рисунка, с увеличением номера функции растет тенденция к ее осцилляционному поведению. В общем случае выполняется правило: число экстремумов собственной функции равно ее номеру.

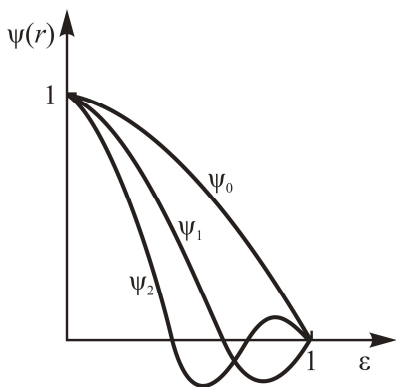


Рис. 2.28. Собственные функции ψ для корней ε

Для этих функций можно доказать условие ортогональности

$$\int_0^1 \psi_n(r) \psi_m(r) r(1-r^2) dr = 0 \quad \text{для любых } m \neq n. \quad (2.9.19)$$

Для доказательства подставим $\psi_m(r)$ в (2.9.7) и найдем из него выражение

$$\psi_m r(1-r^2) = -\frac{1}{\varepsilon_m^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi_m}{\partial r} \right). \quad (2.9.20)$$

Подставим (2.9.20) в интеграл из левой части (2.9.19) и проинтегрируем его по частям дважды. При этом внеинтегральные члены интегрирования по частям обнуляются благодаря наличию в них множителя r и краевому условию (2.9.9), в результате чего получим

$$\begin{aligned} \int_0^1 \psi_n(r) \psi_m(r) r(1-r^2) dr &= -\frac{1}{\varepsilon_m^2} \int_0^1 \psi_n(r) \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi_m}{\partial r} \right) dr = \\ &= -\frac{1}{\varepsilon_m^2} \int_0^1 \psi_m(r) \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi_n}{\partial r} \right) dr. \end{aligned} \quad (2.9.21)$$

Снова воспользуемся в последнем интеграле соотношением (2.9.20), но записанным для функции $\psi_n(r)$, тогда равенство (2.9.21) можно переписать как

$$\int_0^1 \psi_n(r) \psi_m(r) r(1-r^2) dr - \frac{\varepsilon_n^2}{\varepsilon_m^2} \int_0^1 \psi_m(r) \psi_n(r) r(1-r^2) dr = 0.$$

Отсюда следует соотношение ортогональности.

Заметим, что интегрируя (2.9.20) по r от 0 до 1, получим полезное для дальнейшего соотношение

$$\int_0^1 \psi_m(r) r(1-r^2) dr = -\frac{1}{\varepsilon_m^2} \frac{\partial \psi_m}{\partial r} \Big|_{r=1}. \quad (2.9.22)$$

Вернемся теперь к общему решению (2.9.3). Подставляя в него найденное решение (2.9.8) для функции $\varphi(z)$ и любую из функций $\psi_n(r)$, получим набор частных решений уравнения (2.9.1), удовлетворяющих краевым условиям (2.9.2), но не удовлетворяющих начальному условию $\theta(\tilde{z}=0) = 1$:

$$\theta_n(r, z) = A_n \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{\text{Pe}} z\right) \psi_n(r).$$

Решение, удовлетворяющее произвольному начальному условию, будем искать в виде ряда, представляющего собой суперпозицию указанных частных решений с пока неопределенными коэффициентами A_n :

$$\theta(r, z) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{\text{Pe}} z\right) \psi_n(r). \quad (2.9.23)$$

Потребуем, чтобы в начальном сечении ($z = 0$) решение (2.9.23) удовлетворяло некоторому заданному распределению температуры $\theta_0(r)$. Положим в (2.9.23) $z = 0$ и приравняем его функции $\theta_0(r)$:

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_n \psi_n(r) = \theta_0(r). \quad (2.9.24)$$

Умножим левую и правую части (2.9.24) на выражение $\psi_m(r)r(1-r^2)$ и проинтегрируем от 0 до 1:

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_n \int_0^1 \psi_n \psi_m r (1-r^2) dr = \int_0^1 \theta_0(r) \psi_m r (1-r^2) dr. \quad (2.9.25)$$

В силу условий ортогональности (2.9.19) в сумме в левой части (2.9.25) остается ненулевым только один член, в котором $n = m$, т. е.

$$A_m \int_0^1 \psi_m \psi_m r (1-r^2) dr = \int_0^1 \theta_0(r) \psi_m r (1-r^2) dr.$$

Из данного соотношения находим коэффициент

$$A_m = \frac{\int_0^1 \theta_0(r) \psi_m r (1-r^2) dr}{\int_0^1 \psi_m^2 r (1-r^2) dr}. \quad (2.9.26)$$

Таким образом, выражение (2.9.23), в котором функции $\psi_n(r)$ определены в (2.9.14)–(2.9.18), а коэффициенты A_m – в (2.9.26), является решением задачи с произвольным распределением температуры в начальном сечении. Для $\theta_0(r) = 1$ выражение для коэффициента A_m с учетом (2.9.22) можно переписать как

$$A_m = \frac{-\frac{1}{\varepsilon_m^2} \frac{\partial \psi_m}{\partial r} \Big|_{r=1}}{\int_0^1 \psi_m^2 r (1-r^2) dr}. \quad (2.9.27)$$

Значения нескольких первых коэффициентов этого ряда: $A_0 = 1,477$, $A_1 = -0,810$, $A_2 = 0,385$,

На рис. 2.29, *а* приведены рассчитанные по соотношениям (2.9.23), (2.9.27) зависимости температуры от радиуса на разных расстояниях от начального сечения, а на рис. 2.29, *б* – зависимость температуры от z на разных расстояниях от оси.

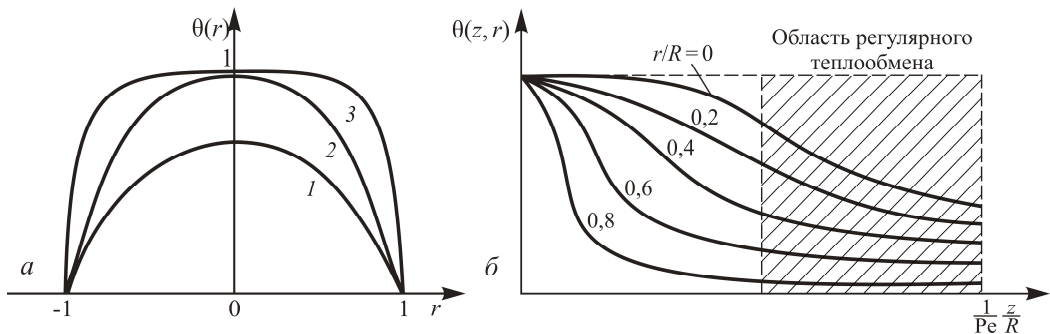


Рис. 2.29. Зависимость $\theta(r, z)$ от r на разных расстояниях от начального значения – *а* ($1 - \frac{1}{\text{Pe} R} z = 0,1$; $2 - 0,0125$; $3 -$ любые z) и зависимость $\theta(r, z)$ от z на разных расстояниях от оси – *б*

В размерном виде распределение температуры записывается следующим образом:

$$\frac{T - T_c}{T_0 - T_c} = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \psi_n \left(\frac{r}{R} \right) \exp \left(-\varepsilon_n^2 \frac{z}{\text{Pe} R} \right). \quad (2.9.28)$$

Заметим, что в ряде, представляющем решение для температуры, скорость затухания экспонент, описывающих зависимость от z , очень быстро растет с увеличением номера члена ряда (см. (2.9.17)). Это означает, что по мере удаления от начального сечения члены ряда высоких порядков быстро вырождаются и распределение температуры описывается только главным членом нулевого порядка. Эта область, где убывание температуры подчиняется экспоненциальному закону, называется областью регулярного режима (см. п. 2.3) и температура в ней описывается выражением

$$\frac{T - T_c}{T_0 - T_c} = A_0 \Psi_0 \left(\frac{r}{R} \right) \exp \left(-\varepsilon_0^2 \frac{z}{\text{Pe}R} \right). \quad (2.9.29)$$

Рассчитаем число Нуссельта:

$$\text{Nu}_d = \frac{q_c 2R}{\lambda (\bar{T}(z) - T(R, z))} = \frac{\left. \frac{dT}{dr} \right|_{r=R}}{T_c - \bar{T}(z)} \cdot 2R, \quad (2.9.30)$$

где

$$\bar{T}(z) = \frac{2\pi \int_0^R T(r, z) 2\bar{u} \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right) r dr}{\pi R^2 \bar{u}} \quad (2.9.31)$$

– средневзвешенная температура.

После подстановки (2.9.28) с учетом (2.9.22) в (2.9.31), а затем в (2.9.30) получим

$$\text{Nu}_d = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} B_n \exp \left(-\varepsilon_n^2 \frac{1}{\text{Pe} R} \frac{z}{R} \right)}{2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{\varepsilon_n^2} \exp \left(-\varepsilon_n^2 \frac{1}{\text{Pe} R} \frac{z}{R} \right)},$$

где

$$B_n = -\frac{1}{2} A_n \left. \frac{\partial \Psi_n}{\partial r} \right|_{r=1}.$$

Обратим внимание, что в зоне регулярного режима теплообмена (см. п. 2.3), где температурное поле описывается соотношением (2.9.29), число Нуссельта имеет постоянное значение, в чем нетрудно убедиться, повторяя с (2.9.29) те же выкладки, что и выше. В результате находим

$$\text{Nu}_{\text{reg}} = \frac{\varepsilon_0^2}{2} = 3,66.$$

Зависимость числа Нуссельта от продольной координаты представлена на рис. 2.30. Из этой зависимости наглядно виден выход на режим регулярного теплообмена, где Nu принимает постоянное значение. Из рис. 2.30 также следует, что область нерегулярного теплообмена занимает не более 20 калибров трубы.

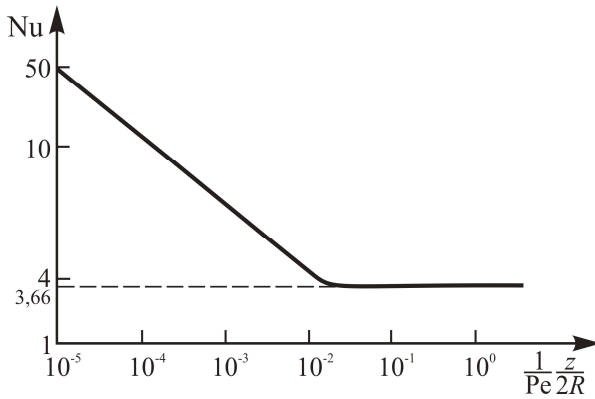


Рис. 2.30. Зависимость числа Нуссельта от продольной координаты при ламинарном течении в трубе

В монографии [3] $Nu_d = 3,66$ для $(2PeR/L) < 12$, а при $(2PeR/L) > 12$ можно пользоваться формулой (см. задачи 8, 9)

$$Nu_d = 1,61 \left(Pe \frac{2R}{L} \right)^{1/3}.$$

При турбулентном течении в трубах рекомендуется использовать следующее выражение для числа Нуссельта (см. задачу 32):

$$Nu_d = 0,021 Re^{0,8} Pr^{0,43}.$$

2.10. О сопряженных задачах конвективного теплообмена

В задачах конвективного теплообмена между телом и потоком жидкости или газа используются, как правило, граничные условия 3-го рода (закон Ньютона), т. е. условия пропорциональности теплового потока у стенки q_w разности между температурами стенки T_w и набегающего потока T_∞ :

$$q_w = \alpha(T_w - T_\infty). \quad (2.10.1)$$

Коэффициент пропорциональности α называется коэффициентом теплообмена, и при его теоретическом определении обычно предполагают, что условия на стенке заданные и постоянные. Коэффициент теплообмена α используют в двух различных аспектах. Во-первых, как заданный коэффициент в граничном условии 3-го рода (см. п. 2.3) и определяемый из эксперимента. Во-вторых, α находится из решения задачи теплообмена в жидкости при заданной температуре на поверхности.

Однако, как показано Г. Шлихтингом, во многих практически важных случаях (в частности, при высокоинтенсивных процессах) нельзя считать T_w постоянной величиной. Поэтому при заданной заранее зависимости T_w от

продольной координаты x использование закона Ньютона не всегда приемлемо, как это следует из рис. 2.31.

Применение выражения (2.10.1) и закона Фурье

$$q_w = -\lambda \frac{dT}{dy} \Big|_w$$

может привести к совершенно разным результатам. Вблизи передней кромки температурный профиль в пограничном слое близок к типу А, который соответствует профилю в случае постоянной температуры T_w ($\alpha > 0$). Однако вниз по потоку имеются точки, в которых коэффициент теплообмена отрицательный или даже терпит бесконечный разрыв (на участке между Б и В тепло передается от жидкости к стенке, хотя $T_w > T_\infty$).

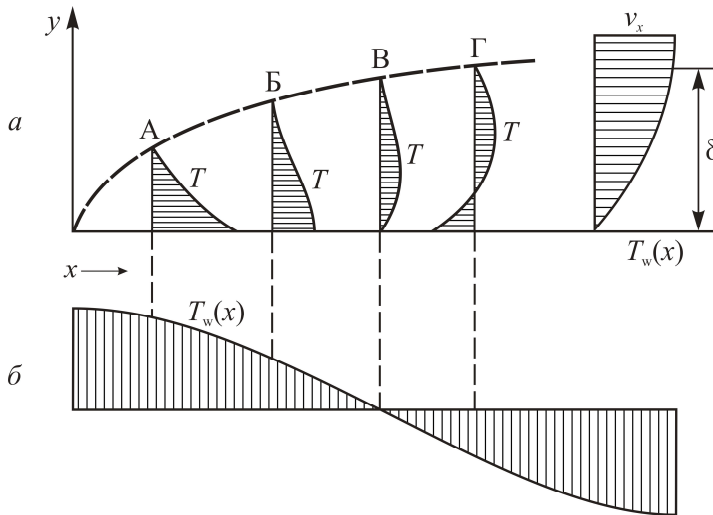


Рис. 2.31. Профиль температуры в пограничном слое (а) при заданной $T_w(x)$ (б) [6]

Интересный пример приведен в работе [7], где показано, что формальное применение концепции коэффициента теплообмена может дать абсурдный результат. Пусть твердое тело обтекается потоком газа с постоянной скоростью u . Уравнение теплопроводности в газе запишем в виде

$$\text{сри} \frac{\partial T}{\partial x} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (x \geq 0, y \geq 0).$$

Граничные условия:

$$T|_{x=0} = 0, \quad T|_{y=\infty} = 0, \quad T|_{y=0} = T_0 \phi(x),$$

где

$$\varphi(x) = \begin{cases} 1, & 0 \leq x \leq x_0; \\ 1/2, & x > x_0. \end{cases}$$

Тогда

$$q(x) = -\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0} = T_0 \sqrt{\frac{c\rho u \lambda}{\pi}} \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{x}}, & 0 < x < x_0; \\ \frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{1}{2\sqrt{x-x_0}}, & x > x_0. \end{cases}$$

Видно, что коэффициент теплообмена $\alpha(x) = \frac{q(x)}{T_0 \varphi(x)}$ является отрицатель-

ной величиной для $x_0 < x < \frac{4}{3}x_0$. Таким образом, α имеет реальный физиче-

ский смысл только для специфических температурных распределений на границе раздела, которые точно неизвестны. Поэтому условия на поверхности раздела не всегда могут задаваться, их необходимо получить путем решения уравнений распространения тепла в твердом теле и жидкости совместно с уравнениями движения, а на границе тело – жидкость должны быть заданы условия сопряжения, т. е. условия равенства температур и тепловых потоков. Такая постановка задачи теплообмена называется *сопряженной*.

Особенно важна формулировка задач конвективного теплообмена как сопряженных в нестационарном случае, когда величина теплового потока (а значит, и числа Нуссельта) на границе раздела твердое тело – жидкость зависит от времени и характеристик твердого тела. В этом заключается отличие нестационарного теплообмена от стационарного, где зависимость процесса от свойств потока и тела проявляется только в том случае, когда теплофизические характеристики тела и жидкости не очень заметно отличаются.

Впервые необходимость сопряженной постановки внешних задач конвективного теплообмена и корректность концепции коэффициента теплообмена в нестационарных задачах обсуждались в работе [8]. Попытки задавать зависимость температуры стенки от продольной координаты в задачах высокоинтенсивного теплообмена могут приводить к противоречивым результатам. Задание температуры стенки вместо ее определения из совместного решения уравнений теплопроводности для жидкости и обтекаемого тела в некоторых случаях не оправдано, поскольку температуру стенки нельзя задавать в случае интенсивного теплообмена, и решение при обычной постановке задачи не содержит зависимости от свойств обтекаемого тела и его размеров.

В дальнейшем опубликовано значительное количество работ, в которых не только формулируется сопряженная постановка задач, но и анализируется зависимость полученных решений от свойств обтекаемого тела и его размеров, т. е. рассматривается взаимное тепловое влияние тела и набегающего потока. В работе [8] при исследовании нестационарного теплообмена между телом и набегающим потоком жидкости в канале получена следующая асимптотическая зависимость q от времени и характеристик твердого тела:

$$q(\tau) \approx \lambda_f T_0 \sqrt{\frac{Pe}{dL}} \exp \left\{ -\lambda_f \sqrt{\frac{Pe}{dL}} \frac{\tau}{c_s \rho_s h} \right\},$$

где h – толщина тела; T_0 – начальная температура пластины, °C; d – эквивалентный диаметр канала. Заметим, что характерное время в экспоненте определяется свойствами и тела и потока. В более ранние моменты времени тепловой поток будет определяться суммой экспонент. Подобная экспоненциально убывающая со временем и содержащая параметры тела зависимость $q(\tau)$ подтверждена экспериментально.

Хотелось бы обратить внимание на следующий факт. Проведение современного теплового эксперимента в нестационарных условиях связано с большими трудностями, так как методический аппарат, развитый для малоинтенсивных, слабо меняющихся или стационарных режимов, оказался непригодным в условиях неустановившегося теплового нагружения большой интенсивности. Стало ясно, что определение нестационарных тепловых потоков, температуры на поверхности тела и теплофизических характеристик исследуемого материала во многих случаях может быть выполнено только с привлечением *обратных задач теплообмена*. Данное направление начало интенсивно развиваться в 70-е г. XX в. Применение принципа обратных задач теплообмена позволяет определить внешний тепловой режим по данным внутренних температурных измерений в твердом теле, т. е. найти тепловые потоки и температуры на поверхности тел. Особенно важны обратные задачи теплообмена при исследовании нестационарного теплообмена в системе внешняя среда – твердое тело. Во многих случаях только таким путем можно получить ответ на вопрос о степени сопряженности высокоинтенсивных нестационарных теплообменных процессов. Изложение всех вопросов, связанных с обратными задачами теплообмена, можно найти, например, в фундаментальной монографии [9].

Большой интерес представляют работы, в которых вводятся безразмерные параметры, описывающие взаимное тепловое влияние твердого тела и жидкости. Так, в [10] показано, что для нестационарной задачи теплообмена пластины в потоке сжимаемого газа решение тепловой сопряженной задачи определяется двумя критериями:

$$M = \left(\frac{\text{Re}C}{2} \right)^{1/2} \frac{L \lambda_{\infty}}{h \lambda_s}, \quad (2.10.2)$$

$$B = \frac{2}{\text{Re}C} \frac{a_s}{a_{\infty}}, \quad (2.10.3)$$

где C – постоянная Чепмена – Рубезина в зависимости динамической вязкости от температуры, $\text{Re} = u_{\infty} L / \nu_{\infty}$.

Физический смысл критерия M заключается в следующем: он содержит теплофизические параметры как газа, так и тела, и показывает, во сколько раз тепловой поток из газа в тело превосходит тепловой поток, распространяющийся в теле в продольном направлении. Параметр M в соотношении (2.10.2) в одинаковой степени присущ задачам стационарного и нестационарного теплообмена.

Критерий B (2.10.3) возникает только в случае нестационарного теплообмена. Он пропорционален отношению характерных времен распространения теплового импульса в пластине (L^2/a_s) и в пограничном слое ($\frac{\delta^2}{a_{\infty}C} = \frac{L^2}{\text{Re}a_{\infty}C}$). При $B \ll 1$ ($\text{Re} \gg \frac{a_s}{a_{\infty}}$) полный прогрев пограничного слоя происходит за время прохождения тепловым импульсом в пластине расстояния, намного меньшего L .

При исследовании стационарного теплообмена пластины толщиной h в потоке сжимаемого газа показано, что в распределение температуры в пограничном слое входит также безразмерный параметр [11]

$$k = \frac{1}{2} \frac{\lambda_{\infty}}{\lambda_s} \sqrt{h \frac{u_{\infty}}{\nu_{\infty}}},$$

включающий в себя характеристики как набегающего потока, так и обтекаемого тела. Отмечается, что при значениях $1 < k < \infty$ (что, как правило, соответствует плохо проводящим материалам при реальных параметрах потока) расчеты теплообмена по обычно применяемым формулам, не учитывающим теплофизические и геометрические характеристики тела, приводят к значительным погрешностям. Однако для хорошо проводящих материалов ($0 < k < 1$) возможно использование закона Ньютона и обычной формулы для числа Нуссельта (температура поверхности раздела сред в этом случае может считаться постоянной).

Остановимся еще на одном классе задач тепло- и массопереноса. Многочисленные задачи теплообмена с фазовыми и химическими превращениями при обтекании твердого (или пористого) тела потоком нагретого газа,

конденсации паров, вдува или отсоса вещества через пористую поверхность рассматриваются как сопряженные, т. е. следует совместно решать уравнения переноса в двух средах.

Наиболее сложный вопрос при математической формулировке таких задач – правильная запись краевых условий на границе (как правило, движущейся) раздела сред, где имеют место фазовые или химические превращения. Движущаяся граница раздела фаз является поверхностью сильного разрыва, на которой следует задавать условия сопряжения, получаемые из законов сохранения массы, импульса и энергии.

В то же время одним из условий сопряжения недостаточно для нахождения однозначного решения. Необходимо сформулировать дополнительные условия на поверхности разрыва, которые характеризуют степень неравновесности фазовых переходов и химических реакций, разрежение газа, а также кинетику массопереноса внутри пористого тела, если не рассматривать уравнение массопереноса в зоне испарения (см. п. 5.7).

Задачи конвективной сушки в общем случае также следует рассматривать как сопряженные. При этом тепло- и массоперенос внутри пористого тела описывается или системой взаимосвязанного тепло- и влагопереноса А. В. Лыкова [6], или системой многофазной фильтрации (см. п. 3.9, Т. 1). Однако такие задачи с гетерогенными фазовыми и химическими превращениями, являющиеся естественным образом сопряженными, отличаются от предложенных выше сопряженных задач чисто конвективного теплообмена.

2.11. Элементы теории турбулентного переноса

2.11.1. Ламинарные и турбулентные течения.

Переход к турбулентности

В гидродинамике известно, что существуют два класса сильно отличающихся по своим характеристикам течений – ламинарные и турбулентные.

Ламинарные течения при стационарных внешних условиях в конечном счете выходят на стационарный режим. Эти течения характеризуются упорядоченностью течения, траектории элементов жидкости представляют собой плавные, не перемежающиеся друг с другом линии.

Для турбулентных течений характерны следующие основные признаки:

- нерегулярность, хаотичность течения;
- трехмерность, проявляющаяся в появлении разномасштабных хаотически взаимодействующих вихрей даже при внешних условиях, предполагающих маломерность течения;
- нестационарность даже при стационарных внешних условиях, проявляющаяся в пульсациях гидродинамических параметров;

– интенсификация процессов переноса: в турбулентных течениях вязкость (перенос импульса), теплопроводность, диффузия на несколько порядков интенсивнее, чем в ламинарных;

– турбулентность встречается в области больших чисел Рейнольдса.

Схематически особенности этих течений проиллюстрированы на рис. 2.32. Картина реального струйного истечения углекислого газа из сопла в воздух показана на рис. 2.33. Как видно из рисунка, на протяжении примерно одного диаметра сопла струя остается ламинарной, далее вниз по потоку она обнаруживает неустойчивость с образованием структур в виде вихревых колец, а затем происходит переход к турбулентности.

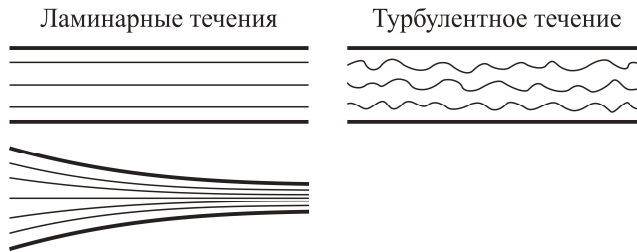


Рис. 2.32

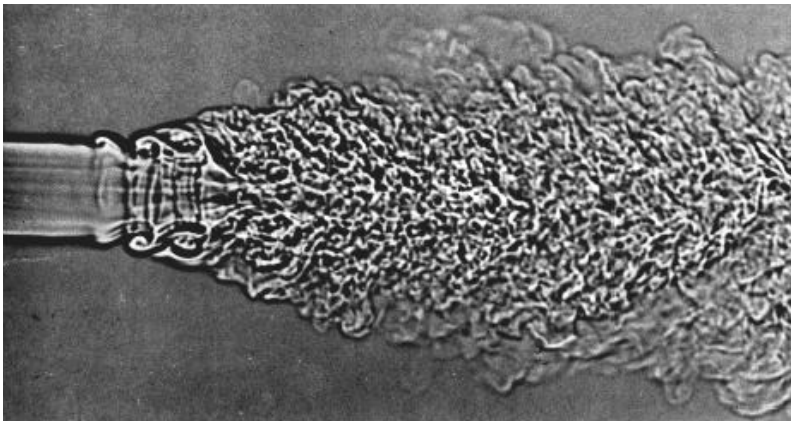


Рис. 2.33. Неустойчивость круглой струи. Теневая фотография демонстрирует струю углекислого газа диаметром 0,67 см, вытекающую в воздух при скорости 38 м/с. При $Re \approx 30\,000$ она ламинарна. На расстоянии одного диаметра вниз по потоку струя обнаруживает неустойчивость, после чего происходит образование вихревых колец и переход к турбулентности (фотография Fred Landis, Ascher H. Shapiro)

На рис. 2.34 приведена зависимость коэффициента сопротивления в круглой трубе $C'_f = \frac{\tau_w}{8\rho U_{cp}^2} = \frac{R}{16\rho U_{cp}^2} \frac{dp}{dz}$ (обозначения см. в п. 2.3.4) от критерия Рейнольдса в диапазоне, покрывающем ламинарную (1), переходную и

турбулентную (2) области. Наглядно виден различный характер этой зависимости во всех трех областях.

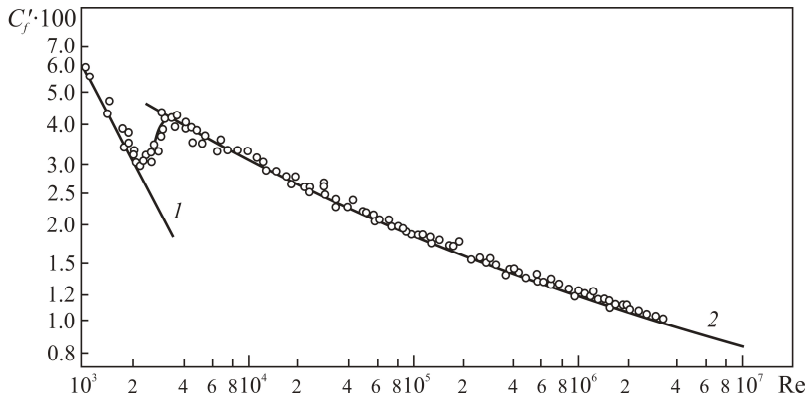


Рис. 2.34. Зависимость коэффициента сопротивления C_f от критерия Re

Существует множество определений, более или менее удачно и полно отражающих природу турбулентности, однако очевидно, что ни одно из них не может в полной мере передать сущность такого сложного и многоликого явления. Приведем некоторые из таких определений.

Турбулентность – это трехмерное нестационарное движение жидкости, в котором вследствие растяжения вихрей создается непрерывное распределение хаотических пульсаций параметров потока (скорости, давления и т. д.) в интервале длин волн от минимальных, определяемых вязкими силами, до максимальных, определяемых граничными условиями течения (П. Брэдшоу).

Турбулентность – это неупорядоченное движение, которое в общем случае возникает в жидкостях, газообразных или капельных средах, когда они обтекают непроницаемые поверхности или когда соседние друг с другом потоки одной и той же жидкости следуют рядом или проникают один в другой (Т. Карман).

Турбулентное движение жидкости предполагает наличие неупорядоченного течения, в котором различные величины претерпевают хаотическое изменение во времени и по пространственным координатам и при этом могут быть выделены статистически точные их осредненные значения (И. Хинце).

С физической точки зрения причиной возникновения турбулентности является неустойчивость того или иного рода, возникающая в рассматриваемом течении (например, след за цилиндром или струя). Следует отметить, что во многих случаях возникновению турбулентности предшествует появление упорядоченных нестационарных структур (как, например, вихревые кольца в случае струи, показанной на рис. 2.33). Механизм возникновения турбулентности подробно описан в [12].

С математической точки зрения появление турбулентности (как решения уравнений Навье – Стокса), как правило, обусловлено доминированием дестабилизирующих инерционных членов над стабилизирующими вязкими членами в уравнении баланса импульса. В результате этого решения уравнения Навье – Стокса, описывающие течения жидкости или газа, теряют устойчивость. При этом происходит лавинообразное накопление возмущений определенного вида. Потеря устойчивости ламинарным потоком – явление довольно тонкое, зависящее от большого количества внешних факторов, таких как уровень турбулентности внешнего потока, градиенты температур или давления, вдув – отсос и т. п. Следует отметить, что при потере устойчивости колебания только начинают развиваться, полностью турбулентным течение становится гораздо позже (ниже по потоку), когда амплитуды пульсаций достигнут определенного уровня. Нелинейность гидродинамических систем и соответственно описывающих их уравнений Навье – Стокса приводит к тому, что амплитуда возмущений оказывается ограниченной. Когда амплитуда возмущений достигает насыщения, говорят, что течение стало «развитым турбулентным». Отсюда следует, что критерием смены режимов, т. е. перехода от ламинарного течения к турбулентному, должен быть критерий Рейнольдса, который как раз и отражает соотношение инерционных и вязких сил.

Для каждого типа течений существует свое критическое значение критерия Рейнольдса, являющееся критерием смены режима. Можно различать нижнее и верхнее критические значения Re . Рассмотрим этот вопрос на примере течения в круглой трубе. Для круглой трубы нижним критическим значением критерия Рейнольдса является $Re_{кр,н} \approx 2300$. Это означает, что для меньших Re течение всегда ламинарное и если даже будет внесено какое-то возмущение, оно затухнет и ламинарный режим восстановится. Для значений Re , превышающих этот порог, при определенных условиях течение может переходить в турбулентный режим, который в дальнейшем сохраняется. Верхнее критическое значение критерия Рейнольдса $Re_{кр,в} \approx 5 \cdot 10^4$ определяет порог, выше которого течение всегда турбулентное и уже не может быть ламинарным ни при каких условиях. Для $Re_{кр,н} < Re < Re_{кр,в}$ режим течения зависит от внешних условий (можно организовать и турбулентное и ламинарное течение). Это область переходных режимов, в которой ламинарному режиму способствуют такие факторы, как плавные обводы входа в канал, низкий уровень турбулентности входящего потока, гладкие без шероховатостей стенки канала. И наоборот, отсутствие этих факторов провоцирует генерацию турбулентности.

Для других типов течения пороги перехода к турбулентности могут значительно отличаться от приведенных выше. Так, для затопленных струй порог перехода к турбулентности имеет величину порядка $Re \approx 10$, хотя на начальном участке струи может наблюдаться ламинарное течение и при больших значениях Re .

Для пограничного слоя можно ввести число Рейнольдса, построенное по толщине пограничного слоя $Re_\delta = u\delta/\nu$. В этом случае на разных участках пограничного слоя отмечаются разные режимы течения: на начальном участке, где $Re_\delta < Re_{\delta_{кр}}$, наблюдается ламинарное течение, а за ним происходит переход к турбулентности, причем критическое значение данного критерия Рейнольдса $Re_{\delta_{кр}} \sim 2 \cdot 10^3$.

2.11.2. Уравнения Рейнольдса осредненного турбулентного течения

Начало теоретических исследований турбулентности принято связывать с классической работой Осборна Рейнольдса, опубликованной в 1894 г. В этой работе была сформулирована методология описания турбулентных течений, суть которой заключается в представлении мгновенных значений всех гидродинамических величин (скорости, плотности, температуры и т. д.) в виде суммы осредненных (по времени или по ансамблю) и пульсационных (турбулентных) составляющих. Естественно, что изучение и описание представляющего наибольший практический интерес поведения осредненных характеристик потока, сравнительно плавно меняющихся в пространстве и во времени, оказалось делом намного более простым, чем исследование трехмерного нестационарного и в значительной степени хаотического движения, каковым в действительности является любое турбулентное течение. Благодаря этому метод Рейнольдса определил целую эпоху в теории турбулентности и до сих пор является основным, используемым для решения большинства практически важных научных и прикладных технических проблем.

Суть метода Рейнольдса состоит в осреднении мгновенных значений пульсирующих гидродинамических параметров в пределах некоторого промежутка времени T . Промежуток осреднения должен удовлетворять условию $t_x \gg T \gg \tau_t$, где τ_t – период пульсаций, t_x – характерное время изменения внешних условий, определяющих нестационарность процесса.

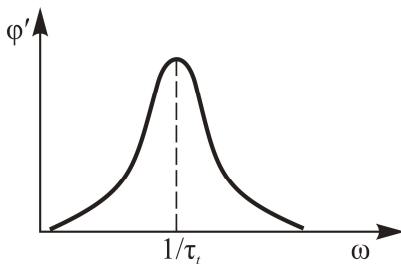


Рис. 2.35

Период пульсаций τ_t можно найти из измерений частотного спектра пульсаций, как показано на рис. 2.35. В результате такого осреднения получаются либо постоянные во времени (для стационарных процессов), либо плавно меняющиеся (для нестационарных процессов) величины, в

которых пульсирующая составляющая исключена. Таким образом, для любой пульсирующей величины ϕ осредненное значение вычисляется как

$$\bar{\varphi}(\bar{x}, t) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \varphi(\bar{x}, \tau) d\tau, \quad (2.11.1)$$

а пульсирующая составляющая –

$$\varphi'(\bar{x}, t) = \varphi(\bar{x}, t) - \bar{\varphi}(\bar{x}, t). \quad (2.11.2)$$

Тогда мгновенные значения любой флуктуирующей величины можно разложить на пульсационную составляющую (со штрихом) и плавно меняющуюся (с чертой)

$$\varphi(\bar{x}, t) = \varphi'(\bar{x}, t) + \bar{\varphi}(\bar{x}, t). \quad (2.11.3)$$

Операция усреднения (2.11.1), как следует из ее определения, является линейной и обладает следующими свойствами.

А. Среднее от любой константы a равно этой константе, как очевидно следует из (2.11.1):

$$\bar{a} = a. \quad (2.11.4)$$

Б. При повторном усреднении ничего не меняется:

$$\overline{\bar{\varphi}} = \bar{\varphi}. \quad (2.11.5)$$

Это следует из условия $t_x \gg T$. В самом деле, после усреднения (2.11.1) характерным временным масштабом изменения функции $\bar{\varphi}(t)$ является t_x , поэтому для моментов времени τ в интервале $\tau \in [t - T/2, t + T/2]$ ее изменение с высокой точностью описывается линейной аппроксимацией

$$\bar{\varphi}(\tau) = \bar{\varphi}(t) + \frac{d\bar{\varphi}(t)}{dt}(\tau - t). \quad (2.11.6)$$

Подстановка (2.11.6) вместо $\varphi(\bar{x}, \tau)$ в (2.11.1) дает (2.11.5).

В. Среднее от пульсационной составляющей равно нулю:

$$\overline{\varphi'} = 0. \quad (2.11.7)$$

Действительно, подставляя (2.11.2) в левую часть (2.11.7) и пользуясь линейностью операции осреднения и свойством (2.11.5), получаем

$$\overline{\varphi'} = \overline{\varphi - \bar{\varphi}} = \bar{\varphi} - \overline{\bar{\varphi}} = 0. \quad (2.11.8)$$

Г. Если ψ – это еще одна пульсирующая величина, то, как следует из линейности операции осреднения, имеет место свойство

$$\overline{\overline{\varphi}\psi} = \overline{\varphi}\overline{\psi}. \quad (2.11.9)$$

Д. Операции осреднения и операторы градиента и лапласиана коммутируют (это с очевидностью следует из (2.11.1)):

$$\text{grad}\overline{\varphi} = \overline{\text{grad}\varphi}, \quad \Delta\overline{\varphi} = \overline{\Delta\varphi}. \quad (2.11.10)$$

Е. Операции осреднения и взятия производной по времени коммутируют:

$$\frac{\partial\overline{\varphi}}{\partial t} = \overline{\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)}. \quad (2.11.11)$$

Докажем данную коммутативность:

$$\frac{\partial\overline{\varphi}}{\partial t} = \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial t} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \varphi(\tau) d\tau = \frac{1}{T} \left(\varphi\left(t + \frac{T}{2}\right) - \varphi\left(t - \frac{T}{2}\right) \right) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \frac{\partial\varphi(\tau)}{\partial\tau} d\tau = \overline{\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)}.$$

Перейдем к выводу уравнений Рейнольдса, используя операцию осреднения (2.11.1) и ее свойства (2.11.4)–(2.11.11).

Рассмотрим уравнения движения для несжимаемой жидкости (2.1.23), (2.1.24):

$$\rho \left(\frac{\partial\vec{v}}{\partial t} + (\text{grad}\vec{v})\vec{v} \right) = -\text{grad}p + \mu\Delta\vec{v}, \quad (2.11.12)$$

$$\text{div}\vec{v} = 0, \quad (2.11.13)$$

где обе переменные есть пульсирующие величины

$$\vec{v} = \overline{\vec{v}} + \vec{v}', \quad p = \overline{p} + p'. \quad (2.11.14)$$

При этом согласно (2.11.7) $\overline{\vec{v}'} = 0$, $\overline{p'} = 0$.

Воспользуемся формулой тензорного анализа (\otimes – тензорное произведение, представление его в координатной форме (см. Приложение 4 к гл. 1))

$$\text{div}(\vec{v} \otimes \vec{v}) = (\text{grad}\vec{v})\vec{v} + \vec{v}\text{div}\vec{v} \quad (2.11.15)$$

и перепишем (2.11.12) с помощью (2.11.13) и (2.11.15):

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{v} \otimes \bar{v}) \right) = -\operatorname{grad} p + \mu \Delta \bar{v}. \quad (2.11.16)$$

Подставим (2.11.14) в (2.11.16):

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{v}'}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{v} \otimes \bar{v} + \bar{v}' \otimes \bar{v} + \bar{v} \otimes \bar{v}' + \bar{v}' \otimes \bar{v}') \right) = \\ = -\operatorname{grad} p - \operatorname{grad} p' + \mu \Delta (\bar{v} + \bar{v}'). \end{aligned} \quad (2.11.17)$$

Применим к уравнению (2.11.17) операцию осреднения (2.11.1) и воспользуемся свойствами (2.11.4)–(2.11.11). В результате (2.11.17) преобразуется в следующее уравнение:

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{v} \otimes \bar{v} + \overline{\bar{v}' \otimes \bar{v}'} \right) = -\operatorname{grad} p + \mu \Delta \bar{v}, \quad (2.11.18)$$

которое с помощью формулы (2.11.15), а также с учетом (2.1.6) примет вид

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\operatorname{grad} \bar{v}) \bar{v} \right) = -\operatorname{grad} \bar{p} + \operatorname{div} \left(\mu \left(\operatorname{grad} \bar{v} + (\operatorname{grad} \bar{v})^T \right) - \rho \overline{\bar{v}' \otimes \bar{v}'} \right). \quad (2.11.19)$$

Тензор $\bar{\bar{T}}_i = -\rho \overline{\bar{v}' \otimes \bar{v}'}$ называют тензором турбулентных напряжений.

Такой же прием, примененный к уравнению конвективного переноса (2.1.25), в котором полагаем $\bar{v} = \bar{v} + \bar{v}'$ и $\theta = \bar{\theta} + \theta'$, приводит к следующему уравнению переноса тепла в турбулентных течениях:

$$\rho c_v \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + (\operatorname{grad} \bar{\theta}) \cdot \bar{v} \right) = \operatorname{div} (\lambda \operatorname{grad} \bar{\theta} + \rho c_v \overline{\bar{v}' \theta'}), \quad (2.11.20)$$

где $\bar{q}_i = \rho c_v \overline{\bar{v}' \theta'}$ – вектор турбулентного теплового потока.

Уравнения баланса импульса и баланса энергии (2.11.19), (2.11.20) являются незамкнутыми, следовательно, этот метод не позволяет получить решение той или иной задачи турбулентного переноса в рамках строгой математической постановки. В отличие от уравнений динамики вязкой жидкости, содержащих тензор вязких напряжений, который легко выражается через тензор скоростей деформаций, уравнения Рейнольдса содержат еще тензор турбулентных напряжений и вектор турбулентного теплового потока, природа и свойства которых целиком определяются характеристиками пульсационного движения. Поэтому для описания турбулентных потоков в рам-

ках метода Рейнольдса неизбежным этапом оказывается моделирование турбулентных напряжений и теплового потока, суть которого сводится к установлению эмпирических или полуэмпирических связей между этими величинами и осредненными характеристиками самого потока, прежде всего характеристиками поля скоростей и температуры. Такие соотношения называются моделями турбулентности.

2.11.3. Замыкание уравнений Рейнольдса. Модели турбулентности

Гипотеза Буссинеска. Большинство моделей турбулентности используют гипотезу Буссинеска, которая основана на концепции вихревой вязкости (1887 г.). Она состоит в том, чтобы определить тензор турбулентных напряжений, подобно (2.1.6), через градиенты от осредненного поля скорости с новыми эмпирическими константами

$$\overline{\overline{T}}_i = 2\mu_t \overline{\overline{D}} - \frac{2}{3} \rho k \overline{\overline{I}}, \quad (2.11.21)$$

где $\overline{\overline{D}} = (\text{grad} \overline{\overline{v}})^s \equiv \frac{1}{2} \left((\text{grad} \overline{\overline{v}}) + (\text{grad} \overline{\overline{v}})^t \right)$; $k = -\frac{1}{2} \overline{\overline{v}' \cdot v'}$ – удельная кинетическая энергия турбулентности; μ_t – коэффициент турбулентной (вихревой) вязкости. Строго говоря, μ_t и k здесь не являются константами, а могут зависеть от места и времени, т. е. быть функциями, которые также необходимо определить.

Само по себе уравнение (2.11.21) не вводит модели турбулентности, а только характеризует структуру такой модели, при этом основной задачей является задание функции μ_t . В отличие от коэффициента молекулярной вязкости μ коэффициент μ_t определяется состоянием турбулентности и не связан со свойствами жидкости. Он может сильно изменяться от точки к точке пространства и в зависимости от типа течения. Так, например, μ_t в зонах циркуляционного течения может на несколько порядков превышать μ . Известно также, что для течения в открытом канале μ_t распределен по параболическому закону по глубине, а для плоской струи он изменяется пропорционально квадратному корню от расстояния до источника.

Иногда при расчетах турбулентных течений μ_t принимается постоянным (как и полагал первоначально Буссинеск). Такое предположение вместе с гипотезой Буссинеска уже является простейшей моделью турбулентности. Подвергаясь справедливой критике как физически необоснованное, это предположение, однако, довольно широко применяется, поскольку позволяет получать вполне приемлемые результаты в инженерной практике. Однако столь грубое описание турбулентности допустимо в тех случаях, когда вели-

чина турбулентного переноса не имеет существенного значения или использование более сложных конструкций представляется неоправданным. В более реалистичных моделях турбулентности наряду с гипотезой Буссинеска используются либо алгебраические соотношения, связывающие коэффициент турбулентной вязкости с характеристиками осредненного течения (алгебраические модели), либо строятся дополнительные уравнения переноса для осредненных пульсационных характеристик, через которые выражается μ_t .

Теория длины пути смешения Прандтля. Это одна из самых первых моделей турбулентности, относящаяся к классу алгебраических. Рассмотрим элементарную площадку $d\sigma$, параллельную линии тока осредненного движения, находящуюся на расстоянии l' (рис. 2.36). Через эту площадку проходят линии тока пульсационного течения. В их направлении переносится количество движения смежных слоев, причем скоростью переноса служит поперечная пульсационная скорость. Касательное напряжение турбулентного трения определим как среднюю во времени проекцию на ось отнесенного к единице площади секундного переноса количества осредненного турбулентного движения через площадку. Тогда

$$\tau_t d\sigma = \rho \nu' \left[\bar{u} \left(y + \frac{l'}{2} \right) - \bar{u} \left(y - \frac{l'}{2} \right) \right] d\sigma.$$

Линеаризуя по малому приращению $l'/2$ и усредняя, получаем

$$\tau_t = \rho \overline{\nu' l'} \frac{d\bar{u}}{dy}. \quad (2.11.22)$$

Величину $\overline{\nu' l'} = \mu_t$ можно трактовать как динамический коэффициент турбулентной «вязкости», а его отношение к плотности $\nu_t = \overline{\nu' l'}$ – как кинематический коэффициент турбулентной вязкости.

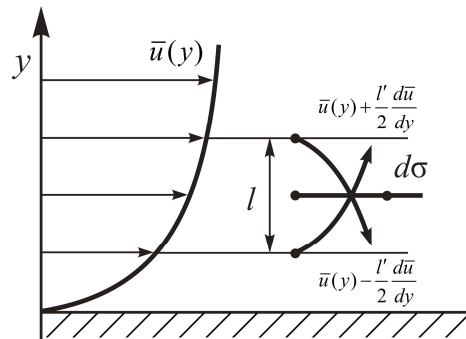


Рис. 2.36. Схема модели пути смешения по Прандтлю

Л. Прандтль придал величине l' физический смысл, аналогичный длине свободного пробега молекулы в теории молекулярного обмена, а расстояние от слоя, откуда объем вышел, до слоя, где произошло смешение, назвал путем смешения, отчего теория называется теорией пути смешения.

Как предположил Л. Прандтль, пульсация скорости v' должна быть пропорциональна разности скоростей между слоями:

$$v' = l' \frac{d\bar{u}}{dy}.$$

Подставляя это выражение в (2.11.22), проведя осреднение и включая коэффициент пропорциональности в новую величину l , получим формулу Прандтля

$$\tau_t = \rho l^2 \left| \frac{d\bar{u}}{dy} \right| \frac{d\bar{u}}{dy} = \mu_t \frac{d\bar{u}}{dy}, \quad (2.11.23)$$

где

$$\mu_t = \rho l^2 \left| \frac{d\bar{u}}{dy} \right|. \quad (2.11.24)$$

Входящую в (2.11.23) величину l , только пропорциональную ранее введенной величине l' – пути смешения, называют также путем смешения, считая коэффициент пропорциональности входящим в ее определение. В настоящее время неизвестной величине l уже не придают физический смысл «пути смешения». Считается, что эта величина является масштабом турбулентности. Модель пути смешения позволила достаточно точно рассчитать турбулентные течения при использовании эмпирически подобранных зависимостей для пути смешения.

В полностью турбулентном течении вблизи стенки для длины пути смешения Т. Карманом предложена зависимость

$$l = Ky, \quad (2.11.25)$$

где y – координата, нормальная к стенке; K – эмпирическая постоянная (постоянная Кармана), равная примерно 0,4.

Подставив (2.11.25) в (2.11.23), получим

$$\frac{\tau_t}{\rho} = K^2 y^2 \left| \frac{d\bar{u}}{dy} \right| \frac{d\bar{u}}{dy}. \quad (2.11.26)$$

Введем следующие масштабы длины и скорости:

$$u_f = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}, \quad y_f = \frac{\mu}{\rho u_f} = \frac{\mu}{u_f \sqrt{\rho \tau_w}}, \quad (2.11.27)$$

где τ_w – касательное напряжение на стенке.

Для полностью турбулентного ($\mu \ll \mu_t$) пристеночного слоя постоянного напряжения ($\tau_t = \tau_w$), учитывая (2.11.26), (2.11.27), можем записать

$$K^2 y^2 \left| \frac{d\bar{u}}{dy} \right| \frac{d\bar{u}}{dy} = \frac{\tau_w}{\rho} = u_f^2.$$

Простыми преобразованиями отсюда получаем

$$\frac{d\bar{u}}{dy} = \frac{u_f}{Ky} \quad \text{или} \quad \frac{du^+}{dy^+} = \frac{1}{Ky^+}, \quad (2.11.28)$$

$u^+ = \bar{u}/u_f$, $y^+ = y/y_f$ – безразмерные скорость и координата.

Интегрирование (2.11.28) дает

$$u^+ = \frac{1}{K} \ln y^+ + B, \quad (2.11.29)$$

где B – константа интегрирования.

Зависимость (2.11.29) называется логарифмическим законом стенки, согласно которому в турбулентном слое вблизи стенки продольная скорость имеет логарифмический профиль. Многочисленные экспериментальные проверки логарифмического закона подтверждают его справедливость в пристеночном турбулентном слое. Вычисления постоянных K и B по замеренным профилям скорости дают следующие вероятные значения: $K = 0,4 (\pm 0,015)$, $B = 5 (\pm 0,25)$.

Однако в области, непосредственно примыкающей к стенке ближе характерного размера самых малых вихрей, турбулентность подавляется, $\mu_t \rightarrow 0$ и профиль скорости определяется молекулярной вязкостью, т. е. для слоя постоянного напряжения близок к линейному. Эта область называется *вязкий подслой*. Между вязким подслоем и логарифмической зоной существует переходная область. Все эти три области могут быть описаны единообразно путем введения в формулу (2.11.24) демпфирующего множителя, предложенного Ван-Дристом в 1956 г.:

$$v_t = \frac{\mu_t}{\rho} = D l^2 \left| \frac{d\bar{u}}{dy} \right|. \quad (2.11.30)$$

Демпфирующий множитель D должен удовлетворять следующим условиям (теория демпфирующих множителей Лойцянского):

1) обеспечивать правильное (соответствующее эксперименту) поведение турбулентной вязкости вблизи стенки $\frac{v_t}{v} \Big|_{y \rightarrow 0} = \alpha (y^+)^4$ ($\alpha \sim 1$);

2) расти при удалении от стенки, асимптотически приближаясь к единице, и практически обращаться в единицу при $y^+ > 30-60$;

3) удовлетворять соотношению

$$B = \lim \left(\int_0^{y^+} \frac{\partial u}{\partial y} (D(y^+)) dy^+ - \frac{1}{K} \ln(y^+) \right),$$

где B и K – константы в логарифмическом законе (2.11.29).

Ван-Дрист показал, что всем этим требованиям удовлетворяет демпфирующий множитель вида

$$D = \left(1 - \exp \left(- \frac{y^+ u_f}{Av} \right) \right)^2, \quad A = 26. \quad (2.11.31)$$

Для внешней части турбулентного пограничного слоя Карман предложил следующую зависимость длины пути смешения:

$$l = K \left(\frac{d\bar{u}}{dy} \right) / \left(\frac{d^2\bar{u}}{dy^2} \right). \quad (2.11.32)$$

Эта формула также приводит к логарифмическому закону стенки, а постоянная K та же, что и в (2.11.25), т. е. равна 0,4.

В случае применения модели Прандтля для свободных сдвиговых течений, таких как затопленная струя, слой смешения, дальний след, для длины пути смешения вместо (2.11.25) используют соотношение

$$l = \alpha \delta(x),$$

где $\delta(x)$ – характерная локальная толщина сдвиговой зоны поперек потока в зависимости от продольной координаты. Эмпирическая константа α в зависимости от типа течения принимает следующие значения: дальний след – 0,180; слой смешения – 0,071; плоская струя – 0,098; круглая струя – 0,080.

Для двумерного случая на основе теории Прандтля турбулентная вязкость вместо (2.11.24) определяется как

$$\mu_t = \rho l^2 \left[\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/2}.$$

Для описания турбулентного теплопереноса необходимо промоделировать турбулентный тепловой поток \vec{q}_t в уравнении (2.11.20). Аналогом гипотезы Буссинеска (2.11.21) в данном случае будет определение турбулентного теплового потока $\rho c_p \overline{v'\theta'}$, подобно (2.1.11), через градиент от осредненного поля температуры с новым эмпирическим коэффициентом

$$\vec{q}_t = -\lambda_t \text{grad}\theta, \quad (2.11.33)$$

где λ_t – коэффициент турбулентной теплопроводности. Для этого коэффициента, вводя аналог длины пути смешения в термических процессах, можно повторить те же рассуждения и выкладки, что и для турбулентной вязкости в модели Прандтля, в результате по аналогии с (2.11.24) получаем

$$\lambda_t = \rho c_p l_g^2 \left| \frac{d\bar{u}}{dy} \right|, \quad (2.11.34)$$

где c_p – удельная теплоемкость среды, l_g – термическая длина пути смешения. Это выражение с учетом (2.11.24) можно записать в виде

$$a_t = \frac{\lambda_t}{\rho c_p} = l_g^2 \left| \frac{d\bar{u}}{dy} \right| = \left(\frac{l_g}{l} \right)^2 v_t = \left(\frac{l_g}{l} \right)^2 \frac{\mu_t}{\rho}. \quad (2.11.35)$$

Как следует из (2.11.35), квадрат отношения длин смешения можно трактовать как турбулентное число Прандтля $\text{Pr}_t = v_t/a_t = (l/l_g)^2$, так что (2.11.35) можно переписать:

$$a_t = \frac{1}{\text{Pr}_t} v_t \quad \text{или} \quad \lambda_t = \frac{c_p}{\text{Pr}_t} \mu_t. \quad (2.11.36)$$

Поскольку турбулентное число Прандтля, согласно опытным данным, как правило, близко к единице (равенство длин пути смешения), с помощью (2.11.36) любая модель турбулентности, позволяющая рассчитать турбулентную вязкость, дает возможность найти и турбулентную теплопроводность.

Отметим, что для алгебраических моделей турбулентности, к числу которых относится и модель Прандтля, характерны некоторые недостатки. Такие модели основаны на закономерностях, характерных для тех или иных канонических течений (пограничный слой, струя, слой смешения), при этом

используются нелокальные характеристики этих течений, такие как толщина приграничного слоя, трение на стенке и т. п. В результате они весьма не универсальны и трудно имплементируемы в современные компьютерные коды. Указанные недостатки в значительной мере преодолеваются в так называемых дифференциальных моделях турбулентности, в которых строятся дополнительные дифференциальные уравнения переноса для осредненных пульсационных характеристик, через которые затем выражается коэффициент турбулентной вязкости μ_t в соотношении Буссинеска (2.11.21).

2.11.4. k - ε -модель турбулентности

Существует множество дифференциальных моделей турбулентности и k - ε -модель является одной из них. Она относится к классу моделей с двумя уравнениями. Это значит, что в ней строятся два дополнительных дифференциальных уравнения переноса для осредненных пульсационных характеристик, через которые затем выражается коэффициент турбулентной вязкости. В 70–80-х гг. появилось целое семейство k - ε -моделей. В результате достигнут существенный прогресс в расчетах различных типов течений, в том числе сдвиговых турбулентных. Это послужило основанием для включения моделей типа k - ε во все вычислительные программы, а также в коммерческие пакеты, предназначенные для решения широкого круга задач прикладной аэродинамики и теплообмена (PHOENICS, FIRE, FLUENT, FLOW3D, STAR CD и ряд других).

Не так давно k - ε -модель являлась наиболее популярной моделью турбулентности. Сформировалось понятие так называемой стандартной k - ε -модели, построенной в предположении о реализации полностью развитых турбулентных течений при больших турбулентных числах Рейнольдса.

Для определения турбулентной вязкости в этой модели рассматриваются два скалярных параметра: удельная кинетическая энергия турбулентности

$$k = \frac{1}{2} \overline{\vec{v}' \cdot \vec{v}'} \quad (2.11.37)$$

и скорость вязкой диссипации энергии турбулентности

$$\varepsilon = 2\nu \operatorname{tr} \left(\overline{\operatorname{grad} \vec{v}' (\operatorname{grad} \vec{v}')^T} \right). \quad (2.11.38)$$

Уравнение для кинетической энергии турбулентности можно найти, если из (2.11.17) вычесть (2.11.19), умножить полученное уравнение скалярно на \vec{v}'/ρ и осреднить последнее по Рейнольдсу. После некоторых преобразований имеем

$$\frac{\partial k}{\partial t} + (\text{grad} k) \bar{\bar{v}} = \overline{\bar{v}' \otimes \bar{v}'} \text{grad} \bar{\bar{v}} + \text{div} \left(\mathbf{v} \text{grad} k - \overline{\bar{v}' \left(\frac{p'}{\rho} + \frac{1}{2} \bar{v}' \cdot \bar{v}' \right)} \right) - \quad (2.11.39)$$

$$- 2\nu \text{tr} \left(\text{grad} \bar{\bar{v}}' (\text{grad} \bar{\bar{v}}')^T \right).$$

По форме это уравнение является стандартным уравнением переноса, в котором левая часть описывает конвективный перенос субстанции (здесь это энергия турбулентности), в правой части первый член описывает генерацию турбулентности, второй член – диффузионный перенос кинетической энергии турбулентности двух видов: молекулярный (первое слагаемое в скобках), и турбулентный (второе слагаемое), наконец, последний член описывает диссипацию этой энергии. Здесь первый из перечисленных членов содержит тензор турбулентных напряжений (2.11.19), который, по гипотезе Буссинеска, выражается через осредненные характеристики потока согласно (2.11.21). Последний член представляет собой не что иное, как скорость вязкой диссипации энергии турбулентности (2.11.38). Неопределенным остается только член, отвечающий за турбулентную диффузию, и для замыкания уравнения необходимо записать его через осредненные характеристики. Для замыкания его используется гипотеза градиентной диффузии, согласно которой турбулентный диффузионный перенос кинетической энергии турбулентности выражается по аналогии с молекулярным переносом через ее градиент

$$\bar{v}' \left(\frac{p'}{\rho} + \frac{1}{2} \bar{v}' \cdot \bar{v}' \right) = \frac{\nu_t}{\sigma_k} \text{grad} k, \quad (2.11.40)$$

где $\nu_t = \mu_t/\rho$ – турбулентная кинематическая вязкость; σ_k – безразмерная эмпирическая константа. С учетом изложенного уравнение (2.11.39) можно переписать как

$$\frac{\partial k}{\partial t} + (\text{grad} k) \bar{\bar{v}} = P_k + \text{div} \left(\left(\mathbf{v} + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \text{grad} k \right) - \varepsilon, \quad (2.11.41)$$

где

$$P_k = -\bar{\bar{T}}_{tr} \text{grad} \bar{\bar{v}}. \quad (2.11.42)$$

Здесь тензор $\bar{\bar{T}}_{tr}$ – нормированный на плотность тензор турбулентных напряжений, который, согласно гипотезе Буссинеска (2.11.21), выражается как

$$\bar{\bar{T}}_{tr} = \frac{1}{\rho} \bar{\bar{T}}_t = -\overline{\bar{v}' \otimes \bar{v}'} = \nu_t \left(\text{grad} \bar{\bar{v}} + (\text{grad} \bar{\bar{v}})^T \right) - \frac{2}{3} k \bar{\bar{I}}. \quad (2.11.43)$$

Для связи коэффициента турбулентной кинематической вязкости с осредненными параметрами модели используется соотношение, выражающее гипотезу Колмогорова – Прандтля

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (2.11.44)$$

где C_μ – безразмерная эмпирическая константа.

Уравнения для скорости диссипации можно получить двумя способами. Во-первых, вывести при помощи процедуры осреднения по Рейнольдсу аналогично тому, как описано выше для k . Это уравнение будет содержать различные корреляции, которые невозможно определить через осредненные параметры потока. Естественно, в этом случае потребуются некоторые дополнительные предположения для моделирования членов полученного уравнения. Во-вторых, можно записать стандартную форму уравнения переноса для ε и предположить, что генерация и диссипация ε пропорциональны аналогичным величинам для k с эмпирическими коэффициентами пропорциональности. Так или иначе, оба пути приводят к уравнению

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + (\text{grad} \varepsilon) \bar{v} = C_1 \frac{\varepsilon}{k} P_k + \text{div} \left(\left(v + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \text{grad} \varepsilon \right) - C_2 \frac{\varepsilon^2}{k}, \quad (2.11.45)$$

в котором появились еще две эмпирические константы – C_1, C_2 .

Уравнения (2.11.41)–(2.11.45), которые надо решать совместно с осредненным по Рейнольдсу уравнением Навье – Стокса (2.11.19), составляют так называемую стандартную (высокорейнольдсовую) модель турбулентности (предложена Д. Сполдингом и Б. Лаундером в 1972 г.). На основе калибровки констант для этой модели, выполненной по экспериментальным данным для струйных течений, приняты следующие их значения:

$$\sigma_k = 1, \quad C_\mu = 0,09, \quad \sigma_\varepsilon = 1,3, \quad C_1 = 1,44, \quad C_2 = 1,92.$$

Стандартная модель (как и другие высокорейнольдсовые модели) дает хорошие результаты для струйных и других свободных течений, однако плохо работает вблизи стенок, поскольку здесь локальное турбулентное число Рейнольдса $Re_t = k^2/(\nu\varepsilon)$ мало. Для расчета пристенных течений используются либо низкорейнольдсовые модели, либо версии k – ε -моделей, в которые введены пристенные функции. В таких моделях в уравнения вводятся дополнительные функции, отвечающие за влияние стенок на турбулентность. В общем случае большинство низкорейнольдсовых k – ε -моделей могут быть записаны следующим образом:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + (\text{grad} k) \bar{v} = P_k + \text{div} \left(\left(v + \frac{v_t}{\sigma_k} \right) \text{grad} k \right) - \varepsilon - f_k,$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + (\text{grad} \varepsilon) \bar{v} = C_1 \frac{\varepsilon}{k} P_k + \text{div} \left(\left(v + \frac{v_t}{\sigma_k} \right) \text{grad} \varepsilon \right) - C_2 f_2 \frac{\varepsilon^2}{k} - f_\varepsilon, \quad v_t = C_\mu f_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}.$$

Здесь введены четыре пристенные функции $-f_k, f_2, f_\varepsilon$ и f_μ , зависящие от k и ε . В популярной низкорейнольдсовой k - ε -модели Лаундера – Шармы эти функции задаются в форме

$$f_\mu = \exp \left(- \frac{3,4}{(1 + 0,02 \text{Re}_T)^2} \right), \quad \text{Re}_T = \frac{k^2}{\nu \varepsilon},$$

$$f_2 = 1 - 0,3 \exp(-\text{Re}_T^2), \quad f_k = 2\nu (\text{grad} \sqrt{k}) \cdot (\text{grad} \sqrt{k}),$$

$$f_\varepsilon = -C_3 \nu v_t \text{grad}(\text{grad} \bar{v}) \cdots \text{grad}(\text{grad} \bar{v}).$$

Символ \cdots здесь означает скалярное произведение (свертку) тензоров третьего ранга. Дополнительная эмпирическая константа $C_3 = 2$, а остальные константы остаются такими же, как и в стандартной модели.

К достоинствам k - ε -моделей относится высокая точность при расчете свободных сдвиговых течений. Они достаточно универсальны и не требуют задания каких-либо дополнительных параметров. Кроме того, по этим моделям накоплен огромный опыт расчетов, они хорошо исследованы и есть в большинстве коммерческих программ. Однако трудности, связанные с их применением в пристенных областях, заставляют исследователей изобретать все новые и новые модели, количество которых в настоящее время исчисляется уже десятками.

Однако до настоящего времени никаких предпочтений среди моделей, базирующихся на концепции осреднения по Рейнольдсу, по существу, не было сделано, поскольку не существует «универсальной» модели турбулентности. Нет никаких гарантий, что модели в рамках приближения Рейнольдса остаются корректными за пределами калибровочной базы данных. К тому же указанный подход был предложен его основоположником для интерпретации полностью развитых турбулентных течений, а в дальнейшем лишь скорректирован на случаи переходных процессов. Это свидетельствует о том, что он, так же как и моделирование турбулентности в целом, обладает определенными границами применимости.

В связи с быстрым развитием мощностей современной вычислительной техники появляется возможность получать решения полных нестационарных трехмерных уравнений Навье – Стокса и уравнения неразрывности, в которых в области сверхкритических значений числа Рейнольдса присутствуют турбулентные вихри и хаотическое поведение. Этот подход называется прямым численным моделированием или DNS (Direct Numerical Simulation). Ценность такого моделирования очевидна: в принципе, численно аккуратные решения точных уравнений движения являлась бы надлежащим решением проблемы турбулентности. С практической точки зрения статистика, рассчитанная из результатов DNS, может быть использована для тестирования предлагаемых подходов замыкания в инженерных моделях. На наиболее фундаментальном уровне DNS может быть использовано, чтобы добиться понимания структуры турбулентности и процессов турбулентного переноса, которые могут быть ценными в развитии методов управления турбулентностью (например, снижения сопротивления) или методов предсказания. DNS также может рассматриваться как дополнительный источник экспериментальных данных, принимая во внимание ограниченность измерительной техники. Это особенно полезно при получении информации о трудноизмеряемых характеристиках, подобных пульсациям давления. Однако метод также имеет свои ограничения, поскольку для разрешения мелкомасштабных вихрей требуется огромное количество сеточных узлов и временных шагов. Даже в случае применения таких методов необходим тщательный анализ вычислительной точности и оценка вычислительных ресурсов. Этот метод быстро прогрессирует, однако достижимые расчетные числа Рейнольдса пока еще остаются слишком низкими, чтобы интересовать инженеров. Поэтому возникают также гибридные методы, например метод крупных вихрей LES (Large Eddy Simulation), где крупные вихри рассчитываются, а мельчайшие вихри подсеточного масштаба моделируются.

Литература

1. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. М.: Мир, 1975.
2. Седов Л. И. Методы подобия и размерности в механике. М.: Наука, 1965.
3. Кутателадзе С. С. Основы теории теплообмена. М.: Атомиздат, 1979.
4. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1970.
5. Исаченко В. П., Осипова В. А., Сукомел А. С. Теплопередача. М.: Энергия, 1975.
6. Лыков А. В. Теплообмен: Справочник. М.: Энергия, 1975.
7. Lukov A. V., Perelman T. L., Rvkin V. B. On determination of the heat transfer coefficient in simultamous conductive and convective heat transfer // Third Int. Heat Transfer conf. Chicago, 1966. Vol. II. Pp. 12–24.

8. Лыков А. В., Перельман Т. Л. О нестационарном теплообмене между телом и обтекающим его потоком жидкости // Тепло- и массообмен с окружающей газовой средой. Минск: Наука и техника, 1965. С. 3–24.
9. Алифанов О. М. Обратные задачи теплообмена. М.: Машиностроение, 1988.
10. Перельман Т. Л., Левитин Р. С., Гдалевич Л. Б., Хусид Б. М. Сопряженный нестационарный теплообмен пластины с ламинарным потоком сжимаемой жидкости // Тепло- и массоперенос. Минск: ИТМО АН БССР, 1972. Т. 8. С. 286–295.
11. Алексашенко В. А. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Минск, 1965.
12. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
13. Петухов Б. Н. Теплообмен и сопротивление при ламинарном течении жидкости в трубах. М.: Энергия, 1967.

Глава 3

ОСНОВЫ ТЕОРИИ ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Тепловое излучение, являющееся по своей природе процессом распространения электромагнитных волн, характеризуется спектром частот, который соответствует энергетическому уровню структурных частиц вещества. Согласно электромагнитной теории, излучение переносится со скоростью света c . По квантовой теории энергия излучения переносится фотонами. Энергия, переносимая каждым фотоном, равна $h\nu$, где $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка, ν – частота излучения. Частота излучения ν , длина волны излучения λ и скорость распространения волны (или фотона) c связаны соотношением $c = \lambda\nu$.

3.1. Характеристики поля излучения

Под *интенсивностью* (или яркостью) излучения I_ν в точке Р в направлении \vec{L} следует понимать количество световой энергии dE_ν , которое падает на единичную площадку, перпендикулярную к направлению \vec{L} , в единичном телесном угле за единицу времени (рис. 3.1).

Если в частотном интервале $(\nu, \nu + d\nu)$ количество лучистой энергии, падающей на площадку dS в телесном угле $d\Omega$ за время dt равно dE_ν , то

$$I_\nu = \frac{dE_\nu}{dS \cos\theta d\Omega d\nu dt}. \quad (3.1)$$

Так как направление \vec{L} выражается единичным вектором $\vec{\Omega}$, то I_ν является функцией векторов \vec{r} , $\vec{\Omega}$ и скалярной величины ν , т. е. $I_\nu = I_\nu(\vec{r}, \vec{\Omega}, \nu)$ [Дж/(м²·стер)] (стерадиан – телесный угол с вершиной в центре сферы, который вырезает площадь на поверхности сферы, равную площади квадрата со стороной, равной радиусу).

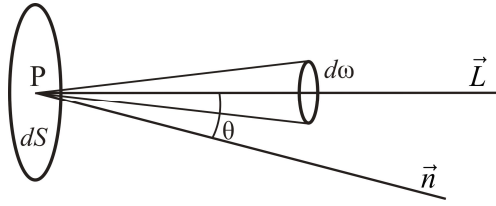


Рис. 3.1 [1]

Интегральная интенсивность излучения равна

$$I = \int_0^{\infty} I_{\nu} d\nu = \int_0^{\infty} I_{\lambda} d\lambda, \quad [I] = \text{Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{стер}).$$

Если распределение интенсивности излучения I в данной точке равновероятно по всем направлениям, то такое излучение называют диффузным. Для диффузно излучающей элементарной площадки по известной интенсивности I можно найти плотность потока излучения

$$q_{R,2\pi} = \int_{2\pi} I \cos\theta d\Omega = I \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} \cos\theta \sin\theta d\theta = \pi I, \quad [q_{R,2\pi}] = \text{Вт}/\text{м}^2, \quad (3.2)$$

где $d\Omega = \sin\theta d\theta d\psi$, ψ – азимутальный угол. Таким образом, излучение в полусферическое пространство в π раз больше излучения по нормали к поверхности в единичном телесном угле.

Объемная плотность излучения $\rho_{R,\nu}$ определяется количеством световой энергии в единице объема, приходящимся на единичный частотный интервал. Элементарный объем, который занимает излучение за интервал времени $(t, t + dt)$, равен $dV = c dt dS$. Тогда

$$\int_{(4\pi)} dE_{\nu} = \int_{(4\pi)} I_{\nu}(\vec{r}, \vec{L}) dS d\Omega d\nu dt = \rho_{R,\nu} dV d\nu.$$

Отсюда получаем связь между интенсивностью излучения и его плотностью:

$$\rho_{R,\nu} = \frac{1}{c} \int_{(4\pi)} I_{\nu}(\vec{r}, \vec{L}) d\Omega. \quad (3.3)$$

Если яркость излучения равномерна по всем направлениям, т. е. $I_{\nu}(\vec{r}, \vec{L}) = I_{\nu}(\vec{r})$, то

$$\rho_{R,\nu} = \frac{4\pi}{c} I_{\nu}(\vec{r}),$$

а интегральная объемная плотность излучения $\rho_R = 4\pi I/c$ [Дж/м³].

Объемная плотность излучения, испускаемого черным телом, по *закону Планка* равна (см. п. 2.25, Т. 1)

$$\rho_{R0,v} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (3.4)$$

интенсивность планковского излучения

$$I_{0,v} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (3.5)$$

(индекс «0» относится к черному телу).

Для интенсивности монохроматического излучения, отнесенной к данной длине волны λ , имеем

$$I_{0,\lambda} = \frac{\nu}{\lambda} I_{0,v} = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \left[\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad [I_{0,\lambda}] = \frac{\text{Дж}}{\text{м} \cdot \text{с} \cdot \text{стер}}. \quad (3.6)$$

Интегрируя формулу (3.6) по длине волны от 0 до ∞ , получаем [1] $I_0 = \sigma T^4/\pi$ или

$$\pi I_0 = \sigma T^4 = q_0 \quad (3.7)$$

– *закон Стефана – Больцмана*, величина $\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}^4}$ – постоянная Стефана – Больцмана (см. задачи 22–24, 30, 33, 34, 37).

При распространении излучения в среде количество световой энергии вдоль луча от точки к точке может изменяться за счет процессов поглощения, рассеяния и испускания излучения элементарными объемами. Указанные явления имеют место при переносе излучения как в газовых средах, содержащих взвешенные в них частицы пыли, сажи, капельки жидкости и т. п., так и в твердых или жидких полупрозрачных телах и реализуются в природных условиях, а также в различных областях техники.

Полагая, что процесс ослабления (поглощения и рассеяния) излучения происходит линейно относительно интенсивности, dI_v можно записать в виде [2]

$$dI_v = -\alpha_v dI_v, \quad (3.8)$$

где $\alpha_v dl$ – доля излучения, ослабленного на длине dl . Коэффициент α_v представляет собой сумму коэффициентов *поглощения* χ_v и *рассеяния* σ_v :

$$\alpha_v = \chi_v + \sigma_v.$$

Величина $\int \alpha_v dl$ – безразмерная оптическая толщина, поэтому коэффициенты χ_v и σ_v имеют размерность $1/\text{м}$.

В общем случае рассеянное излучение анизотропно. Для учета зависимости рассеянного излучения от направления обозначим вероятность того, что излучение рассеивается под некоторым углом γ внутри телесного угла $d\Omega$ через $p(\gamma)d\Omega/(4\pi)$. Функция $p(\gamma)$ – *индикатриса рассеяния* излучения [3].

При $p(\gamma) = 1$ индикатриса рассеяния называется сферической и рассеяние по всем направлениям равновероятно. Если рассеяние излучения происходит на частицах, размеры которых малы по сравнению с длиной волны излучения, индикатриса рассеяния имеет вид

$$p(\gamma) = \frac{3}{4}(1 + \cos^2 \gamma)$$

и называется рэлеевской. При размерах частиц, сравнимых с длиной волны излучения, индикатриса $p(\gamma)$ определяется по теории Ми и зависит от отношения радиуса частицы к длине волны излучения, а также от показателя преломления частицы. С увеличением размера частиц индикатриса рассеяния становится все более вытянутой вперед [3].

Рассеяние существенно влияет на процессы переноса энергии излучения в дисперсных средах, таких как запыленные газовые потоки, туманы, высокопористые материалы и др.

3.2. Уравнение переноса энергии излучения в поглощающих и рассеивающих средах

Уравнение переноса энергии излучения является математической формулировкой закона сохранения лучистой энергии при взаимодействии излучения с веществом. В стационарном случае оно имеет вид

$$\begin{aligned} & \frac{dI_v(\vec{r}, \theta, \varphi)}{dl} + (\chi_v + \sigma_v)I_v = \\ & = \frac{\sigma_v}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^\pi p(\theta, \varphi; \theta', \varphi') I_v(\vec{r}, \theta', \varphi') \sin \theta' d\theta' + \chi_v I_{0v}(T), \end{aligned} \quad (3.9)$$

где производная в левой части уравнения является производной по направлению, а последний член в правой части уравнения представляет собой собственное излучение среды E_v^0 . При этом предполагается, что вещество и поле излучения находятся в термодинамическом равновесии, т. е. $E_v^0 = \chi_v I_{0v}(T)$.

В плоскопараллельном случае и при наличии азимутальной симметрии уравнение (3.9) принимает вид

$$\mu \frac{dI_v}{dz} + (\chi_v + \sigma_v) I_v = \frac{1}{2} \sigma_v \int_{-1}^1 I_v(z, \mu') p(\mu, \mu') d\mu' + \chi_v I_{0v}, \quad (3.10)$$

где z – пространственная координата (все величины не зависят от x и y), $\mu = \cos\theta$, θ – угол между осью \vec{z} и вектором $\vec{\Omega}$.

Равенства (3.9) и (3.10) являются сложными интегро-дифференциальными уравнениями. Различные приближенные методы решения уравнений переноса излучения изложены в монографиях [2, 3].

Приближение оптически толстого слоя. Рассмотрим уравнение (3.10) в случае отсутствия рассеяния ($\sigma_v = 0$):

$$\mu \frac{dI_v}{dz} = -\chi_v I_v + \chi_v I_{0v} = \chi_v (I_{0v} - I). \quad (3.11)$$

Сделаем замену переменной:

$$x = \int_0^z \chi_v dz'.$$

Безразмерную величину x называют оптической координатой.

Запишем решение уравнения (3.11) с помощью метода вариации произвольной постоянной в виде [4]

$$I_v(x, \mu) = \exp\left(-\frac{x}{\mu}\right) \int_{-\infty}^x \frac{1}{\mu} I_{0v} \exp\left(\frac{x'}{\mu}\right) dx'. \quad (3.12)$$

Нижний предел интегрирования определяется граничными условиями. Так как на χ_v влияет не только v , но и T , то функция $I_{0v}(T)$ зависит от x' и должна находиться под знаком интеграла. При $\mu > 0$ направления излучения выйдут из нижнего полупространства. Будем считать, что при $x \rightarrow -\infty$ интенсивность $I_v = 0$, т. е. на бесконечности нет притока энергии. Тогда

$$I_v(x, \mu) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\mu} I_{0v}(T) \exp\left(-\frac{x-x'}{\mu}\right) dx', \quad \mu > 0. \quad (3.13)$$

Полагаем также, что в случае $\mu < 0$ при $x \rightarrow +\infty$ нет притока энергии, т. е.

$$I_\nu(x, \mu) = \int_{+\infty}^x \frac{1}{\mu} I_{0\nu}(T) \exp\left(-\frac{x'-x}{\mu}\right) dx', \quad \mu < 0. \quad (3.14)$$

Определим плотность потока энергии теплового излучения $\vec{q}_{R,\nu}$ с частотой ν в единицу времени через единичную площадку, перпендикулярную оси z , при всех $\vec{\Omega}$:

$$\vec{q}_{R,\nu} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 \mu I_\nu d\mu = 2\pi \int_{-1}^1 \mu I_\nu d\mu. \quad (3.15)$$

После подстановки выражений (3.13) и (3.14) в (3.15) имеем

$$\vec{q}_{R,\nu} = 2\pi \int_0^1 d\mu \left\{ \int_{-\infty}^x I_{0\nu}(T) \exp\left(-\frac{x-x'}{\mu}\right) dx' - \int_x^{\infty} I_{0\nu}(T) \exp\left(-\frac{x'-x}{\mu}\right) dx' \right\}. \quad (3.16)$$

Разложим $I_{0\nu}(T)$ в степенной ряд около x , считая, что термодинамические величины мало меняются на среднем свободном пробеге излучения:

$$[I_{0\nu}(T)]_{x'} = [I_{0\nu}(T)]_x + (x'-x) \frac{dI_{0\nu}}{dx} + \frac{(x'-x)^2}{2!} \frac{d^2 I_{0\nu}}{dx^2} + \frac{(x'-x)^3}{3!} \frac{d^3 I_{0\nu}}{dx^3} + \dots$$

Подставим это разложение в (3.16) (интегралы по η легко вычисляются):

$$\begin{aligned} \vec{q}_{R,\nu} &= -4\pi \left\{ \frac{dI_{0\nu}}{dx} \int_0^1 d\mu \int_0^\infty \eta \exp\left(-\frac{\eta}{\mu}\right) d\eta + \frac{1}{3!} \frac{d^3 I_{0\nu}}{dx^3} \int_0^1 d\mu \int_0^\infty \eta^3 \exp\left(-\frac{\eta}{\mu}\right) d\eta + \dots \right\} = \\ &= -4\pi \left\{ \frac{1}{3} \frac{dI_{0\nu}}{dx} + \frac{1}{5} \frac{d^3 I_{0\nu}}{dx^3} + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Пусть $l_R = (1/\chi_\nu)_{\text{ср}}$ – средний свободный пробег фотона. Тогда для оптической толщины слоя можно записать

$$x = \frac{L}{l_R}.$$

Таким образом, оптическая толщина x представляет собой отношение характерного размера среды к средней длине свободного пробега фотона. Как известно, в кинетической теории газов используется число Кнудсена,

которое представляет собой отношение средней длины свободного пробега молекул к характерному размеру системы (см. п. 3.4, Т. 1). Следовательно, величину x можно рассматривать как обратное фотонное число Кнудсена [5]. Поэтому, как и в кинетической теории газов, можно рассматривать различные режимы переноса энергии излучения.

Рассмотрим случай $x \gg 1$. Тогда вторым членом в (3.17) можно пренебречь и, возвращаясь к пространственным координатам, записать

$$\vec{q}_{R,v} = -\frac{4\pi}{3\chi_v} \nabla I_{0v}(T).$$

Плотность общего потока излучения \vec{q}_R равна интегралу от $\vec{q}_{R,v}$ по всем частотам:

$$\vec{q}_R = -\frac{1}{3} \int_0^\infty \frac{1}{\chi_v} \nabla [4\pi I_{0v}(T)] dv = -\frac{1}{3} \left\{ \int_0^\infty \frac{1}{\chi_v} \frac{d}{dT} [4\pi I_{0v}] dv \right\} \nabla T. \quad (3.18)$$

Упростим (3.18) с помощью приближения Росселанда. Для этого определим средний свободный пробег l_R по формуле Росселанда

$$l_R = \frac{\int_0^\infty \frac{1}{\chi_v} \frac{d}{dT} \left[4\pi \frac{I_{0v}}{c} \right] dv}{\frac{d}{dT} \int_0^\infty 4\pi \frac{I_{0v}}{c} dv}, \quad (3.19)$$

где интеграл в знаменателе есть объемная плотность энергии излучения черного тела (см. п. 2.25, Т. 1):

$$\int_0^\infty 4\pi \frac{I_{0v}(T)}{c} dv = \frac{8\pi^5 k^4}{15c^3 h^3} T^4 = aT^4. \quad (3.20)$$

Тогда на основании (3.18)–(3.20) имеем

$$\vec{q}_R = -\frac{cl_R}{3} \frac{d(aT^4)}{dT} \nabla T = -\frac{16}{3} l_R \sigma T^3 \nabla T, \quad (3.21)$$

так как $a = 4\sigma/c$.

Таким образом,

$$\vec{q}_R = -\lambda_R \nabla T, \quad \lambda_R = \frac{16}{3} l_R \sigma T^3, \quad (3.22)$$

где λ_R – коэффициент лучистой теплопроводности, а тепловой поток, как и в законе Фурье, пропорционален градиенту температуры.

Рассмотренное приближение $x_v \gg 1$ есть приближение оптически толстого слоя, когда излучающую среду можно представить как некоторый континуум фотонов и перенос энергии излучения в среде следует уподобить диффузионному переносу. Например, в твердом теле при $l_R = 10^{-5}$ м и $T = 4000$ К значение $\lambda_R = 0,2$ Вт/(м·К), что существенно меньше электронной теплопроводности в металле, но по порядку величины сравнимо с решеточной теплопроводностью в диэлектрике (см. п. 4.33).

Приближение оптически тонкого тела. Рассмотрим излучение слоя конечной толщины L . Интенсивность I_v есть количество лучистой энергии, проходящей в 1 с в единице телесного угла через единичную площадку, помещенную перпендикулярно к направлению движения квантов. Тогда интенсивность излучения у поверхности слоя в направлении, образующем угол θ с нормалью, равна [7]

$$I_v(\theta) = I_{0v} \left(1 - \exp\left(-\frac{\chi_v L}{\cos \theta}\right) \right),$$

где $\chi_v L$ – оптическая толщина слоя в направлении нормали к поверхности. Таким образом, интенсивность излучения слоя конечной толщины всегда меньше равновесной. В зависимости от толщины слоя L наибольшее отличие спектра от планковского должно наблюдаться в пределе оптически тонкого слоя, т. е. под такими углами, что $\chi_v L / \cos \theta \ll 1$.

Следует отметить, что понятие «оптической тонкости» слоя зависит от угла: всегда найдутся столь большие углы ($\theta \approx \pi/2$), что слой для этих направлений будет «оптически толстым», т. е. будет излучать как черное тело.

Во многих случаях интерес представляет не интенсивность излучения под данным углом, а поток излучения с поверхности тела, т. е. количество энергии, выходящей в 1 с с единицы поверхности тела по всем направлениям. Показано, что для оптически тонкого слоя

$$q_v = \pi I_{0v} \cdot 2\chi_v L \quad (2\chi_v L \ll 1).$$

Если обозначить среднюю величину коэффициента поглощения χ_v в оптически тонком слое через χ_1 , то можно записать $q = \sigma T^4 \cdot 2\chi_1 L$. Что касается потери лучистой энергии в единице объема оптически тонкого слоя, то она равна

$$\int_0^\infty (\operatorname{div} q_v) dv = c \int_0^\infty \chi_v \rho_{0v} dv = 4\chi_1 \sigma T^4.$$

В общем случае при переносе энергии излучением и теплопроводностью необходимо совместное решение уравнения теплопроводности

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda \nabla T) - \operatorname{div} \vec{q}_R$$

и уравнения переноса энергии излучения (3.9) или (3.10), (3.11). В частности, в стационарном случае для оптически толстого слоя толщиной L уравнение энергии принимает вид

$$\lambda \frac{d^2 T}{dz^2} = \frac{dq_R}{dz}$$

или

$$q = -(\lambda + \lambda_R) \frac{dT}{dz} = -\left(\lambda + \frac{16\sigma T^3}{3\chi} \right) \frac{dT}{dz}.$$

Выполняя интегрирование, получаем

$$q = \frac{\lambda}{L}(T_1 - T_2) + \frac{4\sigma}{3\chi L}(T_1^4 - T_2^4).$$

3.3. Радиационные свойства реальных тел. Закон Кирхгофа

Теплообмен между телами зависит от радиационных свойств поверхностей. На практике, как правило, имеем дело с нечерными телами и поэтому при расчете теплообмена излучением необходимо знать их реальные радиационные характеристики. К ним относятся [5]:

1) степень черноты, или относительная излучательная способность, равная отношению энергии излучения реальной поверхности к энергии излучения абсолютно черного тела при одной и той же температуре;

2) поглощательная способность – под этой величиной понимают отношение энергии, поглощенной поверхностью, к энергии, поглощенной абсолютно черным телом, при облучении одним и тем же потоком падающего излучения;

3) отражательная способность, равная отношению энергии, отраженной поверхностью, к энергии, отраженной идеальной отражающей поверхностью (абсолютно нечерной поверхностью), при облучении одним и тем же потоком падающего излучения;

4) пропускательная способность тела – вводится, если тело пропускает часть падающего на него излучения (тело называется полупрозрачным).

Составим баланс потоков излучения на поверхности тела [1]:

$$f(\lambda, T)d\lambda = E_\lambda d\lambda + R_\lambda f(\lambda, T)d\lambda,$$

где $f(\lambda, T)$ – падающее излучение; R_λ – коэффициент отражения; λ – длина волны излучения. Тогда

$$\frac{E_\lambda}{1 - R_\lambda} = f(\lambda, T).$$

Если положить $1 - R_\lambda = A_\lambda$, где A_λ – поглощательная способность тела для монохроматического излучения, то

$$f(\lambda, T) = \frac{E_\lambda}{A_\lambda}.$$

Для абсолютно черного тела $A_\lambda = 1$ и $f = E_{0,\lambda}$, т. е. f представляет собой характеристику излучения абсолютно черного тела (см. (3.6)). Тогда

$$\frac{E_\lambda}{A_\lambda} = E_{0,\lambda}. \quad (3.23)$$

Соотношение (3.23) есть выражение *закона Кирхгофа*: отношение плотности монохроматического излучения тела к его поглощательной способности не зависит от природы тела и равно плотности монохроматического излучения абсолютно черного тела. Следует подчеркнуть, что закон Кирхгофа применим только к равновесному излучению.

Если проинтегрировать (3.23) по λ в пределах от нуля до бесконечности, то получим закон Кирхгофа для интегрального излучения:

$$\frac{E}{A} = E_0 \equiv q_0 = \sigma T^4$$

или

$$E = A\sigma T^4, \quad (3.24)$$

где A – интегральная поглощательная способность

$$A = \frac{\int_0^\infty A_\lambda E_{0,\lambda} d\lambda}{\int_0^\infty E_{0,\lambda} d\lambda}.$$

Для практической оценки излучательной способности тела вводится безразмерный коэффициент, называемый *степенью черноты*, определяемый как отношение интенсивности собственного излучения тела при температуре T на длине волны λ и в данном направлении к интенсивности излучения абсолютно черного тела при тех же условиях.

Часто степень черноты определяется как отношение монохроматических плотностей полусферического излучения реального и абсолютно черного тела:

$$\varepsilon_\lambda = \frac{E_\lambda(T)}{E_{0,\lambda}(T)}.$$

По закону Кирхгофа

$$\varepsilon_\lambda(T) = A_\lambda(T), \quad (3.25)$$

т. е. степень черноты равна поглощательной способности при температуре излучения. Интегральная степень черноты есть

$$\varepsilon = \frac{\int_0^\infty \varepsilon_\lambda E_{0,\lambda} d\lambda}{\int_0^\infty E_{0,\lambda} d\lambda} = \frac{E}{E_0}.$$

Для серого тела с учетом (3.25) $\varepsilon_\lambda = \varepsilon = A$. Тогда на основании (3.24) полусферическая плотность излучения серого тела $[Вт/м^2]$ определяется выражением

$$q_R \equiv E = A\sigma T^4 = \varepsilon\sigma T^4. \quad (3.26)$$

3.4. О теплообмене излучением между поверхностями. Угловые коэффициенты

При расчете теплообмена излучением между поверхностями для каждой из поверхностей необходимо полностью учитывать все падающее на нее излучение, исходящее со всех возможных направлений в пространстве. При таких расчетах важную роль играет геометрия системы, которая учитывается введением *угловых коэффициентов*. Угловой коэффициент определяет долю диффузно распределенной энергии излучения, которая передается с одной поверхности системы на другую. При диффузном испускании поток излучения, покидающий поверхность i площадью S_i , равномерно распреде-

ляется по полусфере над этой поверхностью. Пусть в рассматриваемом пространстве над поверхностью i располагается другая поверхность (j) площадью S_j . Угловой коэффициент $\varphi_{S_i-S_j}$ определяет ту часть энергии излучения, которая попадает с поверхности i на поверхность j [5].

Рассмотрим задачу о теплообмене излучением между двумя бесконечно малыми элементами поверхностей dS_i и dS_j (рис. 3.2).

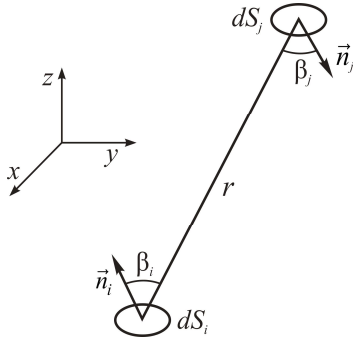


Рис. 3.2. К расчету угловых коэффициентов между двумя элементарными площадками [5]

Пусть плотность потока эффективного излучения элементарной площадки dS_i , который диффузно распределяется в полупространстве над элементом dS_i , равна E_i . Тогда интенсивность излучения, соответствующая E_i , согласно (3.2), будет равна

$$I_i = \frac{E_i}{\pi}, \quad (3.27)$$

а энергия излучения, покидающая dS_i в направлении dS_j , есть

$$I_i dS_i \cos \beta_i d\omega, \quad (3.28)$$

где $d\omega$ – телесный угол, под которым видна площадка dS_j из центра площадки dS_i . Величина этого телесного угла

$$d\omega = \frac{dS_j \cos \beta_j}{r^2}.$$

Подставим выражение для $d\omega$ в (3.28) с учетом (3.27). Тогда получим

$$\frac{E_i \cos \beta_i \cos \beta_j dS_i dS_j}{\pi r^2}. \quad (3.29)$$

Энергия излучения, покидающая элемент dS_i во всех направлениях в полусферическом телесном угле над этой площадкой, равна

$$E_i dS_i . \quad (3.30)$$

Отношение величин (3.29) и (3.30) есть та часть энергии полусферического излучения элементарной площадки dS_i , которая попадает на площадку dS_j . Таким образом, величина

$$d\varphi_{dS_i-dS_j} = \frac{\cos\beta_i \cos\beta_j}{\pi r^2} dS_j \quad (3.31)$$

является *элементарным угловым коэффициентом*.

При рассмотрении теплообмена излучением между бесконечно малым элементом поверхности dS_i и конечной поверхностью S_j вводится локальный угловой коэффициент

$$\varphi_{S_j-dS_i} = \frac{dS_i}{S_j} \int_{S_j} \frac{\cos\beta_i \cos\beta_j}{\pi r^2} dS_j . \quad (3.32)$$

Наконец, для описания теплообмена между двумя конечными поверхностями (S_i и S_j) вводится интегральный угловой коэффициент

$$\varphi_{S_i-S_j} = \frac{1}{S_i} \int_{S_i} \int_{S_j} \frac{\cos\beta_i \cos\beta_j}{\pi r^2} dS_i dS_j . \quad (3.33)$$

Аналогично вводится угловой коэффициент $\varphi_{S_j-S_i}$. При этом

$$S_i \varphi_{S_i-S_j} = S_j \varphi_{S_j-S_i} .$$

Чтобы использовать приведенные выражения для угловых коэффициентов (3.31)–(3.33), необходимо связать величины $\cos\beta_i$, $\cos\beta_j$ и r с координатами и другими переменными, описывающими форму и взаимное расположение участвующих в теплообмене поверхностей [5].

Вычисление угловых коэффициентов связано с интегрированием по конечным площадям. Однако существует ряд математических методов, которые упрощают их вычисление. В монографии [3] даны некоторые способы вычисления и таблица угловых коэффициентов (см. задачи 24, 25, 27, 31).

Исследование теплообмена излучением в системе тел, разделенных прозрачной средой, основано на решении интегральных уравнений переноса энергии излучения. Используется также приближенный (*зональный*) метод, суть которого – замена непрерывного распределения температур и оптических характеристик конечным числом термически и оптически однородных участков (зон) [1].

При радиационном теплообмене внутри замкнутой системы поверхностей излучение, испускаемое некоторой поверхностью, попадает на другие поверхности в результате многократного отражения с частичным поглощением излучения при каждом его взаимодействии с поверхностью (см. задачу 26).

Рассмотрим k -ю внутреннюю поверхность площадью S_k замкнутой системы. Тепловой баланс на поверхности запишем в виде [3]

$$Q_k = q_k S_k = (q_{0,k} - q_{i,k}) S_k,$$

где $q_{0,k}$ – плотность потока эффективного излучения k -й поверхности, определяемая как сумма плотности потока собственного излучения и плотности потока отраженного от других поверхностей излучения:

$$q_{0,k} = \varepsilon_k \sigma T_k^4 + (1 - \varepsilon_k) q_{i,k}.$$

Величина $q_{i,k}$ складывается из частей потоков эффективного излучения всех поверхностей замкнутой системы, достигающих k -й поверхности. В результате, как показано в [3], можно получить два основных уравнения теплового баланса для потока результирующего излучения поверхности к Q_k внутри замкнутой системы:

$$Q_k = S_k \frac{\varepsilon_k}{1 - \varepsilon_k} (\sigma T_k^4 - q_{0,k}), \quad (3.34)$$

$$Q_k = S_k \left(q_{0,k} - \sum_{j=1}^N \varphi_{k,j} q_{0,j} \right). \quad (3.35)$$

Уравнения (3.34) и (3.35) можно записать для каждой из N поверхностей в замкнутой системе. В результате имеем $2N$ уравнений с $2N$ неизвестными. Их можно преобразовать в уравнение [3, 6] (считаем положительными потоки от поверхности)

$$\sum_{j=1}^N (\delta_{k,j} - \varphi_{k-j}) \frac{Q_j}{S_j \varepsilon_j} = \sum_{j=1}^N (\delta_{k,j} - \varphi_{k-j}) \sigma T_j^4, \quad (3.36)$$

$\delta_{k,j}$ – символ Кронекера.

В работе [6] получено явное выражение для результирующих потоков Q_j из (3.36) путем введения матрицы коэффициентов лучистых связей поверхностей («разрешающих коэффициентов»).

Приведенная степень черноты. Рассмотрим простой случай теплообмена излучением между двумя параллельными бесконечными пластинами

(1 и 2) с температурами T_1 и T_2 . Поглощательная и отражательная способности и степени черноты для них равны $A_{1\lambda}, R_{1\lambda}, \varepsilon_{1\lambda}; A_{2\lambda}, R_{2\lambda}, \varepsilon_{2\lambda}$ соответственно.

После многократных отражений уравнение для результирующего теплового потока, излучаемого поверхностью 1, примет вид (угловые коэффициенты равны единице)

$$q_{1\lambda} = \left[1 - A_{1\lambda} R_{2\lambda} (1 + R_{1\lambda} R_{2\lambda} + R_{1\lambda}^2 R_{2\lambda}^2 + \dots) \right] E_{1\lambda} = \left[1 - \frac{A_{1\lambda} R_{2\lambda}}{R_{1\lambda} R_{2\lambda}} \right] E_{1\lambda}.$$

Так как $R_\lambda = 1 - A_\lambda$ для непрозрачных пластин, то

$$q_{1\lambda} = \frac{A_{2\lambda}}{A_{1\lambda} + A_{2\lambda} - A_{1\lambda} A_{2\lambda}} E_{1\lambda}.$$

Для пластины 2 имеем

$$q_{2\lambda} = \frac{A_{1\lambda}}{A_{1\lambda} + A_{2\lambda} - A_{1\lambda} A_{2\lambda}} E_{2\lambda}.$$

Результирующий поток между пластинами равен

$$q_\lambda = q_{1\lambda} - q_{2\lambda} = \frac{A_{2\lambda} E_{1\lambda} - A_{1\lambda} E_{2\lambda}}{A_{1\lambda} + A_{2\lambda} - A_{1\lambda} A_{2\lambda}}.$$

Используем определение степени черноты ($E_{1\lambda} = \varepsilon_{1\lambda} E_{0\lambda 1}$, $E_{2\lambda} = \varepsilon_{2\lambda} E_{0\lambda 2}$). Тогда

$$q_\lambda = \frac{A_{2\lambda} \varepsilon_{1\lambda} E_{0,\lambda 1} - A_{1\lambda} \varepsilon_{2\lambda} E_{0,\lambda 2}}{A_{1\lambda} + A_{2\lambda} - A_{1\lambda} A_{2\lambda}}.$$

Так как по закону Кирхгофа $A_{1\lambda} = \varepsilon_{1\lambda}$, $A_{2\lambda} = \varepsilon_{2\lambda}$, то

$$q_\lambda = \frac{1}{\varepsilon_{1\lambda}^{-1} + \varepsilon_{2\lambda}^{-1} - 1} (E_{0\lambda 1} - E_{0\lambda 2}).$$

Для серых тел ($\varepsilon_{1\lambda} = \varepsilon_1$, $\varepsilon_{2\lambda} = \varepsilon_2$) полусферическая плотность результирующего интегрального излучения равна

$$q = \frac{\sigma}{\varepsilon_1^{-1} + \varepsilon_2^{-1} - 1} (T_1^4 - T_2^4) = \varepsilon_{\text{пр}} \sigma (T_1^4 - T_2^4). \quad (3.37)$$

В выражении (3.37) величина

$$\varepsilon_{\text{пр}} = \frac{1}{\varepsilon_1^{-1} + \varepsilon_2^{-1} - 1}$$

имеет смысл *приведенной степени черноты* (см. задачи 28, 29).

Для теплообмена между поверхностями двух тел ($S_1 < S_2$), из которых одно невогнуто и заключено внутри другого, имеем

$$\varepsilon_{\text{пр}} = \frac{1}{\varepsilon_1^{-1} + \frac{S_1}{S_2}(\varepsilon_2^{-1} - 1)}$$

Экраны. Пусть между двумя плоскопараллельными поверхностями с температурами T_M и T_N расположены m параллельных плоских листов

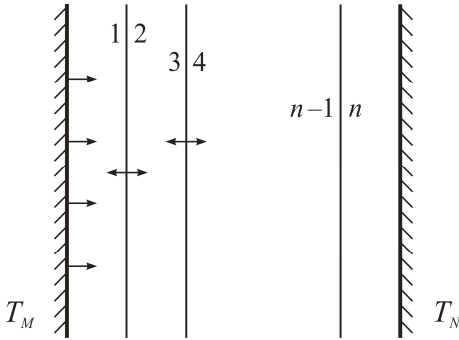


Рис. 3.3. К действию экранов [1]

(экранов) [1]. Считаем, что экраны непрозрачны для теплового излучения и являются абсолютно теплопроводными, т. е. излучающие поверхности каждого экрана имеют одинаковую температуру (рис. 3.3).

В стационарном случае результирующий поток тепла, переносимый между рассматриваемыми поверхностями, остается постоянным.

Представим выражения для сопротивлений переносу радиационной энергии в виде

$$\begin{aligned} \frac{\sigma(T_M^4 - T_1^4)}{q} &= \left(\varepsilon_M - \frac{1}{2}\right) + \left(\varepsilon_1 - \frac{1}{2}\right), \\ \frac{\sigma(T_2^4 - T_3^4)}{q} &= \left(\varepsilon_2 - \frac{1}{2}\right) + \left(\varepsilon_3 - \frac{1}{2}\right), \\ &\dots \end{aligned} \tag{3.38}$$

Просуммируем левые и правые части уравнений (3.38) с учетом, что $T_1 = T_2$, $T_3 = T_4$ и т. д.). Тогда получим

$$\frac{\sigma(T_M^4 - T_N^4)}{q} = \sum_{i=1}^N \left(\varepsilon_i - \frac{1}{2}\right). \tag{3.39}$$

Правая часть (3.39) представляет собой суммарное сопротивление переносу лучистой энергии между поверхностями S_M и S_N :

$$q_M = -q_N = \frac{\sigma(T_M^4 - T_N^4)}{\sum_{i=M}^N \left(\varepsilon_i - \frac{1}{2} \right)}.$$

Если все ε_i одинаковы ($\varepsilon_i = \varepsilon$), то

$$q_M = -q_N = \frac{\sigma(T_M^4 - T_N^4)}{2(m+1) \left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right)}.$$

В случае абсолютно черных поверхностей экранов имеем

$$q_M = -q_N = \frac{1}{m+1} \sigma(T_M^4 - T_N^4). \quad (3.40)$$

Из (3.40) следует, что наличие между взаимодействующими телами одного экрана уменьшает радиационный поток в два раза, наличие двух экранов – в три раза и т. д. На этом принципе основано создание изоляционных материалов из набора тонких металлических фольг.

Об учете наличия m экранов от теплового излучения в общем случае см. задачу 29.

Литература

1. Кутателадзе С. С. Основы теории теплообмена. Новосибирск: Наука, 1970.
2. Адзерихо К. С. Лекции по теории переноса лучистой энергии. Минск: БГУ, 1975.
3. Зигель Р., Хауэлл Дж. Теплообмен излучением. М.: Мир, 1975.
4. Цянь Сюэ-сень. Физическая механика. М.: Мир, 1965.
5. Спэрроу Э. М., Сесс Р. Д. Теплообмен излучением. Л.: Энергия, 1971.
6. Бринь А. А., Иванькин П. С., Кондрашов В. В., Марач С. О., Шнип А. И. Отработка системы терморегулирования оптико-электронного модуля космического аппарата на основе моделирования тепловых процессов. Минск, 2012 (Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси / Препринт № 2). – 50 с.
7. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматгиз, 1963.

Глава 4

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

4.1. Атомное строение кристаллов

Все материалы, которые состоят из атомов одного или нескольких химических элементов, различаются электронной структурой и, как следствие, химической активностью.

Связи, благодаря которым происходит объединение атомов и ионов в молекулы и (или) кристаллы, называют химическими или межатомными. Межатомное взаимодействие обусловлено в основном силами электростатического притяжения между противоположно заряженными частицами (электронами и катионами, катионами и анионами) и силами отталкивания между одноименно заряженными частицами (между электронами и одноименно заряженными ионами).

В зависимости от соотношения потенциальной энергии химической связи $E_{\text{пот}}$ и кинетической энергии движения $E_{\text{кин}}$ атомов или ионов при температуре выше абсолютного нуля все вещества в природе могут находиться в трех состояниях: газообразном, когда кинетическая энергия атомов или ионов много больше их потенциальной энергии взаимодействия ($E_{\text{кин}} \gg E_{\text{пот}}$); жидком ($E_{\text{кин}} > E_{\text{пот}}$); твердом ($E_{\text{кин}} < E_{\text{пот}}$). Именно это соотношение энергий и определяет агрегатное состояние системы атомов или ионов и ее свойства.

Чтобы обеспечить переход вещества из газообразного или жидкого состояния в твердое, частицы должны сблизиться на определенное (оптимальное) расстояние, при котором силы притяжения и отталкивания между частицами находятся в равновесии. Это расстояние соответствует минимуму на зависимости энергии межатомного взаимодействия от расстояния между образующими твердое тело частицами (рис. 4.1). Положение этого минимума и соответствует равновесному межатомному расстоянию r_0 , которое обычно составляет величины порядка долей нанометра.

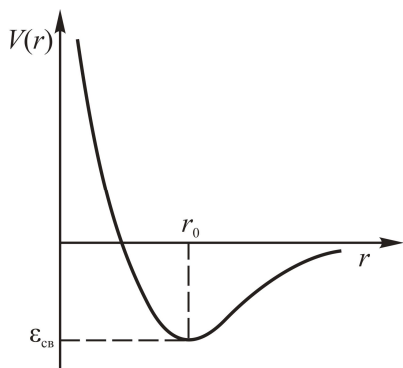


Рис. 4.1. Зависимость энергии взаимодействия ионов от межионного расстояния. $V(r)$ – результирующая энергия связи, r_0 – равновесное межатомное расстояние, соответствующее минимуму энергии связи

Величина энергии в минимуме $\epsilon_{\text{св}} = V(r_0)$ и есть энергия химической связи или межатомного взаимодействия. Величина $\epsilon_{\text{св}}$ на один атом определяется как разность полной энергии кристалла $E_{\text{полн}}$ и энергии $N\epsilon_{\text{ат}}$ такого же, как в кристалле, количества изолированных атомов N , деленная на число N атомов:

$$\epsilon_{\text{св}} = \frac{E_{\text{полн}} - N\epsilon_{\text{ат}}}{N}.$$

Значение энергии межатомной связи определяется типом химической связи и для кристаллических материалов обычно составляет от 0,01 до 5–7 эВ.

Основную роль в процессе объединения атомов в молекулы или твердые тела играют валентные электроны, находящиеся на внешних электронных оболочках атомов. Межатомная связь возникает благодаря тому, что атомы в веществе приближаются достаточно близко друг к другу, так что их внешние электронные оболочки начинают перекрываться. В результате такого перекрытия характер движения электронов резко изменяется и электроны, находящиеся на определенном энергетическом уровне одного атома, получают возможность либо переходить без затраты энергии на соответствующий энергетический уровень соседнего атома и, таким образом, свободно перемещаться вдоль всего твердого тела, либо целиком переходить на другой атом (с образованием катиона и аниона), либо обмениваться парами электронов между соседними атомами. Какой из этих процессов реализуется, определяется в первую очередь строением электронных оболочек взаимодействующих атомов, т. е. их химической природой.

В зависимости от строения электронных оболочек атомов химические связи между атомами (ионами) в твердых веществах обычно принято делить на четыре основных (предельных) вида – ковалентные, ионные, металлические и молекулярные.

Ковалентная связь в молекулах или кристаллах обусловлена взаимодействием между атомами, которое осуществляется парой электронов,

обобществленных между двумя атомами. Здесь главную роль в формировании химической связи играет так называемое обменное взаимодействие, которое имеет квантово-механическую природу. Оно обусловлено кулоновским взаимодействием электронов с противоположными направлениями спинов и действием принципа Паули, учитывающего корреляцию в движении электронов, обусловленную наличием спина. Пример формирования такой общей для двух атомов пары электронов при образовании молекулы водорода показан на рис. 4.2.

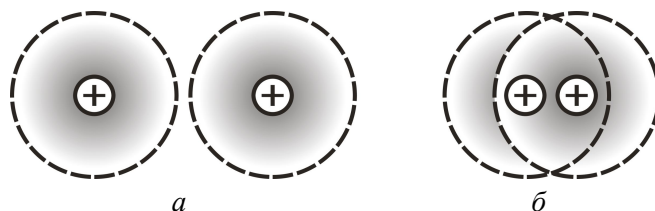


Рис. 4.2. Ковалентная (атомная) связь в молекуле водорода: *a* – изолированные атомы; *б* – молекула с неполярной ковалентной связью

Если двухатомная молекула или кристалл с ковалентным типом химических связей состоит из атомов одного элемента (например, H_2 , N_2 , алмаз, кремний, германий), то распределение электронной плотности между атомами симметрично (электронная пара принадлежит обоим ковалентно связанным атомам в одинаковой степени). Молекулы с таким типом ковалентной связи называют неполярными или нейтральными, поскольку центры инерции положительных и отрицательных зарядов совпадают. При реализации неполярной ковалентной связи электроны пары в равной степени принадлежат двум соседним атомам (рис. 4.2). Если двухатомная молекула либо кристалл состоит из атомов различных элементов, то центр распределения электронной плотности в электронной паре может быть смещен к одному из атомов. В этом случае ковалентную связь называют полярной, а молекулы с полярной связью, у которых центры положительных зарядов не совпадают, – полярными или дипольными.

Классическим примером кристаллов с ковалентной связью являются алмаз, кремний и германий. У атомов этих элементов есть по два электрона в *s*- и *p*-состояниях. При сближении атомов в процессе формирования кристалла электронные оболочки атомов перестраиваются, формируя пары электронов, которые являются общими для ближайших соседей каждого атома. Как видно из рис. 4.3, ковалентная связь в такой структуре характерна тем, что каждый атом образует по четыре связи со своими соседями. Поскольку такие связи направлены вдоль осей правильного тетраэдра, их называют *тетраэдрическими*. Распределение электронной плотности при этом оказывается сильно неоднородным, в результате чего ковалентные связи

являются строго направленными, так как образуются в направлении наибольшей плотности объединенных электронов. Углы между связями в кремнии составляют $109^{\circ}29'$. Ковалентные кристаллы обычно обладают самой большой энергией связи, которая может достигать 5–7 эВ. В результате такие кристаллы обладают наибольшей прочностью и тугоплавкостью.

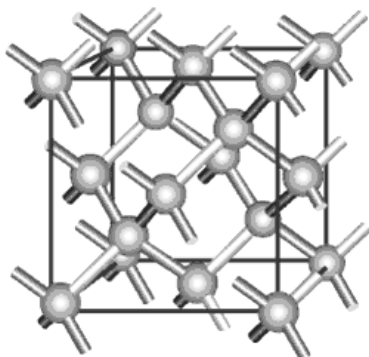


Рис. 4.3. Тетраэдрическая ковалентная связь в решетке типа алмаза (алмаз, кремний, германий)

Ионные связи обусловлены силами электростатического (кулоновского) притяжения между положительными и отрицательными ионами, образовавшимися путем перехода электронов от одного атома к другому. Ионная связь характерна для соединений, один элемент которых является металлом, а другой близок к последней группе таблицы Менделеева (например, кристаллы щелочно-галогидных соединений типа NaCl, KCl, KBr, LiF и др.). Кроме того, такие связи характерны для многих окислов и солей, имеющих в своем составе ионы противоположных знаков (например, ZnO, CdO, NiO, CuO и др.).

Ионная связь является менее направленной, чем ковалентная, поэтому в ионных кристаллах число ближайших соседей больше, чем у ковалентных, и обычно равно шести и восьми. Энергия ионной связи лежит в диапазоне 0,5–3 эВ. Поэтому ионные кристаллы менее прочны (более хрупки), чем ковалентные, так что ионные соединения уступают веществам с ковалентной связью по механической прочности, тугоплавкости и химической стойкости.

Металлические связи образуются между атомами металлических элементов, которые обладают способностью отдавать валентные электроны, превращаясь в положительный ион (катион). При этом валентные электроны, которые покидают атомы, становятся свободными и называются коллективизированными (рис. 4.4). В результате металлический кристалл можно представить себе как систему, состоящую из положительных ионов, которые «погружены» в газ коллективизированных (обобществленных) электронов. В этой системе имеет место электростатическое притяжение между катионами и газом свободных электронов. Такая структура обуславливает ненаправленный характер металлических связей, приводящий к возможности

формирования кристаллов с максимально возможным числом ближайших соседей (8 и 12). Вследствие этого металлические кристаллы обладают высокой пластичностью.

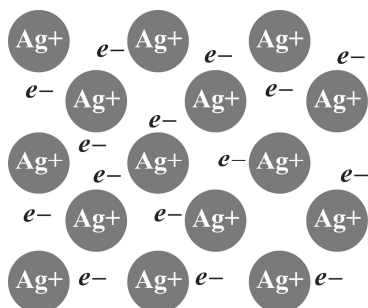


Рис. 4.4. Схема кристаллической решетки с металлическим типом связи, состоящей из системы катионов и свободных электронов

Энергия металлической связи лежит в диапазоне 1–5 эВ, что определяет высокую механическую прочность и тугоплавкость металлов. Благодаря большой концентрации свободных электронов металлы обладают высокой электро- и теплопроводностью.

Молекулярные, или ван-дер-ваальсовы, связи образуются между отдельными молекулами в результате электростатического притяжения между зарядами противоположных знаков, которые формируются при образовании диполей в молекулах. Такое электростатическое притяжение называют силами Ван-дер-Ваальса.

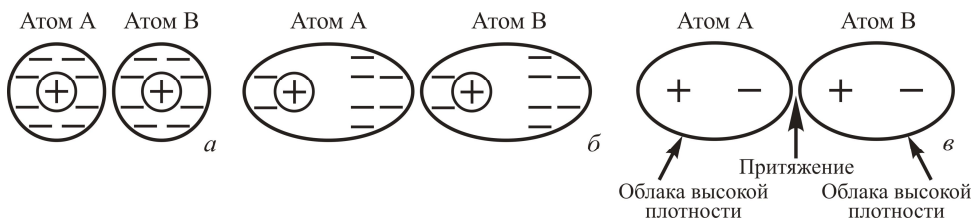


Рис. 4.5. Схема возникновения ван-дер-ваальсовых связей: исходные атомы А и В (а), атомы с поляризованными электронными оболочками (б), притяжение образовавшихся диполей (в)

Наличие сил Ван-дер-Ваальса связано со способностью нейтральных молекул или атомов индуцировать друг в друге мгновенные малые дипольные электрические моменты вследствие флуктуаций электронной плотности вокруг ядра (поляризации) из-за столкновений атомов либо других причин (рис. 4.5). В среднем взаимодействие между индуцированными дипольными моментами соседних атомов приведет к их притяжению, что выгодно энергетически, так как понижается энергия системы.

Под действием сил Ван-дер-Ваальса из электрически нейтральных атомов за счет индуцированного диполь-дипольного взаимодействия образуются

ся кристаллы инертных газов при низких температурах, например молекулы в твердом водороде H_2 , азоте N_2 , углекислом газе CO_2 .

Величина энергии связи в кристаллах с ван-дер-ваальсовым взаимодействием на один-два порядка меньше (0,01–0,2 эВ), чем у ионных. Поэтому соответствующие вещества имеют низкие температуры плавления и кипения.

Кристаллическая и пространственная решетки. В твердых веществах их структурные элементы (атомы, ионы или молекулы) располагаются либо в строгом порядке, либо случайным образом (рис. 4.6). Вещества с закономерным упорядоченным расположением атомов в пространстве, получаемые в условиях термодинамического равновесия, называются кристаллическими. В условиях, отличных от равновесия, эти же вещества могут быть получены в аморфном (сильно неупорядоченном) состоянии, которое характеризуется более высокой энергией.

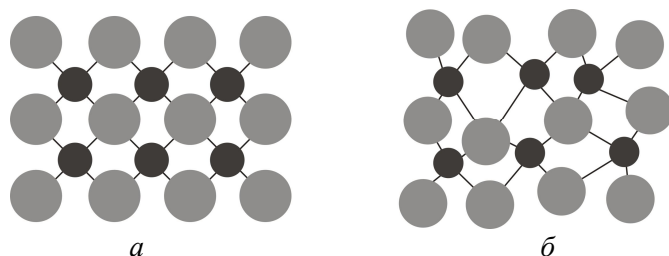


Рис. 4.6. Схема расположения атомов в кристаллическом (а) и аморфном (б) твердом материале

Поскольку внутреннее строение кристаллических веществ характеризуется закономерным периодическим расположением их атомов, последние образуют геометрически закономерную периодическую кристаллическую решетку.

В кристаллических материалах вследствие сферической симметрии атомных частиц их кристаллическую решетку часто изображают в виде сближенных до соприкосновения шаров (рис. 4.7, а). Однако О. Браве (для формализации и упрощения изображения атомной структуры кристаллов) ввел понятие пространственной решетки, где система шаров-атомов в пространстве заменена схемой, в которой центры инерции шаров обозначены точками, называемыми узлами решетки (рис. 4.7, б).

Таким образом, пространственная решетка (ПР) – это система эквивалентных точек или узлов, поставленная в соответствие кристаллической решетке (КР) и отражающая ее основные симметричные свойства. Можно определить ПР также как совокупность упорядоченных точек (узлов) в пространстве, окружение каждой из которых идентично окружению всех остальных точек (узлов).

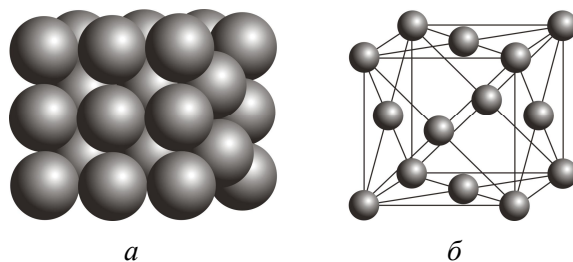


Рис. 4.7. Пример кристаллической (а) и пространственной (б) решеток

Поскольку решетчатое строение – это основной признак кристаллов, можно дать следующее определение кристалла. *Кристаллы – это твердые тела, в которых структурные элементы (атомы, ионы, молекулы) расположены закономерно в узлах ПР и, будучи выращенными в термодинамически равновесных условиях, имеют форму правильных плоскогранников.*

На рис. 4.8 показан принцип построения ПР с помощью трех некопланарных векторов трансляции \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , направление которых соответственно совпадает с направлением осей x , y , z , образующих кристаллографическую систему координат. Углы α , β и γ между осями называются осевыми или координатными углами.

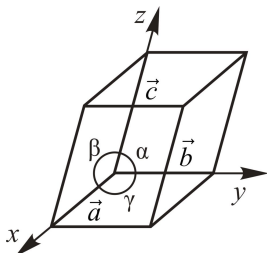


Рис. 4.8. Пример косоугольной элементарной ячейки

Такой принцип построения ПР позволяет описать ее математически. Если выбрать какой-либо узел ПР началом координат, то любой другой узел решетки может быть определен радиус-вектором

$$\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + t\vec{c}, \quad (4.1.1)$$

называемым вектором трансляции. Здесь m , n , t – произвольные целые числа (от нуля до бесконечности), называемые индексами данного узла.

Решетка, построенная посредством операции трансляции (4.1.1), называется *простой решеткой Бравэ*, а параллелепипед, построенный в кристаллографической системе координат на трех базисных векторах (\vec{a} , \vec{b} , \vec{c}) – элементарной ячейкой решетки Бравэ. Модули векторов трансляции \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} определяют длину ребер элементарной ячейки (рис. 4.8) и называются

постоянными решетки или периодами идентичности. Параметры кристаллической решетки измеряются в нанометрах и могут быть определены с помощью рентгеноструктурного анализа. Как видно из рис. 4.8, в вершинах элементарной ячейки КР или ПР обязательно должны находиться структурные элементы решетки (ионы, атомы, молекулы) или узлы соответственно.

Если элементарная ячейка, построенная на кратчайших трансляциях a, b, c , имеет узлы решетки только в вершинах, то она называется *примитивной ячейкой*. Примеры двумерных примитивных ячеек показаны на рис. 4.9, a – b . Такая ячейка обладает двумя важными свойствами: содержит всего один узел на ячейку и имеет наименьший объем среди всех элементарных ячеек.

Однако иногда при описании ПР в качестве элементарного параллелепипеда целесообразнее выбирать не примитивную ячейку наименьшего объема (которая может оказаться косоугольной, как на рис. 4.9, $b, в$), а непримитивную – большего объема, но прямоугольную (рис. 4.9, $г, д$). Такая ячейка содержит узлы не только в вершинах, но и внутри нее, а также на ребрах и (или) гранях.

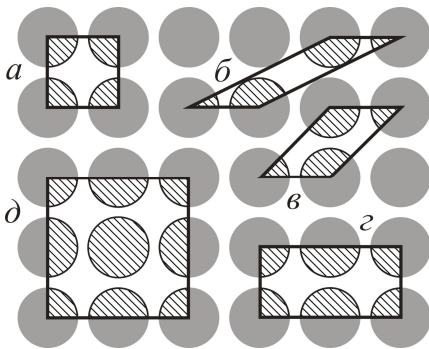


Рис. 4.9. Примеры примитивных ($a, б, в$) и непримитивных ($г, д$) элементарных ячеек

При подсчете числа атомов в каждой элементарной ячейке следует иметь в виду, что каждый атом или узел относится одновременно к нескольким ячейкам. Например, для кубической решетки, каждый атом, находящийся в вершине куба, принадлежит одновременно восьми ячейкам.

Как отмечалось выше, сферическая симметрия электронных оболочек некоторых атомов (ионов) позволяет представлять последние при изображении кристаллической решетки в виде несжимаемых твердых шаров определенного радиуса, между которыми действуют силы взаимного притяжения или отталкивания. В этом случае атомную структуру кристалла можно условно рассматривать как упорядоченную пространственную упаковку таких шаров. Энергия кристалла будет минимальной при максимально плотной упаковке.

Основные типы кристаллических структур. Характер упаковки (вид кристаллической решетки) для каждого твердого материала зависит от элек-

тронного строения образующих его атомов и типа химической связи между ними. Металлы часто обладают такими типами кристаллических структур (типов элементарных ячеек), как объемно-центрированная кубическая (ОЦК) – рис. 4.10, *а*, гранецентрированная кубическая (ГЦК) – рис. 4.10, *б* и гексагональная плотноупакованная (ГПУ) – рис. 4.10, *в*. Как видно, элементарная ОЦК ячейка не является примитивной, поскольку содержит по 2 атома: не только 8 атомов в вершинах (каждый из них принадлежит данной ячейке лишь на 1/8), но и атом в центре куба. В ГЦК решетке элементарная ячейка (также непримитивная) содержит 8 атомов в вершинах и 6 атомов в центрах граней куба (т. е. по 4 атома на ячейку). В ГПУ решетке элементарная ячейка имеет вид гексагональной призмы и содержит 12 атомов в вершинах, 2 атома на двух гранях и 3 атома внутри призмы (т. е. 6 атомов на ячейку).

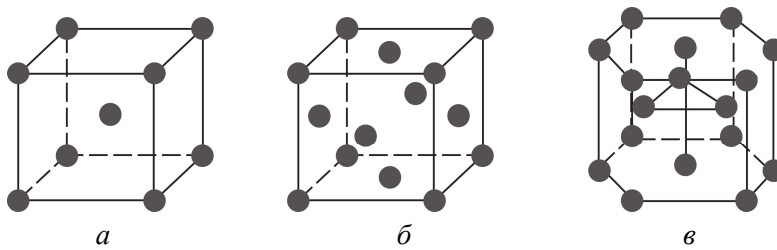


Рис. 4.10. Основные типы кристаллических (пространственных) решеток металлов: *а* – ОЦК; *б* – ГЦК; *в* – ГПУ

В случае кубических (ОЦК и ГЦК) решеток все ребра ячейки (длины векторов трансляции) одинаковы и образуют прямые углы между собой (рис. 4.10). Поэтому параметры кубических решеток характеризуются длиной ребра куба и обозначаются буквой *a*. Для характеристики ГПУ решетки принимают два параметра – сторону шестигранника *a* (вдоль оси *x*) и высоту призмы *c* (вдоль оси *z*). Когда отношение $c/a = 1,633$, то атомы упакованы наиболее плотно и образуют ГПУ структуру. Некоторые металлы имеют гексагональную решетку с менее плотной упаковкой атомов: например, для цинка $c/a = 1,86$, для кадмия – 1,88.

Простейшими структурами полупроводников являются структуры типа алмаза, *сфалерита* и *вюрцита* (рис. 4.11). Структуру типа алмаза имеет алмаз, состоящий из атомов углерода, а также германий и кремний. Элементарная ячейка алмазоподобной структуры относится к ГЦК. Однако в отличие от ГЦК с плотнейшей упаковкой кроме атомов в вершинах и центрах граней куба в алмазоподобной кристаллической ячейке содержатся еще четыре атома. Эти атомы расположены в четырех из восьми октантов, на которые может быть условно разделена элементарная ячейка (рис. 4.11, *а*). В результате, такая ячейка содержит восемь атомов, каждый из которых соседствует с четырьмя ближайшими соседями (тетраэдрическое окружение).

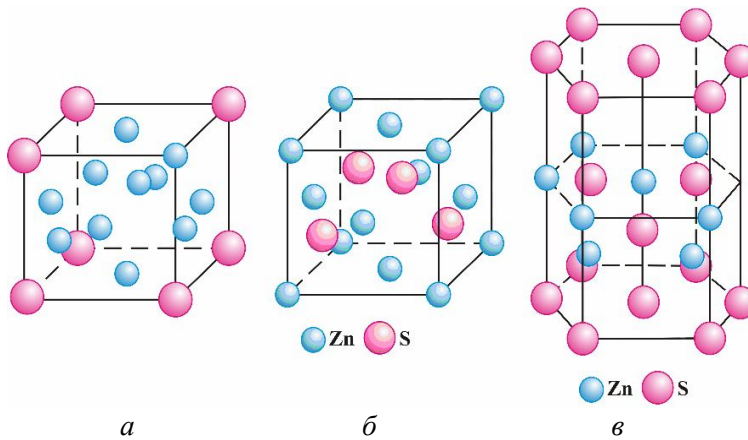


Рис. 4.11. Примеры элементарных ячеек для структур типа алмаза (*a*), сфалерита (*б*) и вюрцита (*в*)

Структура типа сфалерита (ZnS , CdS , AlP , AlAs , GaAs и др.) (рис. 4.11, *б*) подобна структуре алмаза, однако приходящиеся на ячейку 8 атомов делятся на два вида: 4 атома одного вида лежат в вершинах и центрах и 4 атома другого вида находятся в центрах четырех из упомянутых выше восьми октантов.

Структура типа вюрцита (CdS , ZnS , ZnO , InSb и др.) соответствует ГПУ решетке (рис. 4.11, *в*). Однако в элементарной ячейке этой структуры имеется дополнительное число атомов другого вида на ребрах и внутри гексагональной призмы. Для данной структуры также характерно тетраэдрическое окружение.

Зная тип кристаллической решетки, можно определить координационное число структуры и атомный (или ионный) радиус. Координационным числом кристаллической решетки структуры называется число ближайших соседних атомов, окружающих данный атом. Как видно, в ОЦК решетке координационное число равно 8. В ГЦК и ГПУ решетках координационное число равно 12. Атомный (или ионный) радиус атомов (ионов) в кристаллической решетке определяется как половина расстояния между центрами ближайших (соприкасающихся) шаров-атомов (ионов).

Модель плотнейших упаковок позволяет рассчитать коэффициент заполнения, или компактности, Q кристаллической структуры как долю объема элементарной ячейки, занятой атомами или ионами радиусом R :

$$Q = \frac{4\pi R^3 n}{3V} \cdot 100\% .$$

Здесь V – объем элементарной ячейки, n – число атомов, приходящихся на ячейку. Тогда для простой кубической решетки $Q = 52\%$, для ОЦК структу-

ры – 68%, а для ГЦК и ГПУ решеток – 74%. Таким образом, из этих четырех структур ГЦК и ГПУ решетки являются самыми плотноупакованными.

С изменением коэффициента компактности в разных типах кристаллических решеток соответственно изменяются и размеры межатомных пор (пустот) в них, что очень важно для внедрения в кристалл чужеродных атомов (например, при образовании сложных соединений либо сплавов). Как видно, в ГЦК и ГПУ решетках атомы занимают 74% всего объема кристаллической решетки, а межатомные пустоты (поры) – 26%. В ОЦК решетке атомы занимают 68% всего объема, а поры – 32%.

Как отмечалось, элементарные ячейки твердых кристаллических материалов могут иметь вид как прямоугольных, так и косоугольных параллелепипедов. Поэтому для описания кристаллических структур с различным видом элементарных ячеек был разработан метод кристаллографического индцирования, позволяющий в символической форме представить пространственные (кристаллические) решетки. Этот метод позволяет единообразно описать положение узлов (атомов), а также направления и плоскости в решетках, независимо от вида кристаллографической системы координат (прямоугольной или косоугольной) и конкретных значений модулей основных векторов трансляции (параметров решетки) по осям координат.

В методе кристаллографического индцирования для описания атомных координат любой узел решетки может быть определен по формуле (4.1.1) радиус-вектором \vec{R} , являющимся линейной комбинацией основных векторов трансляции \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} . В этом случае совокупность трех индексов узла $[[mnt]]$ в формуле (4.1.1), записанная в двойных квадратных скобках, дает координаты узла и называется символом узла. Примеры таких символов для вершинных атомов примитивной ячейки показаны на рис. 4.12, а.

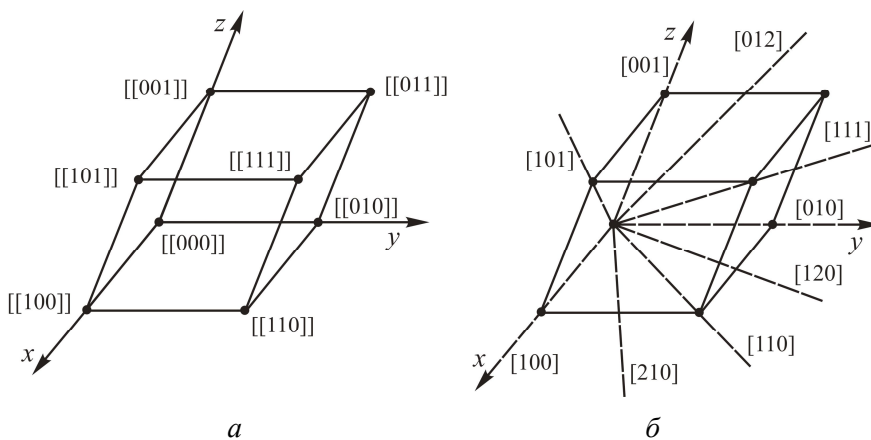


Рис. 4.12. Кристаллографические символы узлов (а) и направлений (б) в элементарной ячейке

В кристаллографии принято все направления (в виде прямых линий) проводить через узлы (атомы) решетки. Поэтому любое направление в кристалле всегда можно охарактеризовать координатами двух узлов (атомов), через которые оно проходит. Если один из узлов выбрать началом координат, то координаты второго узла и будут определять выделенное направление. Поэтому координаты $[mnt]$ второго узла, записанные в одиночных квадратных скобках, называются символом направления. Таким же символом, заключенным в фигурные скобки, описывается все семейство направлений, параллельных данному. Примеры некоторых важнейших кристаллографических направлений приведены на рис. 4.12, б.

В кристаллографии принято также плоскости проводить через узлы пространственной решетки (рис. 4.13). При этом всякая плоскость, которая проходит через три узла решетки, не лежащие на одной прямой, содержит целую сетку узлов. В таком случае для описания положения какой-либо кристаллографической плоскости (и системы параллельных ей плоскостей) в пространстве необходимо задать величины отрезков, отсекаемых этой плоскостью на кристаллографических осях координат x, y, z . Согласно рис. 4.13, эти отрезки равны ma, nb, tc , где числа m, n, t определяют длину отсекаемых отрезков (в долях единичных векторов трансляций $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$). На рис. 4.13, а дана система параллельных плоскостей, в первой плоскости (ближайшей к началу координат) $m = n = 1/2$ и $t = 0$. На рис. 4.13, б изображены две обозначенные символами (111) и (112) плоскости, которые отсекают по осям отрезки с $m = n = t = 1$ (незаштрихованная плоскость) и с $m = n = 1$ и $t = 1/2$ (заштрихованная плоскость).

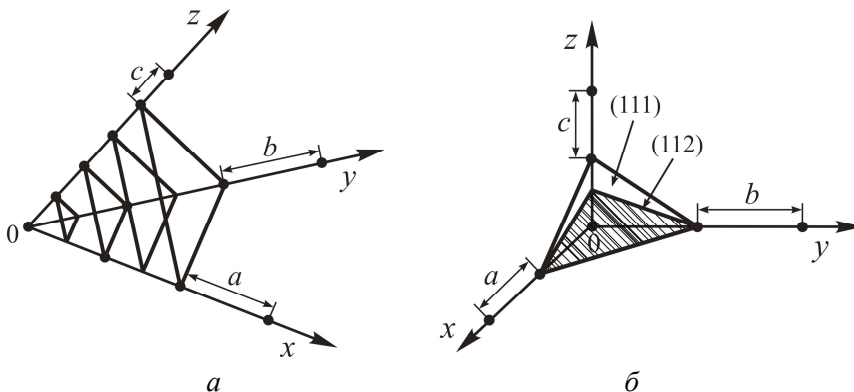


Рис. 4.13. Примеры построения кристаллографических плоскостей в пространственной решетке: а – плоскости типа (221) пересекают оси x и y в точках с координатами $[[1/2, 0, 0]]$ и $[[0, 1/2, 0]]$ соответственно; б – плоскости типа (111) и (112) пересекают ось z в точках с координатами $0, 0, 1$ и $0, 0, 1/2$ от начала координат соответственно. Координаты даны в долях единичных векторов трансляций a, b, c

Однако для удобства в кристаллографии положение плоскостей принято характеризовать не отсекаемыми по осям координат отрезками или числами m, n, t , а так называемыми *кристаллографическими индексами Миллера*. Индексы Миллера (hkl) являются заключенными в круглые скобки величинами, обратными длинам отрезков, измеряемых в единицах параметра решетки $h = 1/m, k = 1/n, l = 1/t$. Поэтому для плоскостей на рис. 4.13, *а* индексы Миллера будут (221) , а на рис. 4.13, *б* – (111) для незаштрихованной плоскости и (112) для заштрихованной плоскости. Если плоскость отсекает по осям отрицательные отрезки, то над соответствующей цифрой индекса ставится знак минус.

Из сказанного следует, что геометрический смысл индексов Миллера состоит в том, что система параллельных плоскостей типа (hkl) рассекает периоды идентичности или ребра элементарной ячейки a, b, c на h, k, l частей соответственно. Это и означает, что символами плоскостей, изображенных на рис. 4.13, *б*, будут (111) и (112) .

Изображение других важнейших плоскостей и соответствующих им индексов Миллера в элементарных ячейках решетки приведены на рис. 4.14.

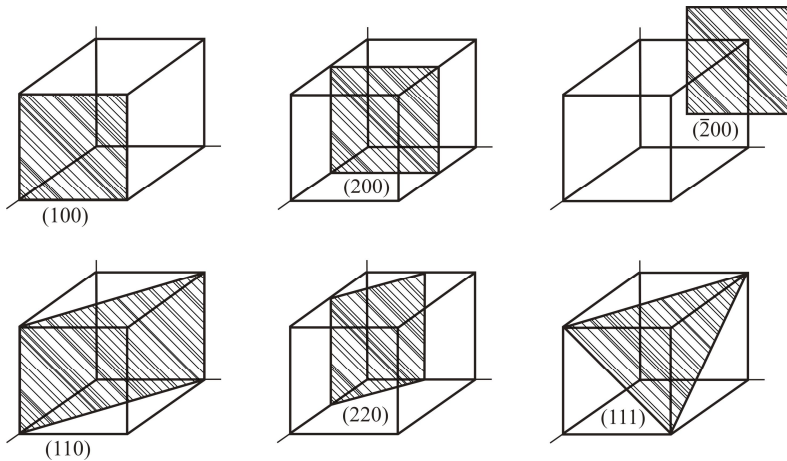


Рис. 4.14. Плоскости (100) , (200) , $(\bar{2}00)$, (110) , (220) и (111) в элементарной ячейке

Для определения атомной структуры твердых тел используют дифракцию рентгеновских лучей, электронов и нейтронов. Все эти методы основаны на общих принципах дифракции волн при прохождении через кристаллическое вещество, являющееся своеобразной дифракционной решеткой, параметр которой по порядку величины равен среднему межатомному расстоянию (порядка долей нанометра).

Дефекты кристаллической структуры. В состоянии термодинамического равновесия расположение частиц (атомов, ионов, молекул), образующих идеальный кристалл, характеризуется строгой трехмерной периодично-

стью. Однако реальные кристаллы в силу нарушения условий термодинамического равновесия в процессе их получения всегда отличаются от идеальных наличием многочисленных нарушений периодичности решетки.

Любое локальное отклонение от периодической структуры кристалла называется дефектом кристаллической структуры. Наличие таких дефектов всегда искажает кристаллическую решетку в их окрестности. Эти искажения характеризуются изменением координации атомов, нарушением длин и углов межатомных связей, внедрением инородных атомов, образованием чужеродных фаз и т. д.

Малая подвижность и большое (практически бесконечное) время жизни дефектов структуры при обычных условиях позволяют описывать их с помощью наглядных геометрических образов. Классификацию дефектов обычно осуществляют по числу измерений, в которых нарушения структуры кристалла простираются на расстояния, превышающие характерные параметры решетки. По этому признаку выделяют четыре класса дефектов: точечные (нуль-мерные), линейные (одномерные), поверхностные (двумерные) и объемные (трехмерные).

Точечные дефекты. Под точечными дефектами понимаются нарушения периодичности в изолированных друг от друга точках кристаллической решетки. При этом размеры искажений решетки в окрестности точечных дефектов не превышают нескольких межатомных расстояний во всех трех кристаллографических направлениях.

К простым точечным дефектам относятся, в первую очередь, так называемые собственные дефекты кристаллической решетки – вакансии (рис. 4.15, *а*) и атомы в междоузлиях (рис. 4.15, *б*).

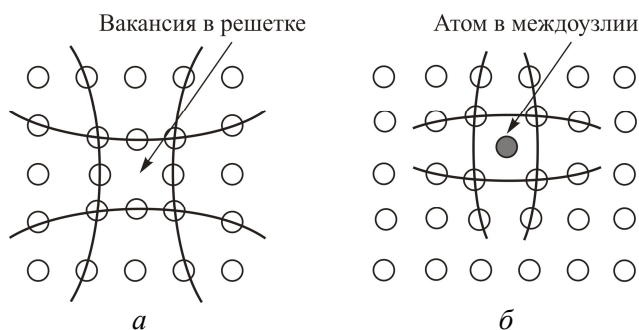


Рис. 4.15. Схематическое изображение вакансии (*а*) и междоузельного атома (*б*)

Важными типами точечных дефектов являются атомы примесей, находящиеся в узлах кристаллической решетки (примесь замещения, рис. 4.16, *а*, 1, 2) или в междоузлиях (примесь внедрения, рис. 4.16, *а*, 3). К точечным дефектам относят также некоторые сочетания элементарных точечных дефектов, такие как вакансия-атом в междоузлии (*дефект по*

Френкелю), вакансия-атом на поверхности (*дефект по Шоттки*), двойные и тройные вакансии, комплексы вакансии – примесь и т. д.

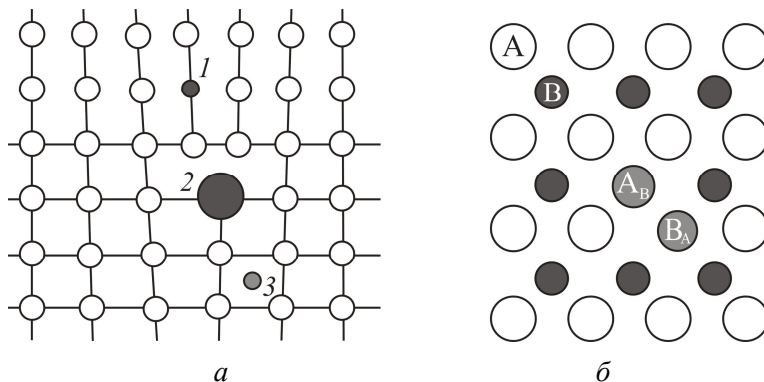


Рис. 4.16. Схематическое изображение простых точечных дефектов в одноатомной (а) и двухатомной (б) кристаллических решетках: 1 – примесный атом замещения малого радиуса; 2 – примесный атом замещения большого радиуса; 3 – примесный атом внедрения

К простым точечным дефектам относят также так называемые антиструктурные дефекты, встречающиеся в химических соединениях АВ, решетка которых состоит из двух подрешеток типа А и В (рис. 4.16, б). Антиструктурным называют точечный дефект, который получается, когда атом одного из компонентов соединения, например А, занимает узел не в своей подрешетке, а в подрешетке другого компонента соединения – В (символ антиструктурного дефекта A_B).

Еще раз подчеркнем, что поскольку введение точечного дефекта всегда вызывает искажение кристаллической решетки в его окрестности (см. рис. 4.15), то в понятие точечного дефекта входит вся эта искаженная область кристаллической решетки. Точечные дефекты обычно имеют тепловую или радиационную природу. Энергии образования точечных дефектов обычно составляют несколько электрон-вольт: для вакансий в германии ~ 2 эВ, в кремнии $\sim 2,3$ эВ, в меди ~ 1 эВ, для атомов в междоузлии в меди ~ 2.4 эВ, для дефектов по Шоттки для NaCl ~ 2 эВ и для дефектов по Френкелю для NaCl $\sim 1,5$ эВ.

Линейные дефекты. К линейным дефектам относятся нарушения периодичности кристаллической решетки, которые простираются в одном из измерений на много межатомных расстояний, а в двух других – лишь на несколько межатомных расстояний (как у точечных дефектов). Основные типы линейных дефектов: дислокации (краевые и винтовые), нано- и микротрещины, а также цепочки точечных дефектов. Линейные дефекты могут иметь как тепловую, так и механическую (возникать в результате пластической деформации) природу.

Краевая дислокация – это линейная область искажения кристаллической решетки на границе полуплоскости, возникающей в кристаллической решетке (рис. 4.17) при приложении напряжения сдвига τ , перпендикулярного *линии дислокации*.

Если сдвиг был неполным и не прошел до конца кристалла, дислокацию можно представить как некоторую область в окрестности границы сдвинутой и несдвинутой областей. Образующаяся в верхней половине кристалла «лишняя» незавершенная плоскость называется экстраплоскостью. Край этой полуплоскости и будет совпадать с линией краевой дислокации. Как следует из рис. 4.17, линия краевой дислокации перпендикулярна направлению сдвига и плоскости чертежа.

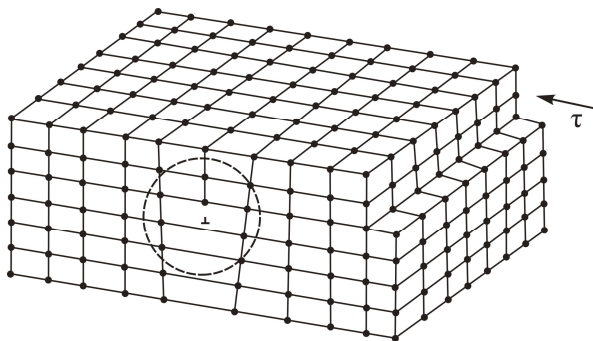


Рис. 4.17. Трехмерная схема кристаллической решетки с краевой дислокацией, возникающей под действием напряжения сдвига τ , перпендикулярного оси дислокации

Если экстраплоскость находится в верхней части кристалла, то дислокацию принято условно называть положительной, если в нижней, – отрицательной. Знак дислокации позволяет оценить результат их взаимодействия. Эксперименты показывают, что дислокации одного знака отталкиваются, а противоположного – притягиваются. Притяжение двух дислокаций разных знаков сопровождается их аннигиляцией (исчезновением), поскольку в этом случае две встречающиеся полуплоскости образуют полную плоскость.

Винтовая дислокация – это область искажения кристаллической решетки (рис. 4.18), которая возникает в кристалле в случае приложения напряжения сдвига τ , параллельного линии Д–В. В результате действия такого напряжения происходит частичный сдвиг атомных слоев, который нарушает параллельность этих слоев в окрестности линии Б–В, называемой линией винтовой дислокации. Атомы кристалла, сдвинутые из равновесных положений, как бы закручиваются вдоль линии Б–В по винтообразной линии.

Линия дислокации отделяет сдвинутую часть кристалла от той, где сдвиг еще не происходил. Винтовая дислокация, образованная вращением по часовой стрелке, называется правой, а против часовой стрелки – левой. Как следует из рис. 4.17, вдоль линии краевой дислокации кристаллическая решетка искажена, что вызывает образование поля напряжений. В результате выше линии дислокации решетка сжата, а ниже – растянута.

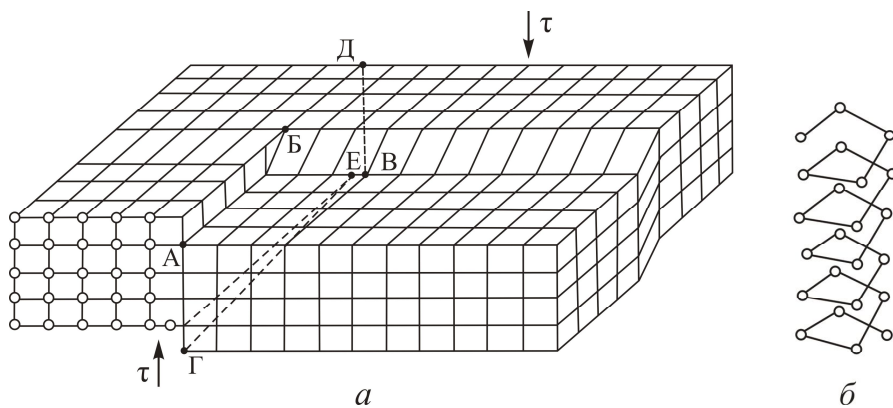


Рис. 4.18. Схема возникновения винтовой дислокации (а) и расположение атомов вдоль ее оси (б) при сдвиге одной части кристалла относительно другой при приложении сдвигового напряжения τ параллельно линии дислокации

Дислокации образуются как в процессе кристаллизации, так и вследствие пластической деформации и фазовых превращений. Плотность дислокации может достигать большой величины. Под плотностью дислокации обычно понимают суммарную длину дислокации, приходящуюся на единицу объема. Для обнаружения дислокаций часто используют метод травления полированных поверхностей (граней) монокристаллов. В этом случае плотность дислокаций определяется как концентрация ямок травления на единицу поверхности.

Двумерные дефекты. Двумерные, или поверхностные, дефекты простираются в кристалле в двух измерениях на расстояния, во много раз превышающие характерные значения параметра решетки, а в третьем измерении – лишь на несколько межатомных расстояний. К двумерным дефектам относятся поверхность кристалла, дефекты упаковки, а также внутренние границы раздела (границы зерен, межфазные границы). Дефекты упаковки возникают при смене чередования гексагональной и кубической плотнейших упаковок в кристалле.

Внутренние границы раздела обычно представляют собой места согласования кристаллических решеток двух соседствующих областей поликристаллического вещества. В качестве таких границ раздела могут рассматриваться межфазные границы в неоднородных сплавах, а также границы зерен (межкристаллитные) в поликристаллических материалах. В последнем случае кристаллические решетки соседствующих зерен в поликристалле разориентированы.

Строение границ зерен оказывает большое влияние на свойства кристаллов. Границы зерен взаимодействует с дислокациями, находящимися внутри зерен. В зависимости от расположения дислокаций относительно границы и знака дислокации могут возникать силы притяжения и отталки-

вания. Границы зерен притягивают к себе точечные дефекты, расположенные в нескольких межатомных расстояниях. Атмосферы из примесных атомов тормозят миграцию границ.

Двумерные дефекты возникают, как правило, в процессе роста кристалла из-за локальных нарушений условий термодинамического равновесия.

Объемные дефекты. К объемным дефектам можно отнести микро- и нанопустоты, а также включения второй фазы, размеры которых существенно превышают характерные значения параметров решетки во всех трех измерениях. Объемные дефекты возникают, как правило, в процессе роста кристалла из-за локальных нарушений условий термодинамического равновесия, а также при интенсивной пластической деформации, термической обработке и других внешних воздействиях.

Колебательный характер теплового движения атомов. При конечной температуре атомы кристаллической решетки всегда колеблются около положений равновесия – узлов ПР. В результате в кристалле, находящемся в тепловом равновесии с окружающей средой, устанавливается стационарное состояние колебаний в виде стоячих или бегущих волн.

Характер этих колебаний зависит от симметрии (структуры) кристалла, числа атомов в его элементарной ячейке, типа химической связи, а также от вида и концентрации дефектов кристаллической решетки. Смещения атомов из положения равновесия в процессе тепловых колебаний тем больше, чем выше температура, но они гораздо меньше постоянной решетки вплоть до температуры плавления, когда твердое тело превращается в жидкость.

Силы, которые стремятся удержать атомы в положениях равновесия, в первом приближении можно считать пропорциональными их относительным смещениям, как если бы они были связаны друг с другом упругими пружинками. Представление кристалла в виде совокупности частиц, связанных идеально упругими силами, называется *гармоническим приближением*. Согласно этому приближению, тепловые колебания атомов в решетке приводят к распространению по ней системы упругих волн смещений атомов из положения равновесия. В кристалле, состоящем из N одинаковых атомов, существует $3N$ таких волн, называемых нормальными (либо собственными) колебаниями, или модами.

Как известно, корпускулярно-волновой дуализм квантовых частиц (атомов) позволяет записать связь между характеристиками волны и характеристиками частицы в виде

$$\varepsilon = h\nu, \quad \vec{p} = h\vec{k}.$$

В такой записи соотношения де Бройля слева стоят корпускулярные характеристики волны-частицы (кинетическая энергия ε и импульс \vec{p}), а

справа – волновые характеристики (частота ν и волновой вектор \vec{k}). Применительно к колебаниям атомов в кристалле волны-частицы (точнее квазичастицы) получили название *фононов*. Движение таких волн-частиц в кристаллах описывается уравнением Шредингера и подчиняется законам квантовой механики. Статистическая теория кристалла в гармоническом приближении изложена в Т. 1 (п. 2.31).

4.2. Зонная модель кристаллов

Кристаллические твердые тела сильно различаются по своим электрическим свойствам. К примеру, металлы очень хорошо проводят электрический ток и их принято считать проводниками. *Проводники* обладают высокой удельной электрической проводимостью при нормальной температуре. В то же время некоторые кристаллы ток практически не проводят и их принято считать изоляторами или диэлектриками. *Диэлектрики* обладают очень высоким электросопротивлением: их основное свойство – способность к поляризации и возможность существования в них за счет этого внутреннего электростатического поля. *Полупроводники* являются промежуточными по электропроводности материалами между диэлектриками и проводниками. Для них особенно характерны сильная зависимость удельной проводимости от концентрации и типа примесей, а также в большинстве случаев сильное влияние на свойства внешних энергетических воздействий (температуры, давления, освещенности и т. д.).

Сильные различия в электропроводности между металлическими, полупроводниковыми и диэлектрическими материалами обусловлены особенностями распределения по энергиям (энергетического спектра) электронов в кристаллах. На вид этого распределения существенное влияние оказывает периодическое расположение атомов кристаллического вещества в пространстве, формирующее, в частности, трехмерный периодический потенциал, в поле которого и движутся свободные электроны. Характер движения электронов в большой степени зависит также от их взаимодействия с кристаллической решеткой и между собой.

Данный раздел посвящен рассмотрению энергетического спектра электронов в кристалле и движения электронов в периодическом потенциале кристаллической решетки, который позволит в дальнейшем объяснить электрические свойства разных типов кристаллов и причины того, что все кристаллы делятся на проводники электрического тока (металлы), плохие проводники (изоляторы) и полупроводники.

4.2.1. Классическая модель свободных электронов (модель Друде – Лорентца). Теплопроводность электронного газа. Закон Видемана – Франца

Первая модель, описывающая электронные свойства кристаллов (в частности, их электрическую проводимость), была создана для металлов и получила название *модели Друде*. Теория Друде исходит из модели металлического кристалла как системы из N неподвижных положительно заряженных ионов решетки, которая погружена в электронный газ (рис. 4.19) из n_0 свободных электронов, подчиняющихся законам классической статистики Максвелла – Больцмана.

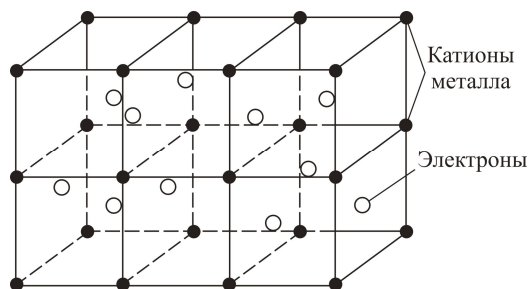


Рис. 4.19. Модель свободного электронного газа в металлическом кристалле

Согласно модели Друде, электрическое сопротивление металлических кристаллов обусловлено рассеянием электронов, движущихся под действием электрического поля, на неподвижных ионах решетки. При этом теория Друде исходит из следующих предположений при описании хаотического движения электронов в кристалле при отсутствии электрического поля:

1. В интервале между двумя последовательными столкновениями с ионами электроны движутся по прямой линии с классическими средними скоростями. Это означает, что никаких взаимодействий кулоновского типа с ионами и другими электронами нет (это называется приближением независимых свободных электронов).

2. Столкновения электронов с ионами рассматриваются как мгновенные случайные события, внезапно меняющие скорость электронов от некоторого среднего значения до нуля.

3. Полагается, что за единицу времени электрон испытывает столкновение с вероятностью $1/\tau$, где τ – среднее время свободного пробега электрона между двумя последовательными столкновениями.

4. Считается, что электроны приходят в равновесие с кристаллом только благодаря столкновениям с ионами кристаллической решетки.

Указанные предположения означают, что при отсутствии внешнего электрического поля электроны движутся случайным образом в пространст-

ве и не имеют какого-либо преимущественного направления движения. Такое движение называется *хаотическим*.

В случае приложения к кристаллу внешнего электрического поля на это хаотическое движение накладывается вторая составляющая – упорядоченное движение свободных электронов, которая называется дрейфом электронов в электрическом поле. Именно дрейф электронов и обеспечивает электропроводность кристаллов.

Удельная электропроводность. Рассмотрим группу электронов n_0 , движущихся в электрическом поле напряженностью E с момента его включения ($t = 0$). Поскольку, согласно сделанному выше предположению 3, вероятность столкновения электрона с ионом равна $1/\tau$, число электронов, не испытавших столкновения к моменту времени t ,

$$n_t = n_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right).$$

Отсюда следует, что скорость уменьшения числа электронов, не испытавших столкновения с атомами к некоторому моменту времени t , будет равна

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{n_0}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) = -\frac{n_t}{\tau}.$$

По классической теории электропроводности Друде на электрон, движущийся в электрическом поле напряженностью E , действует сила $F = eE$, которая сообщает ему ускорение $a = F/m = eE/m$, где m – масса свободного электрона, e – заряд электрона. Под действием этой силы электрон ускоряется, однако возрастание скорости, согласно модели Друде, не может длиться до бесконечности из-за столкновений электронов с ионами кристаллической решетки и дефектами. Рассеяние электронов ионами приводит к тому, что приобретённая в направлении электрического поля скорость падает практически до нуля после каждого столкновения. В результате таких столкновений циклы «ускорение – рассеяние» электронов многократно повторяются.

Среднее расстояние l , пролетаемое электроном от столкновения до столкновения, называется средней длиной свободного пробега. Поскольку это расстояние электрон проходит за время τ , последнее называется средним временем свободного пробега. Таким образом, скорость, сообщаемая электрону электрическим полем за время t , не превышает

$$\vec{v}_t = -\frac{e\vec{E}t}{m} = \vec{a}t.$$

Это есть дополнительное увеличение скорости электронов (вследствие действия электрического поля), не испытавших столкновения с атомами к моменту времени t . Отсюда следует, что вектор перемещения (дрейфа) электрона в направлении вектора электрического поля равен

$$\bar{x}_t = -\frac{e\vec{E}t^2}{2m} = \frac{\bar{a}t^2}{2}$$

(этот дрейф накладывается на беспорядочное тепловое движение).

Средний суммарный путь (суммарное перемещение) в направлении вектора электрического поля для каждого из n_t электронов, не испытавших столкновений с ионами к моменту времени t , составит

$$\begin{aligned} \langle \bar{x}_t \rangle &= \int_0^n \bar{x}_t dn = \int_0^\infty \bar{x}_t \left(\frac{dn}{dt} \right) dt = -\frac{e\vec{E}n_0}{2m\tau} \int_0^\infty t^2 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) dt = \\ &= -\frac{e\vec{E}n_0\tau^2}{m} \int_0^\infty \frac{1}{2} y^2 \exp(-y) dy = -\frac{e\vec{E}n_0\tau^2}{m} = \bar{v}_d \tau n_0. \end{aligned}$$

Средняя скорость v_d , которую приобретают носители заряда под действием электрического поля (эта скорость называется дрейфовой) при равноускоренном движении из состояния покоя, равна половине максимальной, т. е. $v_d = 0,5eE\tau/m$. Более строгий вывод, учитывающий распределение свободных электронов в кристалле по энергиям, приводит к выражению

$$\bar{v}_d = -\frac{e\vec{E}\tau}{m}. \quad (4.2.1)$$

Поскольку, согласно модели Друде, для потери электроном приобретённой в электрическом поле скорости достаточно одного столкновения, то

$$\tau = \frac{l}{v}, \quad (4.2.2)$$

где $v = v_T + v_d$ – полная скорость электрона, складывающаяся из тепловой v_T и дрейфовой v_d , причём обычно $v_T \gg v_d$. Заметим, что в классической модели Друде длина свободного пробега l электрона не зависит от температуры и определяется соотношением

$$l \approx \frac{1}{\pi R^2 N}, \quad (4.2.3)$$

где N – число центров упругого рассеяния электронов (равное концентрации атомов в кристалле), а πR^2 – сечение рассеяния электрона на неподвижном атоме радиуса R .

Полная плотность потока электронов (плотность электрического тока), движущихся вдоль электрического поля, может быть найдена как произведение заряда электронов на дрейфовую скорость

$$\vec{j} = \frac{ne^2\tau}{m} \vec{E} = \sigma \vec{E}. \quad (4.2.4)$$

Это выражение называется *законом Ома в дифференциальной форме*. Коэффициент σ перед вектором поля в соотношении (4.2.4), называемый удельной электрической проводимостью электронного газа по Друде, будет равен

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}. \quad (4.2.5)$$

Величину дрейфовой скорости в электрическом поле единичной напряженности

$$\mu = \frac{e\tau}{m} = \frac{\vec{v}_d}{\vec{E}} \quad (4.2.6)$$

принято называть *подвижностью электронов*. Отсюда можно получить второе соотношение для проводимости газа свободных электронов, следующее из модели Друде:

$$\sigma = ne\mu. \quad (4.2.7)$$

Подставляя (4.2.2) в (4.2.5), получим температурную зависимость проводимости классического электронного газа Друде в виде

$$\sigma = \frac{ne^2}{m} \frac{l}{\sqrt{\frac{3kT}{m}}} = \frac{ne^2l}{\sqrt{3kTm}}. \quad (4.2.8)$$

Как будет показано далее, такой вид зависимости $\sigma(T)$ не совпадает с экспериментальной.

Теплоемкость и теплопроводность классического электронного газа в модели Друде. Согласно распределению Максвелла – Больцмана, которому должен подчиняться газ из n свободных электронов в модели Друде, на каждую степень свободы электрона должна приходиться энергия $kT/2$. Это

означает, что теплоемкость как производная кинетической энергии электронного газа по температуре должна быть равна

$$C_e = \frac{dU}{dT} = \frac{3}{2}kn, \quad (4.2.9)$$

где k – постоянная Больцмана.

Наиболее впечатляющим успехом модели Друде явилось объяснение эмпирического закона Видемана и Франца. Этот закон утверждает, что отношение теплопроводности λ_e к электропроводности (λ_e/σ) для большинства металлов прямо пропорционально температуре, причем коэффициент пропорциональности с достаточной точностью одинаков для всех металлов.

Рассчитаем теплопроводность электронного газа, полагая, что основная часть теплового потока в металле переносится электронами проводимости, которые подчиняются классической статистике. Подставляя в коэффициент теплопроводности идеального электронного газа

$$\lambda_e \approx \frac{1}{3} \langle v_T \rangle^2 \tau C_e,$$

где C_e – теплоемкость классического электронного газа в единице объема металла, выражение (4.2.9), получим

$$\lambda_e = \frac{1}{2}nk\tau \frac{3kT}{m} = \frac{3nk^2}{2m} \tau T. \quad (4.2.10)$$

Отсюда легко вывести соотношение

$$L = \frac{\lambda_e}{\sigma T} = \frac{\frac{3}{2} \frac{nk^2\tau T}{m}}{\frac{ne^2\tau}{m} T} = \frac{3}{2} \left(\frac{k}{e} \right)^2 = \text{const} \quad (4.2.11)$$

– закон Видемана – Франца. Легко рассчитать, что константа L в этом соотношении, получившая название числа Лорентца, равна $1,11 \cdot 10^{-8}$ Вт/(Ом·К²).

Кинетическое уравнение Больцмана. Несовпадение вида расчетной и экспериментальной зависимостей $\sigma(T)$ для металлов заставило внести некоторые изменения в модель Друде путем учета влияния электрического поля на функцию распределения электронов по скоростям (энергиям). Согласно Лорентцу, скорость изменения функции распределения электронов f по скоростям после включения электрического поля можно рассматривать как сумму двух членов

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_d + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{cr}}, \quad (4.2.12)$$

где слагаемое

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_d \approx - \frac{e\vec{E}}{m} \frac{\partial f}{\partial \vec{v}}$$

называется дрейфовым членом, а

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{cr}} \approx \frac{f - f_0}{\tau_r}$$

– столкновительным членом. Параметр τ_r в этом случае принято называть временем релаксации электронов: это время, за которое электронная система приходит в равновесие с кристаллической решеткой путем столкновения электронов с ионами металлического кристалла. Функция f_0 есть невозмущенная функция Максвелла – Больцмана в отсутствие электрического поля (ср. п. 3.3, Т. 1).

В стационарном случае уравнение (4.2.12) переходит в известное кинетическое уравнение Больцмана для электронного газа

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{e\vec{E}}{m} \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} + \frac{f_0 - f}{\tau_r} = 0.$$

Если считать, что функция распределения по скоростям в электрическом поле не меняется $\left(\frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \frac{\partial f_0}{\partial \vec{v}} \right)$, то

$$\frac{e\vec{E}}{m} \frac{\partial f_0}{\partial \vec{v}} = - \frac{f_0 - f}{\tau_r}. \quad (4.2.13)$$

Из этого уравнения можно получить выражение для возмущенной электрическим полем функции распределения Больцмана для стационарного состояния

$$f \cong f_0 + \frac{e\vec{E}}{m} \frac{\partial f_0}{\partial \vec{v}} \tau_r. \quad (4.2.14)$$

В уточненной модели Друде – Лорентца время релаксации электрона принимается равным $\tau_r = A \langle v_T \rangle^j$. Здесь A имеет смысл средней длины свободного пробега l , если $j = -1$, что соответствует упругому механизму

рассеяния электронов на нейтральных (незаряженных) ионах. При упругом рассеянии электронов на неподвижных ионах кристаллической решетки A совпадает с выражением (4.2.2) и тогда время релаксации зависит от скорости, но не зависит от ее направления:

$$\tau_r = \frac{l}{\langle v_T \rangle} = \tau. \quad (4.2.15)$$

В направлении электрического поля (ось x) плотность тока равна

$$J_x = -\iiint ev_x f dv_x dv_y dv_z, \quad (4.2.16)$$

где функция распределения f имеет вид (4.2.14).

Так как $J_x = \sigma E_x$, то, поскольку вклад в интеграл (4.2.16), содержащий f_0 , равен нулю,

$$J_x = \sigma E_x = -\iiint \left(\frac{E_x e^2}{m} \right) \tau_r v_x \left(\frac{\partial f}{\partial v} \right) dv_x dv_y dv_z.$$

Используя (4.2.15), получим соотношение, практически совпадающее с приведенной выше формулой Друде (4.2.5):

$$\sigma = \frac{4ne^2 l}{3(2\pi mkT)^{1/2}} = \left(\frac{3\pi}{8} \right)^{1/2} \frac{ne^2 \tau}{m}. \quad (4.2.17)$$

Модель свободных электронов Друде – Лорентца, несмотря на явную упрощенность, позволила объяснить закон Ома (4.2.4) и качественно понять некоторые экспериментальные данные по энергии связи, электропроводности (щелочных металлов), теплопроводности, закон Видемана – Франца и т. д. Однако при сопоставлении с экспериментальными данными выявились и существенные расхождения между теорией и экспериментом.

Теория Друде позволяет оценить значения времен релаксации, длины свободного пробега и подвижности электронов из измерений проводимости и эффекта Холла. Согласно оценкам, $\tau \approx 10^{-14} - 10^{-15}$ с, а длина свободного пробега $l \approx 0,1 - 1$ нм (при $v_{cp} \sim 10^5$ м/с). Однако эксперименты показали, что для очень чистых металлов величина l может достигать при понижении температуры ~ 1 см, что совершенно непонятно с точки зрения теории Друде. Кроме того, температурные зависимости проводимости в металлах имели другой вид по сравнению с формулами Друде (4.2.8) либо Друде – Лорентца (4.2.17).

Экспериментальные данные по классической теплоемкости также существенно расходятся с предсказаниями модели Друде, поскольку теплоемкость электронной подсистемы оказалась не постоянной, согласно формуле (4.2.9), а пропорциональной температуре T . При этом ее величина, например при комнатной температуре, была меньше предсказываемой на два порядка.

Проведенные измерения эффекта Холла для особо чистых веществ и при низких температурах показали, что найденные из эксперимента величины n для щелочных (одновалентных) металлов близки к значению концентрации n_0 , соответствующему одному электрону на атом. У благородных металлов (также одновалентных) величина $n/n_0 = 1,3-1,5$. В то же время у двухвалентных Be и Mg оказалось, что $n/n_0 = 0,2-0,4$ и при этом R_H имела положительное значение! Кроме того, такие измерения выявили для ряда металлов зависимость R_H от величины магнитного поля. Например, у трехвалентных Al и In постоянная R_H меняет знак, так что при достаточно сильных магнитных полях $n/n_0 = -0,3$.

Таким образом, исследования показали, что, согласно модели Друде, невозможно объяснить ряд свойств металлических кристаллов, в частности, отличие измеренных значений концентрации электронов от их величин, соответствующих валентности металлов 2-й и 3-й групп таблицы Менделеева, положительный знак R_H для некоторых металлов (в этой модели положительного знака вообще не может быть!). Кроме того, модель Друде не согласуется с обнаруженной зависимостью R_H от H и дает неправильную температурную зависимость электропроводности и теплоемкости газа свободных электронов. Более того, с помощью этой модели нельзя объяснить в принципе деление материалов на металлы и диэлектрики.

4.2.2. Квантовая теория свободных электронов (модель Зоммерфельда)

Недостатки классической модели Друде – Лорентца были устранены в квантовой теории свободных электронов в металлах, развитой А. Зоммерфельдом. В модели Зоммерфельда используется идея квантования кинетической энергии свободных электронов, принцип Паули и квантовая статистика Ферми – Дирака.

Закон дисперсии электронов в кристалле. Согласно гипотезе де Бройля, движение обобществленных свободных электронов в электрическом поле, создаваемом ионами кристаллической решетки металла, в приближении слабой связи можно рассматривать как движение практически свободных частиц. В этом случае выражение для кинетической энергии свободного электрона, имеющего импульс p и массу m , может быть записано в виде

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

где $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число. По модели Зоммерфельда металлический кристалл может быть заменен неким прямоугольным потенциальным ящиком (рис. 4.20, *a*), в котором свободные электроны можно считать невзаимодействующими частицами идеального газа, обладающими параболическим законом дисперсии (рис. 4.20, *б*). При этом электроны имеют дискретный энергетический спектр и занимают энергетические уровни (рис. 4.20, *a*) не более чем по два электрона на уровень (вследствие принципа Паули). Самый высший энергетический уровень, который электроны в металле могут занять при $T = 0$ К, называется уровнем Ферми ε_F .

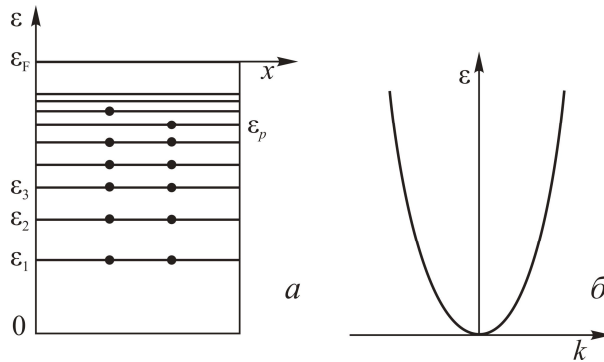


Рис. 4.20. Система энергетических уровней (*a*) и параболический закон дисперсии (*б*) электронов проводимости в металле

Другими словами, движение свободного электрона может быть интерпретировано как распространение плоской волны со скоростью $v = \hbar k/m$. График функции $\varepsilon(k)$ имеет такой же вид, как и $\varepsilon(p)$. При этом в силу параболическости закона дисперсии для свободных электронов в металле (рис. 4.20) распределение электронов по состояниям в k -пространстве характеризуется сферической симметрией.

Уровень Ферми электронов в металлах. Согласно модели Зоммерфельда, при температуре $T = 0$ К все n электронов в металлическом кристалле стремятся занять состояния с наименьшими значениями энергии ε с соблюдением принципа Паули (не более двух электронов с противоположными спинами на одно состояние). В таком случае, вследствие параболического закона дисперсии электронов в металлическом кристалле, при отсутствии внешнего электрического поля все занятые состояния электронов в k -пространстве окажутся внутри шара радиусом k_F . Поверхность этого шара называется поверхностью Ферми, а отвечающая ей максимальная энергия электронов и есть энергия Ферми.

Легко показать, что энергия Ферми зависит от концентрации свободных электронов n и при $T = 0$ вычисляется по формуле (см. Т. 1, п. 2.23)

$$\varepsilon_F = \frac{h^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2m}, \quad (4.2.18)$$

откуда следует, что $k_F \sim n^{1/3}$. Отметим, что для всех металлов при всех температурах, включая температуру их плавления, энергия Ферми в 50–200 раз превосходит величину тепловой энергии kT . Поэтому электронный газ в металлах рассматривают как сильно вырожденный электронный Ферми-газ.

Можно определить температурную зависимость уровня Ферми. Как показывают расчеты, энергия Ферми растет при увеличении температуры (см. Т. 1, п. 2.23):

$$\varepsilon_F(T) = \varepsilon_F(0) \left[1 - \left(\frac{\pi^2}{12} \right) \left(\frac{kT}{\varepsilon_F(0)} \right)^2 \right], \quad (4.2.19)$$

где энергия Ферми $\varepsilon_F(0)$ при $T = 0$ К дается соотношением (4.2.18). Слабая зависимость уровня Ферми от температуры и означает, что увеличение температуры ведет лишь к незначительному ($\sim kT$) размытию функции Ферми – Дирака.

Итак, суть модели Зоммерфельда состоит в том, что свободные электроны в металле можно считать невзаимодействующими частицами идеального газа, находящимися в прямоугольной потенциальной яме (рис. 4.20). Поскольку электроны являются фермионами, при абсолютном нуле температуры они будут последовательно заполнять энергетические уровни вплоть до уровня Ферми, который и определит максимальную кинетическую энергию электронов в металле. Таким образом, в металле уровень Ферми $\varepsilon_F(0)$ определяет границу между заполненными и незаполненными состояниями.

Вследствие этого при абсолютном нуле функция f_{F-D} имеет ступенчатый вид, а при увеличении температуры распределение Ферми «размазывается» на ширину $2kT$ (см. рис. 2.15, Т. 1), так как часть электронов, лежащих ниже уровня Ферми, переходит на более высокие энергетические уровни за счет теплового возбуждения, освобождая состояния, лежащие ниже ε_F . В то же время основная часть электронов остается совершенно нечувствительной к весьма существенным изменениям температуры. При этом величина энергии Ферми однозначно определяется концентрацией электронов. Зависимость $\varepsilon_F(0)$ от n нелинейная.

Такой подход к описанию электронного газа в металлах позволил устранить некоторые недостатки классических моделей Друде и Друде –

Лорентца. Например, были поняты причины отсутствия вклада электронов в теплоемкость кристалла при температурах порядка T_D и выше и т. д.

Металлическая проводимость в модели Зоммерфельда. Отмеченные выше недостатки классических моделей в описании электропроводности металлов были исключены за счет использования в модели Зоммерфельда квантовой функции Ферми – Дирака (п. 2.22, Т. 1) для распределения электронов по энергиям. Согласно модели Зоммерфельда, при увеличении температуры распределение Ферми «размазывается» лишь незначительно, так что основная часть электронов при нагреве металлического кристалла остается совершенно нечувствительной к весьма существенным изменениям температуры, т. е. не участвует в формировании электропроводности (и теплоемкости) кристалла.

Используя статистику Ферми – Дирака вместо распределения Максвелла – Больцмана в кинетическом уравнении Больцмана, можно найти выражение для проводимости. Как оказалось, в этом случае получается такая же, как и в модели Друде – Лорентца, формула

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_r}{m}. \quad (4.2.20)$$

Однако здесь время τ_r называется временем релаксации и имеет совершенно другой смысл. Оно определяется соотношением

$$\tau_r = \frac{l(\varepsilon_F)}{v(\varepsilon_F)}$$

и относится только к электронам с концентрацией порядка $kTn/\varepsilon_r(0)$, которые имеют энергию вблизи энергии Ферми при $T = 0$ К. Тогда из (4.2.20) следует

$$\sigma = \frac{ne^2l(\varepsilon_F)}{mv(\varepsilon_F)} = \frac{ne^2l(\varepsilon_F)}{\sqrt{2m\varepsilon_F}}, \quad (4.2.21)$$

где скорость Ферми $v(\varepsilon_F) = \sqrt{2\varepsilon_F/m} \approx 10^6$ м/с существенно выше, чем тепловая скорость классического электронного газа.

Такой подход дал возможность Э. Грюнайзену теоретически получить температурную зависимость проводимости, близкую к экспериментальным.

Модель Зоммерфельда позволила снять часть противоречий и объяснить недостатки классических моделей электронного газа, в частности понять, почему не все свободные электроны могут принимать участие в переносе энергии и давать вклад в электрический ток, а также правильно рассчитать закон термоэлектронной эмиссии и температурную зависимость

электропроводности металлических кристаллов типа $\sigma \sim T^{-n}$, где $n = 3-5$ при низких температурах и $n = 1$ для высоких температур. Однако остались невыясненными принципиально разный температурный ход электрической проводимости в металлах (степенной) и диэлектриках (экспоненциальный), положительный знак эффекта Холла у некоторых кристаллических веществ, а также высокая чувствительность полупроводников к внешним воздействиям (температуре, радиации, свету, магнитным и электрическим полям и т. д.).

4.2.3. Зонная модель электронов в кристаллах

Приближение сильной связи. Рассмотрим, что происходит с энергией электронов в атомах, которые сначала находятся на больших расстояниях r , а затем сближаются до расстояния r_0 , которое соответствует равновесному межатомному расстоянию в кристалле порядка 10^{-10} м. В удаленных (не взаимодействующих) атомах полная энергия электронов принимает только ряд определенных значений $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots$ (рис. 4.21, а). При $r = r_0$ кривые потенциальной энергии $U(r)$ в промежутках между атомами накладываются друг на друга и потенциальные барьеры, отделяющие электроны в соседних атомах, понижаются (рис. 4.21, б). В результате электроны, находящиеся на самых верхних уровнях (на данном рисунке ε_3), могут свободно перемещаться от атома к атому и поэтому принадлежат всему кристаллу, что и соответствует модели Зоммерфельда.

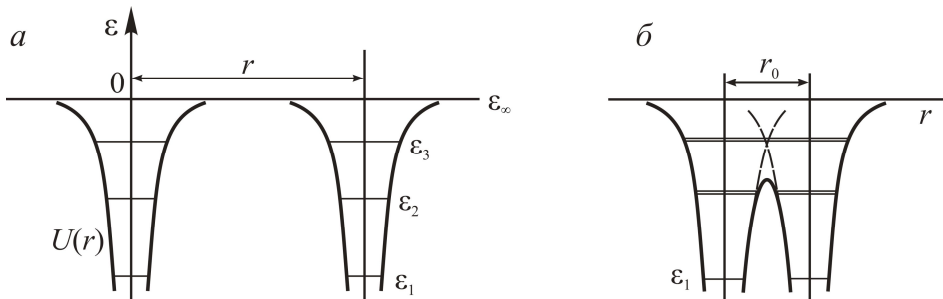


Рис. 4.21. Энергия электронов в изолированных (не взаимодействующих) атомах (а) и в атомах кристаллической решетки (б)

Если число атомов в кристалле равно N , то все электроны, находящиеся на внешних уровнях в изолированных атомах, могли бы оказаться в одном и том же состоянии в кристалле. Однако принцип Паули запрещает нахождение более двух электронов на одном энергетическом уровне. Поэтому вследствие взаимодействия электронов с одинаковых уровней соседних атомов при образовании кристалла происходит изменение энергии этих электронов. В простейшем случае в результате такого взаимодействия уров-

ни внешних электронов (на рис. 4.21 это уровень ϵ_3) расщепляются на N близких подуровней, каждый из которых может быть занят только двумя электронами с противоположными спинами. Это относится и к более высоким (возбужденным) уровням: $\epsilon_4, \epsilon_5, \dots, \epsilon_\infty$. На рис. 4.22 схематически показано, как дискретные уровни N изолированных атомов (при $r \gg 10^{-10}$ см) по мере уменьшения r расширяются в зоны. В каждой зоне в простейшем случае появляются N подуровней, а при $r = r_0$ образуются минимумы энергии.

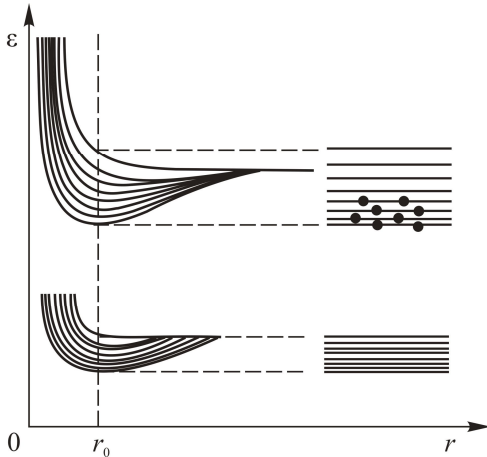


Рис. 4.22. Схема образования энергетических зон кристалла из атомных уровней при сближении атомов (r_0 – равновесное расстояние между атомами в кристалле)

Для валентных электронов ширина разрешенной энергетической зоны составляет несколько электрон-вольт. Отсюда следует, что при типичном значении $N \approx 10^{16} \text{ м}^{-3}$ в кристаллах расстояние между уровнями бесконечно мало ($\Delta\epsilon/N \sim 10^{-22}$ эВ), так что уровни в зоне располагаются настолько близко, что даже при низкой температуре тепловая энергия электронов kT много больше этой величины, т. е. эту зону можно считать зоной квазинепрерывных значений разрешенных энергий.

В результате перемещаться по всему кристаллу могут не только внешние электроны с энергией ϵ_3 , но и электроны, располагающиеся на уровнях ϵ_2 , которые разделены в кристалле невысокими потенциальными барьерами. В результате туннельного эффекта либо за счет тепловой энергии решетки kT эти электроны способны преодолевать указанные барьеры, имеющие ширину порядка 10^{-10} м, и также становятся общими для всего кристалла. Поэтому и в данном случае образуется зона разрешенных энергий, хотя и меньшей ширины.

Электроны, расположенные на более низких энергетических уровнях (типа ϵ_1 на рис. 4.21), отделяются от аналогичных электронов в соседних атомах гораздо более высокими и широкими потенциальными барьерами, поэтому остаются локализованными на своих атомах. Это означает, что глубокий уровень ϵ_1 не расщепляется в зону разрешенных для электронов состояний. Если уровни электронов в атоме ϵ_2 были заполнены электронами,

то в кристалле из них образуется заполненная электронами зона. Если более высокоэнергетичные атомные уровни электронов ϵ_3 в изолированных атомах были свободными при обычных условиях, то из них образуется свободная от электронов зона.

Получение энергетического спектра электронов в кристалле, исходя из наличия уровней энергии в изолированных атомах, называется *приближением сильной связи*. Несмотря на то, что это приближение наиболее справедливо для электронов, находящихся на глубоких уровнях и менее подверженных внешним воздействиям, оно хорошо иллюстрирует (хотя бы качественно) общие закономерности образования энергетических зон при сближении изолированных атомов и образования из них кристаллической решетки.

Таким образом, как следует из приближения сильной связи электронов со своими атомами в кристалле, значения кинетической энергии электронов в кристалле представляют собой систему широких свободных и заполненных зон, которые разделены запрещенными зонами (таких кинетических энергий у электронов быть не может). Подобная форма энергетического спектра электронов называется *зонным энергетическим спектром*. Зонный спектр (см. рис. 4.22) характерен для всех твердых тел и определяет многие свойства кристаллов (электрические, магнитные, оптические и др.).

Электрон в периодическом поле кристалла. Одноэлектронное адиабатическое приближение. Поскольку кристалл состоит примерно из 10^{17} м^{-3} атомов и такого же порядка числа валентных электронов, наиболее полные сведения об электронной подсистеме кристалла можно получить, решив полное уравнение Шредингера с учетом всех видов взаимодействий (каждого электрона с каждым атомом и каждым электроном). Поскольку это сложно, то обычно задачу упрощают. Одно из упрощений при расчете энергетического спектра электронов предполагает, что электронная и решеточная подсистемы движутся независимо друг от друга, т. е. не обмениваются энергией (адиабатическое приближение). Согласно другому упрощению, все электроны ведут себя одинаково в разных элементарных ячейках, а действие ионов и остальных электронов на каждый данный электрон может быть заменено некоторым периодическим потенциальным полем (одноэлектронное приближение).

Одноэлектронное уравнение Шредингера для электрона, движущегося в поле ядра, для стационарного случая запишем как

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = \epsilon\Psi(x), \quad (4.2.22)$$

где потенциал кристаллической решетки, в котором движется свободный электрон, периодичен: $V(x) = V(x + a)$. Поэтому решение для свободного электрона будет иметь вид плоской волны де Бройля

$$\Psi_k(x) = U_k(x)\exp(ikx), \quad (4.2.23)$$

где

$$\Psi_k(x) = \Psi_k(x + Na), \quad U_k(x) = U_k(x + Na).$$

Заметим, что множитель $U_k(x)$ учитывает влияние на электрон периодического кристаллического поля и отражает тот факт, что вероятность нахождения электрона в той или иной области кристалла повторяется от одной элементарной ячейки к другой.

Решение стационарного уравнения Шредингера для модели Кронига – Пенни. Кроме приближения сильной связи существует подход, предложенный Кронигом и Пенни. Он показывает, что наличие зонной структуры энергетического спектра электронов в кристалле является фундаментальным следствием трансляционной симметрии кристаллической решетки. Для простоты в этом подходе рассмотрен случай одномерной кристаллической решетки с периодическим потенциалом

$$V(x) = V(x+a) = V(x+2a) = \dots,$$

который представляет собой совокупность бесконечного числа потенциальных ям шириной b и потенциальных барьеров высотой V_0 и шириной $c = a - b$ (рис. 4.23).

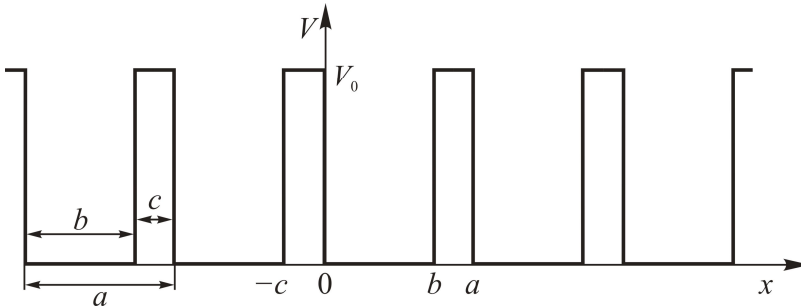


Рис. 4.23. Изменение потенциальной энергии электрона в одноатомной одномерной цепочке с периодически повторяющимися прямоугольными потенциальными ямами в модели Кронига – Пенни

Заметим, что здесь период решетки равен $a = b + c$. Тогда в уравнении (4.2.22) потенциальная энергия электрона будет задаваться соотношением

$$\begin{cases} V(x) = 0 & \text{при } 0 < x < b, \\ V(x) = V_0 & \text{при } b < x < a = b + c \end{cases}$$

и электрон в яме находится на энергетическом уровне $\varepsilon < V_0$. Высота потенциального барьера для электрона имеет значение $\Delta V = V_0 - \varepsilon$, а толщина

барьера – c . Если скорость электрона в атоме равна v , то при движении в яме вдоль цепочки за единицу времени осуществляется v/b подходов к барьеру. Тогда частота переходов электронов n из одной ямы в другую (от одного атома к другому) пропорциональна вероятности туннелирования через потенциальный барьер. Вероятности туннелирования через прямоугольный потенциальный барьер (частота переходов) экспоненциально зависят от ширины потенциального барьера и его высоты:

$$v = \frac{v}{b} \exp\left(-\frac{2h}{c} \sqrt{2m\Delta V}\right). \quad (4.2.24)$$

Оценка по формуле (4.2.24) показывает, что при ширине потенциального барьера $c \sim 10^{-10}$ м, его высоте $V_0 \sim 10$ эВ (по порядку величины это потенциал ионизации изолированных атомов), скорости электрона в атоме $v \sim 10^6$ м/с и радиусе боровской орбиты $b \sim 10^{-10}$ м время нахождения электрона в определенном узле решетки всего лишь $1/v \sim 10^{-15}$ с. Иными словами, электроны внешних атомных оболочек в кристалле не локализуются вблизи определенного узла решетки, а движутся по всему кристаллу со скоростью $v \sim 10^{-10}$ м / 10^{-15} с $\sim 10^5$ м/с.

Для электронов внутренних атомных оболочек потенциальный барьер шире и выше и вероятность туннельного эффекта намного меньше, чем для валентных электронов. Вследствие этого электроны глубоких уровней практически связаны с определенными узлами решетки.

Для выбранного потенциала Кронига – Пенни общее решение уравнения Шредингера будет иметь вид плоской волны с модулированной амплитудой (4.2.23). Общее же решение уравнения Шредингера для электронов в одномерной модели Кронига – Пенни запишется как

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \operatorname{sh}(\beta c) \sin(\alpha a) + \operatorname{ch}(\beta c) \cos(\alpha a) = \cos(k(b+c)), \quad (4.2.25)$$

где $\alpha = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{h^2}}$ и $\beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - \varepsilon)}{h^2}}$.

Выражение (4.2.25) можно значительно упростить, если допустить, что ширина барьера стремится к нулю ($c \rightarrow 0$), а его высота – к бесконечности ($V_0 \rightarrow \infty$), но таким образом, чтобы произведение $V_0 c$ оставалось постоянным ($V_0 c \approx \text{const}$). При этих условиях выражение (4.2.25) преобразуется к

$$p \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ka), \quad (4.2.26)$$

где параметр p характеризует «мощность» потенциальных барьеров, разделяющих области с нулевым потенциалом:

$$p = \frac{mabV_0}{\hbar^2}.$$

Поскольку α – параметр, определяемый энергией ε электрона, а k – волновой вектор электрона, то выражение (4.2.26) фактически представляет собой зависимость $\varepsilon(k)$, т. е. выражает закон дисперсии для электрона в кристаллической решетке.

При $p \rightarrow 0$ (приближение слабой связи) из (4.2.26) получаем $\alpha a = ka$, откуда

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (4.2.27)$$

что соответствует закону дисперсии для случая свободных электронов в модели Зоммерфельда.

Напротив, если $p \rightarrow \infty$ (приближение абсолютно связанных электронов), то энергия электронов становится независимой от k . Как видно из уравнения (4.2.26), разрешенными значениями энергии электронов будут только те, для которых $\sin(\alpha a) = 0$, т. е. $\alpha a = n\pi$. Отсюда энергия электронов дается выражением

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad (4.2.28)$$

где n – целое число. Выражение (4.2.28) соответствует решению уравнения Шредингера для частицы, находящейся в одномерной потенциальной яме шириной a и стенками бесконечной высоты. Уровни энергии частицы в такой яме дискретны, что соответствует случаю изолированных атомов.

Анализ показывает, что если величина p конечна ($p \gg 1$), то электрон будет легче преодолевать потенциальные барьеры в случае, когда его энергия (параметр α) значительно возрастает по сравнению с V_0 , и наступит такой момент, когда электрон будет вести себя как свободный. В промежуточном случае (приближение сильной связи) энергия электронов характеризуется законом дисперсии:

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \left[1 + \frac{2}{p} \left((-1)^n \cos(ka) - 1 \right) \right] = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{p} \right) + \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{pma^2} (-1)^n \cos(ka). \quad (4.2.29)$$

Из этого соотношения следует, что закон дисперсии для электронов является многозначным и состоит из n разрешенных энергетических полос (зон). Выбирая разные значения n (1, 2, 3, ...), получаем набор законов дисперсии для разных энергетических зон:

$$\begin{cases} \varepsilon_0(k) = 0, \\ \varepsilon_1(k) = \frac{h^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{p}\right) - \frac{h^2 \pi^2}{pma^2} \cos(ka), \\ \varepsilon_2(k) = \frac{4h^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{p}\right) + \frac{4h^2 \pi^2}{pma^2} \cos(ka), \\ \varepsilon_3(k) = \frac{9h^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{p}\right) - \frac{9h^2 \pi^2}{pma^2} \cos(ka), \\ \dots \end{cases} \quad (4.2.30)$$

Таким образом, с использованием приближения Кронига – Пенни, доказано, что энергетический спектр электрона в периодическом потенциальном поле, обусловленном трансляционной симметрией решетки, действительно имеет зонную структуру.

Зависимости энергии электронов в кристалле от волнового вектора (квазиимпульса) для разных разрешенных зон типа (4.2.30) схематически представлены на рис. 4.24. Штриховая парабола на рис. 4.24, б соответствует предельному случаю энергии свободного электрона с квадратичным законом дисперсии (4.2.27). Для электрона в кристалле парабола заменяется частями синусоиды, отделенными друг от друга разрывами в энергетическом спектре на границах зон Бриллюэна при $k = \pm n\pi/a$ ($n = 1, 2, 3, \dots$). Эти разрывы и есть те запрещенные энергетические зоны, о которых уже говорилось выше.

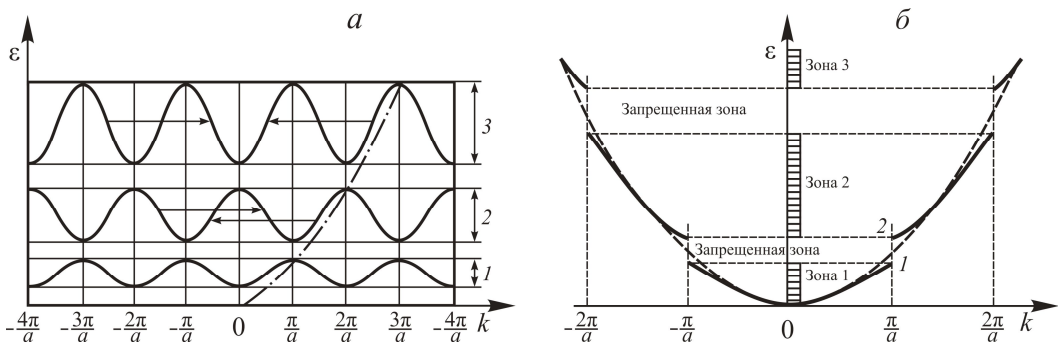


Рис. 4.24. Зависимость $\varepsilon(k)$ для разных энергетических зон электрона в одномерной решетке в модели Кронига – Пенни в представлении расширенных зон (а) и обобщенный закон дисперсии (б)

Итак, показано, что энергетический спектр электронов разделяется на зоны разрешенных значений и области запрещенных значений энергии. Возникновение разрывов ϵ_g в энергетическом спектре означает, что определенным значениям энергии не соответствуют никакие электронные состояния (электроны с такими энергиями отсутствуют).

Заполнение энергетических зон электронами. Деление кристаллов на металлы, диэлектрики и полупроводники. Как отмечалось, все кристаллические твердые тела принято делить на металлы, диэлектрики и полупроводники прежде всего по величине удельной электропроводности. Для типичных металлов эта величина при комнатной температуре составляет 10^8-10^6 (Ом·м)⁻¹. У очень хороших диэлектриков удельная электропроводность не превышает величины 10^{-11} (Ом·м)⁻¹. Кристаллы с промежуточными значениями электропроводности обычно относят к полупроводникам. Однако, как отмечалось выше, диэлектрики, полупроводники и металлы отличаются друг от друга не только величинами удельного электросопротивления. В металлах и диэлектриках наблюдается принципиально разный вид температурной зависимости электрической проводимости. Кроме того, для полупроводников характерна также очень высокая чувствительность к различным внешним воздействиям (температуре, свету, магнитным и электрическим полям и т. д.).

Деление кристаллических твердых тел на металлы, полупроводники и диэлектрики, а также отмеченные различия между ними удалось качественно объяснить на основе изложенной выше модели зонного энергетического спектра электронов. Модель показала, что столь большие различия в электрических свойствах твердых тел связаны со структурой и степенью заполнения электронами энергетических зон в этих телах.

Число электронов в кристалле конечно и зависит как от числа атомов N , так и от количества электронов на атом. Электроны в кристалле стремятся занять энергетические уровни с наименьшей энергией. Однако принцип Паули запрещает находиться на каждом энергетическом уровне более, чем двум электронам. Поэтому в кристалле сначала заполняются самые нижние энергетические зоны. В результате часть зон оказываются полностью заполненными, а самые верхние заполнены либо частично, либо совершенно свободны от электронов (рис. 4.25). Зона полностью заполненная, но обладающая наибольшей энергией (самая высокая) называется валентной. Следующая за ней зона, называемая зоной проводимости, может быть заполнена частично (рис. 4.25, а) либо не заполнена электронами вообще (рис. 4.25, б, в).

Таким образом, структура энергетических зон (в первую очередь, величина ϵ_g) кристалла и характер заполнения разрешенных зон электронами оказывают решающее влияние на величину его электропроводности. Если величина напряженности электрического поля равна 10^4 В/м, то на расстоя-

нии, равном средней длине свободного пробега электрона в кристалле (обычно $\sim 10^{-8}$ м), электрон приобретает энергию $\sim 10^{-4}$ эВ. Понятно, что эти значения энергии позволяют электрону переходить с уровня на уровень только внутри одной энергетической зоны. Для перехода между зонами необходима энергия больше ширины запрещенной зоны ϵ_g .

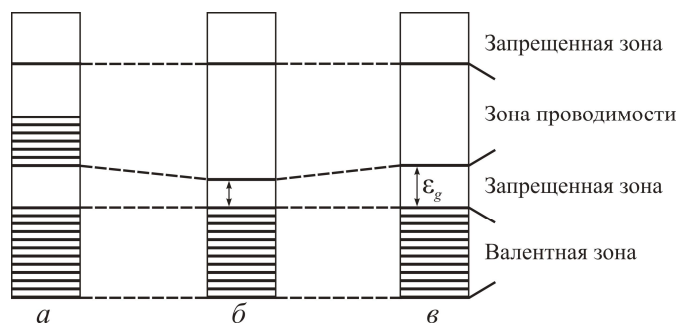


Рис. 4.25. Структура энергетических зон в кристалле и схема их заполнения в случае металлов (а), полупроводников (б) и диэлектриков (в)

Эти рассуждения приводят к выводу о том, что для появления в кристаллах высокой проводимости необходимо, чтобы в их энергетическом спектре зона проводимости была частично заполнена (рис. 4.25, а). Тогда кристалл ведет себя как металл.

Для кристаллов, валентная зона которых заполнена электронами полностью, а зона проводимости пуста (рис. 4.25, б, в), не слишком сильное внешнее электрическое поле не сможет перебросить электроны из заполненной валентной зоны в свободную зону проводимости. Внутри же самой полностью заполненной валентной зоны, не содержащей ни одного свободного уровня, оно может вызывать лишь перестановку электронов местами, что не нарушает симметрии их распределения по скоростям и не приводит к возникновению электрического тока в таких кристаллах. В этом случае к диэлектрикам относят кристаллы, имеющие относительно широкую запрещенную зону (рис. 4.25, в). Для типичных диэлектриков $\epsilon_g > 3$ эВ. Так, алмаз имеет $\epsilon_g = 5,2$ эВ, нитрид бора – 4,6 эВ, Al_2O_3 – 7 эВ.

У типичных полупроводников ширина запрещенной зоны существенно меньше (рис. 4.25, б) и не превышает 3 эВ. Например, для германия $\epsilon_g = 0,66$ эВ, для кремния – 1,12 эВ, для антимонида индия – 0,17 эВ.

4.2.4. Зонная структура полупроводников

Структура энергетических зон для полупроводниковых веществ практически совпадает с таковой для диэлектриков и отличается от них только меньшей шириной запрещенной зоны ϵ_g . Покажем, к каким последствиям приводит уменьшение ϵ_g .

Структура энергетических зон в собственных полупроводниках.

Рассмотрим кристалл с полностью заполненной электронами валентной зоной, у которого $\varepsilon_g \approx 10kT$ (рис. 4.26, *а*). В случае нагрева такого кристалла часть электронов в результате взаимодействия с колеблющимися атомами кристаллической решетки (взаимодействия с фононами) может быть переброшена из полностью заполненной валентной зоны (V-зоны) в зону проводимости (С-зону) (рис. 4.26, *б*). В результате в С-зоне появятся состояния, занятые электронами, а в валентной зоне возникнет такое же количество незаполненных электронами состояний (дырок). Этот процесс называется генерацией электронно-дырочных пар в процессе перехода зона – зона. Именно такие вещества и проявляют полупроводниковые свойства.

Рассмотренная структура энергетических зон для полупроводниковых веществ может быть реализована только в случае идеально чистых и бездефектных кристаллов. Такой тип полупроводника называется собственным, а его проводимость – собственной проводимостью.

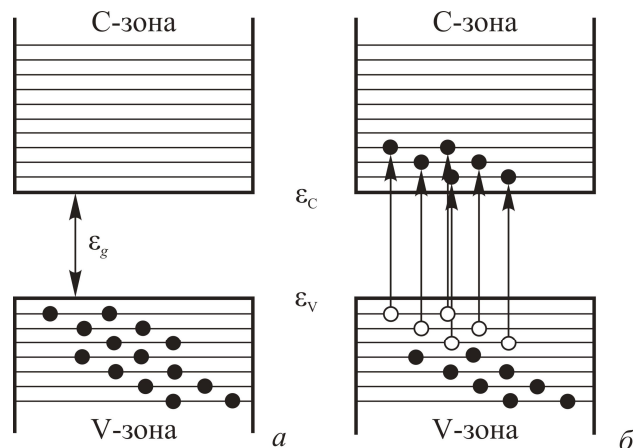


Рис. 4.26. Заполнение электронами зоны проводимости в бездефектном (идеальном) полупроводнике при $T = 0$ К (*а*) и при конечной температуре (*б*). Черные кружки – электроны, белые – дырки

Влияние дефектов на зонный энергетический спектр электронов в полупроводниках. В реальных кристаллических полупроводниках всегда присутствуют, пусть и в небольших количествах, дефекты, в том числе примеси, некоторые из них оказывают существенное влияние на электропроводность. Например, добавление в кремний атомов бора в количестве одного атома на 10^5 атомов кремния (10^{-3} ат.%) увеличивает его электропроводность при комнатной температуре в 1000 раз. Полупроводники, содержащие примеси, существенно влияющие на его электропроводность, называются примесными полупроводниками, а их электропроводность – примесной проводимостью.

Рассмотрим изменения, которые вносят примеси разных типов в зонную структуру полупроводников и виды примесной проводимости на примере кристаллического кремния с относительно небольшой запрещенной зоной (его валентная зона при $T = 0$ К полностью заполнена электронами, а зона проводимости пуста).

Пусть в такой химически чистый кристалл кремния (или германия), каждый атом которого использует свои четыре валентных электрона для образования ковалентных связей с четырьмя ближайшими соседями (рис. 4.27, *a*), вводятся атомы примеси пятивалентного элемента (например, фосфора), которые располагаются в узлах решетки (рис. 4.27, *б*), замещая атомы кремния. Тогда, как и в чистом кремнии, четыре электрона каждого атома фосфора образуют четыре ковалентные связи с четырьмя ближайшими соседними атомами кремния, а пятый не принимает участия в химической связи. В результате лишний электрон оказывается связан с атомом фосфора существенно слабее, чем остальные его четыре электрона связаны с атомами кремния. Это означает, что при $T = 0$ К этот пятый электрон, как говорят, будет локализован на примеси.

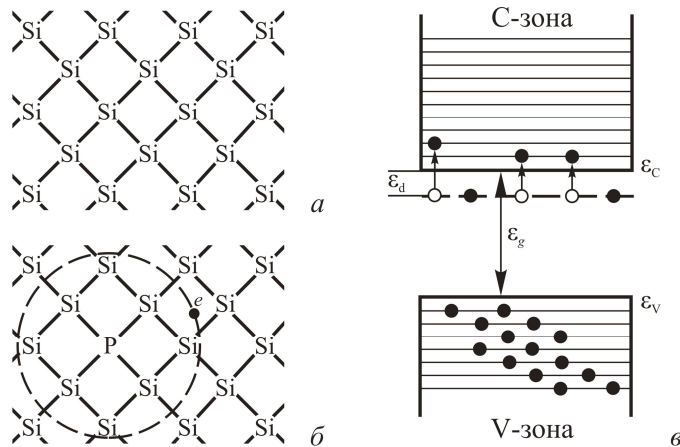


Рис. 4.27. Схема формирования электронных состояний в полупроводниковом кремнии: *a* – ковалентные связи в чистом кремнии; *б* – кремний с примесным атомом фосфора; *в* – зонная структура кремния с донорными примесями

Такое поведение атома фосфора означает, что он будет вызывать появление энергетических уровней в запрещенной зоне кремния (рис. 4.27, *в*) на глубине $\Delta\varepsilon_d$ ниже дна С-зоны. Поскольку эти уровни относятся к электронам, локализованным вблизи примесных атомов, на зонной диаграмме их изображают штриховыми линиями.

При подведении небольшой энергии (нагреве кристалла) этот лишний электрон будет легко отрываться от примесного атома фосфора и получит возможность перемещаться по кристаллу в случае приложения электриче-

ского поля. С точки зрения зонной структуры это означает, что электрон при нагреве переходит с примесного уровня в пустую зону проводимости (оставляя на уровне локализованную дырку) и может участвовать в создании электрического тока при приложении внешнего электрического поля. Такая примесь, отдающая в C -зону электроны, называется донорной, а полупроводники с такими примесями – электронными полупроводниками или полупроводниками n -типа. Энергию ϵ_d , которую необходимо затратить, чтобы перевести электрон с примесного центра донорного типа в зону проводимости, называют энергией ионизации донорной примеси. После отрыва электрона донорный центр становится положительно заряженным, так как на нем локализуется дырка.

Наиболее распространенными донорными примесями в полупроводниковых кристаллах кремния и германия являются элементы пятой группы периодической системы элементов Д. И. Менделеева, такие как фосфор (P), мышьяк (As) и сурьма (Sb).

По-иному ведут себя в кремнии и германии примесные атомы элементов третьей группы периодической системы, в частности бор (B), алюминий (Al), галлий (Ga) и индий (In). Например, замещение в решетке кремния одного атома кремния на атом бора приводит к тому, что ковалентная связь одного из четырех атомов кремния, ближайших к бору, остается незаполненной. Эта связь может быть восстановлена, если один электрон из химической связи кремний – кремний перейдет на атом бора, образуя (рис. 4.28, *a*) в ней электронную вакансию (дырку). На зонной диаграмме это соответствует появлению локальных уровней примеси бора в запрещенной зоне кремния вблизи потолка валентной зоны (рис. 4.28, *б*). При $T = 0$ К этот уровень свободен, но при нагреве кристалла на него могут перейти электроны из V -зоны. Образовавшиеся в валентной зоне дырки являются носителями электрического тока в такого типа примесных полупроводниках.

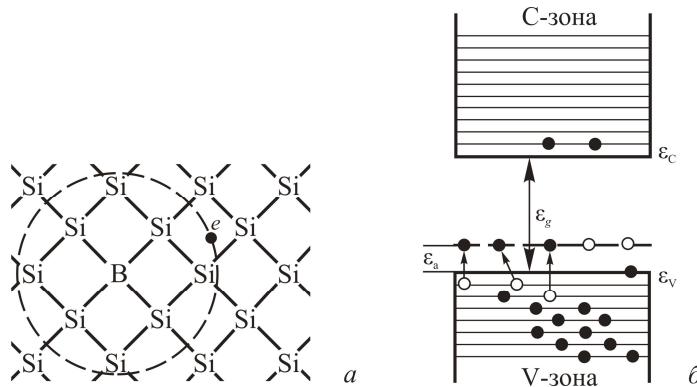


Рис. 4.28. Схема формирования дырочных состояний и проводимости в полупроводниковом кремнии: *a* – кремний с примесным атомом бора; *б* – зонная структура кремния с акцепторными примесями

Примеси, захватывающие электроны из валентной зоны полупроводников, называют акцепторными, а энергетические уровни этих примесей – акцепторными уровнями. Разность ϵ_a между энергией акцепторного уровня и энергией потолка V-зоны называется энергией ионизации акцепторной примеси. Полупроводники, содержащие акцепторные примеси, называют дырочными полупроводниками или полупроводниками *p*-типа. После перехода электрона от кремния на акцепторный центр (образования свободной дырки в валентной зоне) последний становится отрицательно заряженным.

Энергию связи примеси в полупроводниковом кристалле (энергию ионизации донора либо акцептора) можно оценить на основе простой модели, подобной боровской модели атома водорода. Такие примеси называют водородоподобными.

Экспериментальные значения энергий ионизации некоторых типов доноров и акцепторов в кремнии и германии представлены в табл. 4.1.

Таблица 4.1

**Экспериментальные значения энергий ионизации (эВ)
водородоподобных примесей в кремнии и германии**

Примеси	Германий	Кремний
Доноры:		
P	0,0120	0,044
As	0,0127	0,049
Sb	0,0096	0,039
Bi	–	0,069
Акцепторы:		
B	0,0104	0,045
Al	0,0102	0,057
Ga	0,0108	0,065
In	0,0112	0,16

Электропроводность собственных и примесных полупроводников. В соответствии с зонной структурой полупроводника без примесей и других дефектов (рис. 4.26) его проводимость зависит от концентрации генерированных электронов и дырок. Тогда, учитывая известное соотношение модели Друде (4.2.7), проводимость собственного полупроводника будет определяться носителями заряда двух знаков, движущихся в электрическом поле в противоположных направлениях, и может быть выражена соотношением

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p = ne\mu_n + pe\mu_p, \quad (4.2.31)$$

где σ_n и σ_p – вклады в проводимость от электронов и дырок, n и p – концентрации электронов и дырок, μ_n и μ_p – подвижности электронов и дырок.

Как видно, на величину удельной проводимости полупроводника и ее температурную зависимость влияют концентрация носителей (электронов и дырок) и их подвижность, которые, в свою очередь, определяются типом полупроводника. Электронная составляющая проводимости определяется первым слагаемым в формуле (4.23), а второе слагаемое связано с дырочной проводимостью полупроводника.

Так как в собственном полупроводнике концентрации электронов и дырок одинаковы (поскольку $n = p = n_i = p_i$, где n_i и p_i – собственные концентрации носителей), удельная электропроводность собственного полупроводника будет равна

$$\sigma = n_i e (\mu_n + \mu_p). \quad (4.2.32)$$

Удельная электропроводность примесных и собственных полупроводников определяется концентрацией носителей заряда в соответствующей разрешенной зоне (электронов в С-зоне и дырок в V-зоне) и их подвижностью. Заметим, что концентрация носителей заряда зависит от уровня легирования (концентрации примесей) и температуры.

Для полупроводника электронного типа при низких температурах основным поставщиком электронов в зону проводимости являются донорные уровни примеси. За счет термического возбуждения электроны с донорных уровней примесных атомов переходят в зону проводимости, так что проводимость определяется соотношением

$$\sigma_n = n e \mu_n.$$

При очень высоких температурах, когда электроны попадают в зону проводимости за счет их перехода из валентной зоны, поведение электронного полупроводника аналогично поведению собственного полупроводника, т. е. проводимость примесного полупроводника становится собственной.

Для примесной проводимости полупроводника дырочного типа будет справедливо соотношение

$$\sigma_p = p e \mu_p.$$

4.3. Теплоемкость и перенос тепла в кристаллах

Одним из главных видов внешних воздействий на кристаллические системы, которые определяют их термодинамические и иные свойства, а также протекающие в них процессы, является термическое воздействие. Поскольку кристаллические твердые тела состоят из двух подсистем образующих их частиц – ионов и электронов, любое термическое воздействие всегда

будет изменять энергетический спектр, параметры законов дисперсии, динамику движения образующих кристалл частиц (ионов, молекул, электронов), число и тип возникающих дефектов кристаллической решетки, а также тип (структуру) и состояние кристалла. В результате указанные изменения и характер появившегося в кристалле ансамбля дефектов и будут определять основные термодинамические свойства кристалла.

В данном разделе на основе квантовых представлений об энергетическом спектре и динамике фононов и электронов, а также о типах генерируемых дефектов кристаллической решетки будут проанализированы вклады этих квазичастиц в основные тепловые свойства кристаллов (теплоемкость, теплопроводность, тепловое расширение).

4.3.1. Зависимость удельной теплоемкости от температуры

Колебательный характер движения атомов (ионов) в кристаллических твердых телах, имеющих упорядоченное (решетчатое) строение, приводит к тому, что воздействие температуры вызывает изменения как внутренней энергии кристалла (за счет изменения числа, энергии и импульса фононов), так и потенциальной энергии атомов (ионов) за счет изменения величины энергии химической связи или даже ее типа. Изменение числа и энергии фононов с температурой определяет теплоемкость кристаллов. Изменение же числа фононов и их импульса определяет решеточную теплопроводность. Рост амплитуды колебаний атомов у положения равновесия с учетом ангармонизма этих колебаний приводит к тепловому расширению кристаллической решетки, а также к генерации точечных дефектов, определяющих механизмы миграции ионов по кристаллу.

Классическая теория теплоемкости. Для твердых и жидких тел сообщаемая теплота dQ идет почти целиком (объем тел считается постоянным) на изменение внутренней энергии тела $dU_{\text{вн}}$ (изменение энергии движения и взаимодействия частиц, составляющих это тело):

$$C_V = \frac{dQ}{dT} = \frac{dU_{\text{вн}}}{dT}. \quad (4.3.1)$$

У твердого тела изменение внутренней энергии $dU_{\text{вн}}$ обусловлено прежде всего изменением энергии колебаний кристаллической решетки.

В эксперименте с конденсированными веществами обычно измеряется теплоемкость при постоянном давлении:

$$C_p = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_p,$$

однако более фундаментальное значение в теории твердого тела имеет теплоемкость при постоянном объеме:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V.$$

В 1818 г. был экспериментально установлен закон Дюлонга – Пти, согласно которому теплоемкость C_V всех твердых тел при достаточно высокой температуре есть величина постоянная, не зависящая от температуры и составляющая около $3R \approx 25$ Дж/(моль·К). Этот закон легко объясняется на основе классического представления о твердом теле как совокупности независимо колеблющихся атомов кристаллической решетки.

В классической теории теплоемкости однородное твердое тело рассматривается как совокупность совершенно независимых друг от друга частиц (классических осцилляторов), совершающих колебания с одной и той же частотой ω . Каждая такая частица обладает тремя степенями свободы. На каждую степень свободы приходится в среднем $(1/2)kT$ кинетической энергии и $(1/2)kT$ потенциальной энергии. Поэтому суммарная средняя энергия колеблющейся частицы равна $3kT$. В этом случае внутренняя энергия 1 моля вещества, содержащего N_A частиц (N_A – число Авогадро), равна

$$U_{\text{вн}} = 3N_A kT = 3RT,$$

где R – универсальная газовая постоянная. Согласно определению (4.3.1), получим молярную теплоемкость атомов твердого тела при постоянном объеме в виде закона Дюлонга – Пти:

$$C_V = \frac{dU_{\text{вн}}}{dT} = 3R. \quad (4.3.2)$$

В табл. 4.2 приведены значения теплоемкости ряда веществ при обычных (комнатных) температурах. Из таблицы видно, что в подавляющем большинстве случаев закон Дюлонга – Пти выполняется достаточно хорошо. Однако, к примеру, теплоемкость алмаза и бора при комнатной температуре оказалась значительно ниже 25 Дж/(К·моль). Это расхождение классической модели и экспериментальных значений теплоемкости не является принципиальным. Более существенно, что закон Дюлонга – Пти в соответствии с классическими представлениями должен также нарушаться для металлических кристаллов, если учесть, что у них кроме атомов имеется ансамбль электронов проводимости, которые, согласно классической статистике, так же как и атомы, должны обладать кинетической энергией по $kT/2$ на каждую из трех степеней свободы. Это означает, что полная энергия и соот-

ответственно теплоемкость одновалентного металла должны быть равны величине $C_V = (9/2)R$, т. е. в 1,5 раза больше, чем значение (4.3.2), даваемое законом Дюлонга – Пти. Поэтому в рамках классического подхода остается необъяснимым, почему электроны не дают вклад в теплоемкость.

Таблица 4.2

Экспериментальные значения теплоемкости кристаллических веществ

Элементы	C_V , Дж/моль·К	Элементы	C_V , Дж/моль·К
Na	27	Sn	25,5
Al	23,5	Pt	24,7
Fe	24,7	Pb	24,7
Ni	24,7	Cd	24,7
Cu	23,5	B	14,2
Zn	24	C	5,7

Второй принципиальный вопрос, на который классическая теория теплоемкости также не позволяет правильно ответить, – вопрос о температурной зависимости теплоемкости. В отличие от предсказания классической теории решеточной теплоемкости, экспериментальные данные свидетельствуют о том, что C_V зависит от температуры. Как видно из рис. 4.29, с приближением к абсолютному нулю температуры теплоемкость кристаллов быстро уменьшается до нуля, хотя, согласно классической теории, она должна оставаться неизменной при понижении температуры, т. е. идти вдоль штриховой горизонтальной линии на рис. 4.29.

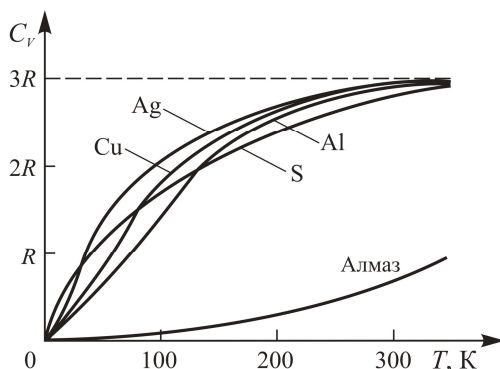


Рис. 4.29. Температурные зависимости теплоемкости для ряда элементов

Несовпадение результатов расчета по классической теории теплоемкости с экспериментальными данными, особенно в области низких температур, обусловлено двумя причинами. Во-первых, в классической теории предпо-

лагается, что атомы твердого тела колеблются как классические осцилляторы, т. е. независимо друг от друга с одной и той же частотой. В действительности же атомы в кристаллах образуют связанную систему, обладающую широким спектром колебательных мод. Во-вторых, колеблющийся атом следует уподоблять не классическому, а квантовому осциллятору, обладающему дискретным энергетическим спектром.

Дальнейшее развитие теории теплоемкости твердых тел шло по пути преодоления этих недостатков на основе использования квантовых представлений о твердом кристаллическом теле.

Квантовая теория теплоемкости Эйнштейна. Первая квантовая модель теплоемкости кристаллов была разработана Эйнштейном в предположении, что все квантовые осцилляторы колеблются с одной частотой ν около своих положений равновесия. Тогда внутренняя энергия 1 моля кристалла (с учетом нулевой энергии) равна (см. Т. 1, п. 2.31)

$$U = 3N_A \left(\frac{h\nu}{2} + \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} \right).$$

Тогда эйнштейновская молярная теплоемкость при любой температуре будет иметь вид

$$C_V = 3N_A k F_E(\nu_E, T), \quad (4.3.3)$$

где

$$F_E(T) = \frac{\left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 \exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)}{\left(\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1\right)^2} \quad (4.3.4)$$

называется *функцией Эйнштейна*. Характерной особенностью зависимости $C_V(T)$ в модели Эйнштейна является уменьшение теплоемкости кристалла до нуля при понижении температуры до $T = 0$ К. Однако даваемый этой моделью экспоненциальный температурный ход теплоемкости кристаллов количественно не совпадал с экспериментальными зависимостями. При высоких температурах из (4.3.3) получаем классическое значение $C_V = 3R$.

Квантовая теория теплоемкости Дебая. Связь между атомами кристалла настолько сильна, что они не могут колебаться независимо друг от друга. Поэтому N таких атомов образуют связанную систему из квантовых

гармонических осцилляторов. В такой системе должно возникать в общем случае $3N$ квантовых осцилляторов (фононов), колеблющихся с различными (а не с одной, как в модели Эйнштейна) частотами.

Определение собственных колебаний данной системы представляет значительные трудности. Эти трудности были впервые преодолены Дебаем для случая изотропного кристалла с линейным законом дисперсии. Согласно теории Дебая, полная энергия колебаний кристаллической решетки может быть найдена суммированием энергии всех нормальных колебаний (фононов) с различными частотами в объеме твердого тела (см. Т. 1, п. 2.31).

В результате при $T \ll T_D$ для молярной теплоемкости получено выражение

$$C_V = \frac{12}{5} \pi^4 R \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \sim T^3. \quad (4.3.5)$$

Соотношение (4.3.5) называется *законом кубов Дебая*, показывающим, что теплоемкость твердых тел в области низких температур растет как третья степень температуры ($C_V \sim T^3$). Заметим, однако, что для сильно-анизотропных кристаллических решеток и при сложном спектре колебаний (сильном отклонении от линейного закона дисперсии) этот закон нарушается. Для слоистых кристаллов, например, может быть $C_V \sim T^2$, а для нитевидных $C_V \sim T$. При высоких температурах ($T \gg T_D$) $C_V = 3R$.

Температура T_D в (4.3.5), при которой возбуждаются фононы максимальной частоты (энергии) ν_D , определяется соотношением

$$T_D = \frac{h\nu_D}{k} \quad (4.3.6)$$

и называется *характеристической температурой Дебая*. Типичные значения дебаевской характеристической температуры для некоторых веществ приведены в табл. 4.3.

Дебаевская температура является очень важной физической константой веществ, поскольку влияет на многие свойства кристаллических твердых тел, такие как теплоемкость, электропроводность, теплопроводность, уширение линий рентгеновских спектров, упругие свойства и т. п.

Физический смысл температуры T_D состоит в том, что при нагреве кристалла именно до этой температуры в нем возбуждается весь спектр нормальных колебаний, т. е. для $T > T_D$ нормальных колебаний кристаллической решетки с большими энергиями не возникает. Изменение температуры выше T_D приводит лишь к увеличению степени возбуждения каждого нормального колебания (увеличению числа фононов для каждого значения его энергии). Такие температуры ($T > T_D$) и принято называть высокими. Для многих кри-

сталлических веществ (золото, серебро, олово, KCl) уже комнатные температуры будут являться высокими. Однако, например, для кремния, алмаза, бора и других веществ величина T_D гораздо выше комнатной, именно поэтому на рис. 4.29 для них не выполняется закон Дюлонга – Пти.

Таблица 4.3

Дебаевские температуры некоторых кристаллических материалов

Материал	T_D , К	Материал	T_D , К
Металлы		Полупроводники	
Hg	60–90	Sn (серое)	212
Pb	94,5	Ge	366
Na	160	Si	658
Ag	225	Диэлектрики	
W	270	AgBr	150
Cu	339	NaCl	320
Fe	467	Алмаз	1850
Be	1160		

Теплоемкость кристалла в области высоких температур не зависит от температуры, совпадая, как и в модели Эйнштейна, с описанным выше законом Дюлонга – Пти.

В целом экспериментальные зависимости $C_V(T)$ хорошо согласуются с теоретической моделью Дебая лишь для твердых тел с простой кристаллической решеткой. Насколько хорошо формула Дебая (4.3.5) отвечает опытными данным, видно из рис. 4.30, на котором показаны зависимости теплоемкости алюминия, меди и серебра от приведенной температуры T/T_D .

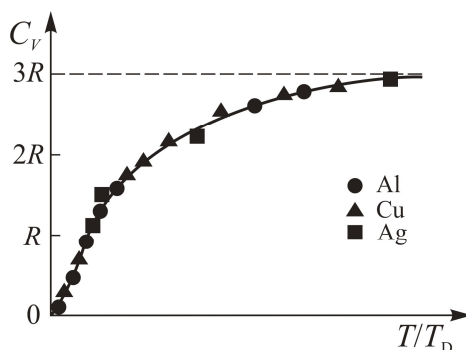


Рис. 4.30. Теоретическая (сплошная кривая) и экспериментальные (точки) температурные зависимости теплоемкости для ряда элементов. Штриховая прямая соответствует закону Дюлонга – Пти

4.3.2. Тепловое расширение кристаллов

При рассмотрении колебаний атомов кристаллической решетки, а также теплоемкости твердых тел, обусловленной этими колебаниями, предполагалось, что силы, которые действуют между атомами, являются упругими и атомы совершают гармонические колебания с малыми амплитудами около их средних положений равновесия. В этом случае потенциальная энергия возрастает пропорционально квадрату отклонения осциллятора от положения равновесия, а параметры, описывающие жесткость решетки, не меняются при увеличении температуры. Другими словами, в модели твердого тела как газа квазичастиц – фононов, последние рассматриваются как не взаимодействующие друг с другом.

Однако гармоническое приближение не может объяснить некоторые тепловые свойства кристаллов, такие как зависимости модулей упругости от температуры, теплового расширения, решеточной теплопроводности и др. Это обусловлено тем, что при описании таких свойств требуется учет так называемых ангармонических поправок. Необходимо принимать во внимание тот факт, что силы взаимодействия между атомами в решетке не совсем упругие, т. е. зависят от смещения атомов из положения равновесия не линейно, а содержат ангармонические члены второй и более высоких степеней, влияние которых особенно возрастает при повышении температуры. На самом деле фононы взаимодействуют как между собой, так и с другими квазичастицами (например, с электронами, фотонами и т. д.).

Для того чтобы понять природу ангармонизма колебаний атомов в кристаллах, обратимся к зависимости энергии взаимодействия частиц твердого тела от расстояния между ними. Эта зависимость в общем случае определяется равновесием сил отталкивания и притяжения, которые можно описать, например, используя потенциал Леннарда – Джонса (см. Т. 1, п. 3.2).

Графический вид такой зависимости представлен на рис. 4.31. Видно, что при абсолютном нуле температуры частицы располагаются на расстояниях r_0 , отвечающих минимуму энергии взаимодействия U_0 (на дне потенциальной ямы abc). С повышением температуры частицы начинают колебаться около положений равновесия в точке O . Для упрощения допустим, что частица 1 закреплена неподвижно в начале координат и колеблется лишь частица 2. Колеблющаяся частица обладает кинетической энергией, достигающей наибольшего значения W_m в момент прохождения ею положения равновесия O . На рис. 4.31 энергия отложена вверх от дна потенциальной ямы. При движении частицы 2 влево от положения равновесия кинетическая энергия расходуется на преодоление сил отталкивания ее от частицы 1 и переходит в потенциальную энергию взаимодействия частиц. Отклонение влево происходит до тех пор, пока вся кинетическая энергия частицы W_m не перейдет в потенциальную энергию U . Последняя увеличится на $\Delta U = W_m$ и

станет равной $-(U_0 - \Delta U)$, а частица 2 сместится предельно влево на расстояние Δr_1 . При движении частицы 2 вправо от положения равновесия кинетическая энергия расходуется на преодоление сил притяжения ее к частице 1 и также переходит в потенциальную энергию взаимодействия этих частиц. В точке B , отстоящей от положения равновесия на расстоянии Δr_2 , вся кинетическая энергия W_m переходит в потенциальную, вследствие чего последняя увеличивается на $\Delta U = W_m$ и опять становится равной $-(U_0 - \Delta U)$.

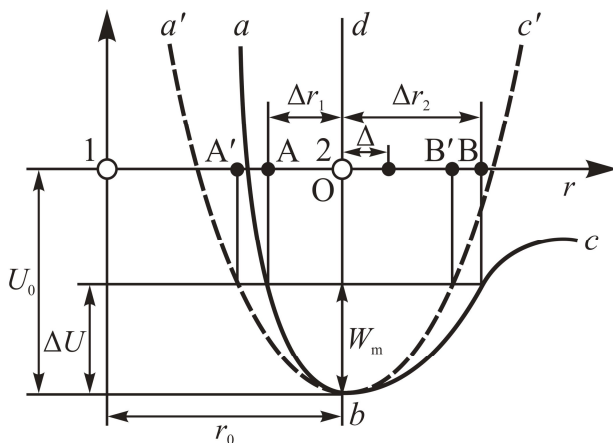


Рис. 4.31. Зависимость потенциальной энергии взаимодействия атомов от расстояния $U(r)$ между ними для гармонического (штриховая кривая) и ангармонического (сплошная кривая) приближений

Если бы частица 2 совершала чисто гармонические колебания, то сила F , возникающая при отклонении ее от положения равновесия на расстояние Δr , была бы упругой, т. е. строго пропорциональной величине этого отклонения, и направлена к положению равновесия $F = -C\Delta r$.

Изменение потенциальной энергии частицы ΔU описывалось бы параболой $a'bc'$ (штриховая кривая на рис. 4.31), уравнением которой является

$$\Delta U = (1/2)C\Delta r^2. \quad (4.3.7)$$

Парабола $a'bc'$ симметрична относительно прямой bd , параллельной оси ординат и отстоящей от нее на расстоянии r_0 , поэтому отклонения Δr_1 и Δr_2 были бы одинаковыми по величине (расстояния OA' и OB') и середина размаха $A'B'$ совпадала с положением точки равновесия O . Нагревание тела в данном случае не могло вызвать его расширения, так как с увеличением температуры происходило бы лишь увеличение амплитуды колебаний частиц, а положение центров колебаний (средние расстояния между частицами) оставалось бы неизменным.

В действительности же кривая abc зависимости потенциальной энергии от расстояния является, как видно из рис. 4.31, несимметричной относительно прямой bd : ее левая ветвь ba поднимается значительно круче правой ветви bc . Это означает, что колебания частиц в твердом теле являются агармоническими.

Для учета асимметрии кривой $U(r)$ необходимо в уравнение (4.3.7) ввести дополнительный член $-(1/3)g\Delta r^3$, выражающий асимметрию (g – коэффициент пропорциональности). Тогда уравнение (4.3.7) примет вид

$$\Delta U = \frac{1}{2} C\Delta r^2 - \frac{1}{3} g\Delta r^3.$$

При отклонении частицы вправо ($\Delta r > 0$) член $(1/3)g\Delta r^3$ вычитается из $(1/2)C\Delta r^2$ и ветвь bc идет более полого по сравнению с ветвью bc' ; при отклонении частицы влево ($\Delta r < 0$) член $(1/3)g\Delta r^3$ прибавляется к $(1/2)C\Delta r^2$ и ветвь ba идет круче ветви ba' .

Эксперименты показывают, что практически все кристаллы при увеличении температуры в той или иной степени расширяются. Природа этого явления при детальном рассмотрении оказывается достаточно сложной. Однако считается, что тепловое расширение связано в основном с увеличением средних расстояний между атомами кристалла, что может быть обусловлено многими причинами. В их числе – асимметричная зависимость потенциальной энергии от смещения атомов из положения равновесия, изменение величины сил взаимодействия между атомами при увеличении температуры, перегруппировки разных атомов, изменение преимущественных ориентаций распределения их электронной плотности и т. д. В данном разделе рассматривается в основном первая причина, поскольку, как правило, она является самой главной.

Воспользуемся полученными результатами для определения коэффициента теплового расширения. Из них следует, что если бы силы, удерживающие атом в состоянии равновесия, зависели от его смещения линейно (гармоническое приближение), то тепловое расширение отсутствовало в принципе, т. е. размеры твердого тела не зависели бы от температуры. Из рис. 4.32 видно, что в гармоническом приближении линейность зависимости силы от смещения x атома из положения равновесия при $x = x_0$ привела бы к параболическому ходу потенциальной энергии с x . Как видно из рисунка, с ростом температуры (в точках T_1, T_2, T_3 и т. д.) атомы колеблются так, что средние значения смещений атомов из положения равновесия $\langle x_1 \rangle = \langle x_2 \rangle = \langle x_3 \rangle = 0$ при любой температуре. Это означает, что расстояние между атомами, совершающими гармонические колебания, при нагревании должно оставаться равным x_0 .

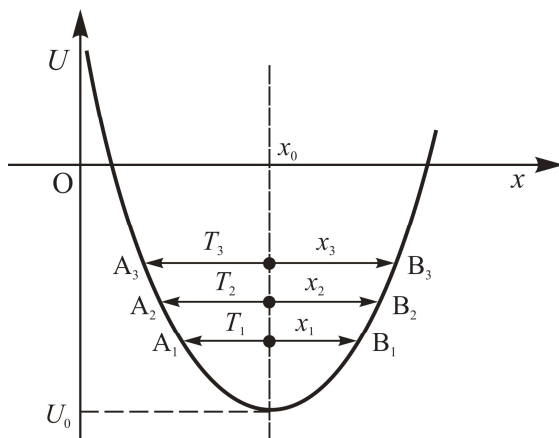


Рис. 4.32. Зависимость потенциальной энергии взаимодействия атомов от расстояния $U(x)$ между ними для гармонического осциллятора

Такой же результат можно получить путем формального расчета по теореме о среднем среднем смещения гармонического осциллятора из положения равновесия:

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\frac{ax^2}{kT}\right) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{ax^2}{kT}\right) dx} = 0. \quad (4.3.8)$$

Сказанное означает, что коэффициент теплового расширения твердых тел в гармоническом приближении должен быть равен нулю, однако это противоречит экспериментам. Для большинства твердых тел относительное расширение при нагревании на 1 К составляет примерно 10^{-5} . В табл. 4.4 приведены значения коэффициентов теплового расширения для некоторых изотропных веществ.

Таблица 4.4

Коэффициенты теплового расширения α некоторых веществ при комнатной температуре

Вещество	$\alpha \cdot 10^6, \text{K}^{-1}$	Вещество	$\alpha \cdot 10^6, \text{K}^{-1}$
Li	56	Fe	12
B	2	Co	12
Cu	16,6	Ag	19
Ga	18	Cd	32,5
Ge	5,8	Au	14

Как показано выше, несимметричный характер зависимости потенциальной энергии взаимодействия атомов от расстояния приводит к непараболическому (асимметричному) виду кривой потенциальной энергии взаимодействия (рис. 4.33). В результате средние значения смещений атомов из положения равновесия $\langle x_1 \rangle \neq \langle x_2 \rangle \neq \langle x_3 \rangle \neq 0$, так что с нагреванием тела средние расстояния между частицами должны увеличиваться, а тело – расширяться.

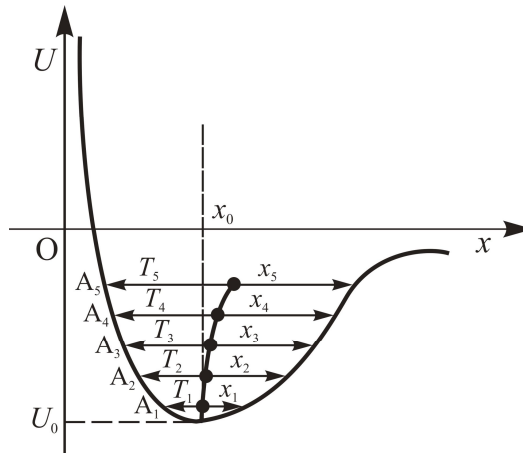


Рис. 4.33. Зависимость потенциальной энергии взаимодействия атомов от расстояния $U(x)$ между ними для ангармонического осциллятора

Если записать потенциальную энергию ангармонического осциллятора в более сложной форме:

$$U = ax^2 - bx^3 - cx^4, \quad (4.3.9)$$

где a, b, c – константы, то расчет среднего смещения ангармонического осциллятора (по аналогии с (4.3.8)) дает

$$\langle x \rangle = \frac{3kbT}{4a^2}, \quad (4.3.10)$$

где k – постоянная Больцмана, a и b – константы в уравнении (4.3.9).

Относительное линейное расширение твердого тела, представляющее собой отношение изменения среднего расстояния между частицами $\langle x \rangle$ к нормальному расстоянию между ними x_0 , может быть выражено как

$$\frac{\langle x \rangle}{x_0} = \frac{3b}{4a^2} kT = \alpha T. \quad (4.3.11)$$

Этот результат соответствует часто используемому для прикладных расчетов эмпирическому закону о линейном тепловом расширении тел при температурах вблизи комнатной:

$$l(T) = l_0 [1 + \alpha(T - T_0)],$$

где l_0 – длина тела при $T = T_0$, а $l(T)$ – длина тела при заданной температуре T . Параметр α называют коэффициентом линейного теплового расширения или просто *коэффициентом теплового расширения*, который определяется как

$$\alpha = \frac{1}{l_0} \frac{dl}{dT}. \quad (4.3.12)$$

Подстановка численных значений b , k , a и дает для коэффициента α величину порядка 10^{-4} – 10^{-5} . Это удовлетворительно согласуется с данными табл. 4.4.

Эксперименты также подтверждают, что при достаточно высоких температурах расширение кристалла пропорционально его абсолютной температуре, а сам коэффициент расширения α практически не зависит от температуры. Однако в области низких температур коэффициент расширения α ведет себя так же, как и теплоемкость твердого тела C_V : уменьшается с понижением температуры и в случае приближения к абсолютному нулю тоже стремится к нулю.

4.3.3. Теплопроводность кристаллической решетки

Все кристаллические твердые тела в той или иной степени способны проводить тепло. В изотропном твердом теле распространение теплоты в направлении оси x подчиняется закону Фурье:

$$Q = -\lambda S \frac{dT}{dx}, \quad (4.3.13)$$

где Q – тепловой поток; S – площадь поверхности образца; dT/dx – градиент температуры вдоль оси x ; λ – коэффициент теплопроводности. Знак «минус» в правой части выражения (4.3.13) обусловлен тем, что вектор теплового потока направлен противоположно градиенту температуры, т. е. от горячей области к холодной.

В экспериментах в соответствии со схемой рис. 4.34 коэффициент теплопроводности λ определяется как количество тепловой энергии $q = Q/S$, переданное через единицу площади вещества за единицу времени при единичном градиенте температуры dT/dx .

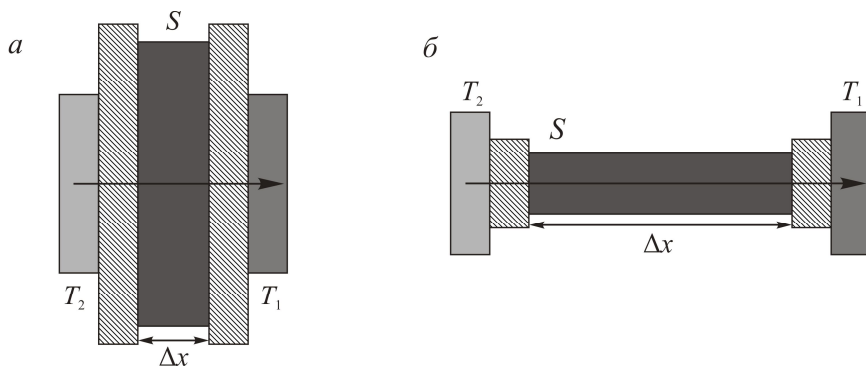


Рис. 4.34. Схемы экспериментального определения коэффициента теплопроводности твердых тел для случаев их малого (*а*) и большого (*б*) значений

Экспериментальные данные для диэлектриков показывают, что λ растет при увеличении температуры от температуры абсолютного нуля, проходит при температуре 30–50 К через размытый максимум и при дальнейшем увеличении температуры убывает. При сравнительно высоких температурах (порядка температуры Дебая) коэффициент теплопроводности убывает как $1/T$.

Отмеченные экспериментальные закономерности могут быть объяснены на основе следующих представлений. В общем случае в твердых телах имеют место два основных механизма переноса теплоты – перенос тепловой энергии атомными колебаниями (фононами в модели квазичастиц) и свободными электронами. В металлах действуют оба механизма одновременно, а в диэлектриках – только первый.

Рассмотрим фононный механизм распространения теплоты в диэлектриках, в которых свободных электронов практически нет. Так как атомы в кристалле связаны между собой, при нагревании какого-либо участка тела амплитуда колебаний атомов этого участка (энергия и число фононов) увеличивается и кинетическая энергия колебаний атомов (или фононов в модели квазичастиц) переносится от нагретого участка к более холодному. Макроскопически поток кинетической энергии атомов выглядит как тепловой поток. Таким образом, процесс переноса тепла в кристалле обусловлен распространением упругих звуковых волн.

Как отмечалось выше, при объяснении явления теплопроводности мы уже не можем считать, что атомы совершают строго гармонические колебания, распространяющиеся в кристаллической решетке в виде системы не взаимодействующих между собой упругих волн (фононов). Такие волны распространялись бы в кристалле свободно без затухания и, следовательно, имели неограниченный свободный пробег. Тогда тепловой поток даже при малых градиентах температуры мог бы существовать неопределенно долго, прежде чем установилось тепловое равновесие, а теплопроводность была бы бесконечна.

В реальных твердых телах, как показывает эксперимент, теплопроводность оказывается конечной. Конечное значение теплопроводности связано с тем обстоятельством, что в реальном кристалле колебания атомов кристаллической решетки не являются чисто гармоническими из-за того, что силы взаимодействия между атомами нелинейно зависят от смещений атомов.

С учетом в соотношении (4.3.9) для потенциальной энергии ангармонического члена $b\chi^3$, нами также принимается во внимание, что в реальной ситуации фононы рассеиваются друг на друге. Очевидно, что столкновения переносящих энергию фононов должны приводить к изменению их импульса (рис. 4.35) и тем самым влиять на процесс переноса тепла. Если такие столкновения изменяют вектор импульса на малый угол (рис. 4.35), то влияние их на перенос теплоты (величина теплового потока практически не изменяется) более слабое. В то же время процессы столкновений, приводящие к сильному изменению направления импульса (направления движения частицы), вызывают уменьшение теплового потока, поэтому именно рассеяние фононов на большие углы и определяет тепловое сопротивление кристалла. В этом случае в соответствии с законом сохранения квазиимпульса рассматриваются процессы переброса для взаимодействующих фононов.

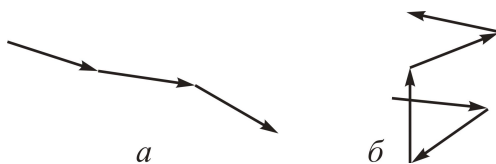


Рис. 4.35. Схема движения фонона, испытывающего при столкновениях отклонения на малые (а) и большие (б) углы

С точки зрения такого подхода проанализируем зависимость теплопроводности от температуры. Воспользуемся выражением для теплопроводности, полученным в кинетической теории газов (Т. 1, п. 3.2), предполагая, что тепло переносят не молекулы газа, а фононы:

$$\lambda_{\text{реш}}(T) = \frac{1}{3} C_{\phi} v_{\phi} l_{\phi} = \frac{1}{3} C_{\phi} v_{\phi}^2 \tau, \quad (4.3.14)$$

где $C_{\phi} = \rho C_V / M$ – теплоемкость единичного объема кристалла, связанная с колебаниями решетки; v_{ϕ} – средняя скорость фононов, приблизительно равная скорости звука в кристалле, которую можно считать слабо зависящей от температуры; l_{ϕ} – средняя длина свободного пробега фононов, равная среднему расстоянию между двумя последовательными актами рассеяния; $\tau = l_{\phi} / v_{\phi}$ – эффективное время релаксации (время свободного пробега) фононов, обратное значение которого соответствует частоте столкновения фононов; C_V – молярная теплоемкость. Здесь C_{ϕ} и l_{ϕ} являются величинами, в основном и определяющими зависимость теплопроводности от температуры.

При высоких температурах ($T \gg T_D$) удельная теплоемкость приближается к предельному значению, определяемому законом Дюлонга и Пти, т. е. не зависит от температуры. Поэтому в области высоких температур зависимость теплопроводности от температуры определяется преимущественно температурными изменениями длины свободного пробега фононов.

Поскольку при $T \gg T_D$ в соответствии с моделью Дебая C_Φ примерно постоянна, число рассеянных на большие углы фононов достаточно велико. Тогда длина свободного пробега окажется обратно пропорциональной вероятности столкновения с фононами этого типа. Такая вероятность пропорциональна их числу, а следовательно, и температуре T , поскольку при высоких температурах, согласно дебаевской теории теплоемкости, число фононов пропорционально температуре. В итоге получается, что при высоких температурах длина свободного пробега фонона изменяется обратно пропорционально температуре:

$$l_\Phi \propto \frac{1}{T}.$$

Отсюда при $T \gg T_D$

$$\lambda(T) = \frac{\text{const}}{T}, \quad (4.3.15)$$

что и наблюдается экспериментально.

Оценим температурную зависимость коэффициента теплопроводности при низких температурах ($T \ll T_D$). Поскольку в этом случае C_V пропорциональна T^3 , то число фононов, рассеиваемых с перебросом, быстро уменьшается при понижении температуры до нуля. Отсюда вероятность процесса переброса уменьшается тоже по экспоненте, а это означает, что и длина свободного пробега фонона с понижением температуры должна изменяться по экспоненте. Однако этого не происходит, так как начинает сказываться рассеяние фононов на структурных неоднородностях (дефектах, границах зерен, границах кристалла и т. п.). В таком случае l_Φ определится в основном концентрацией дефектов, не зависящей от температуры. Следовательно, поскольку, согласно закону кубов Дебая, $C_V(T) \sim T^3$, величина $\lambda(T)$ тоже будет пропорциональна T^3 , что и наблюдается экспериментально ($\lambda \sim T^3$).

Если же концентрация дефектов невелика, то рост теплопроводности происходит преимущественно за счет резко возрастающего экспоненциального члена для l_Φ , так что

$$\lambda_\Phi \propto T^2 \exp\left(\frac{T_D}{T}\right).$$

В этом случае при приближении температуры к $T = 0$ К, когда вероятность процесса переброса становится незначительной, длина свободного пробега l_{ϕ} становится сравнимой с размерами образца и также не зависит от температуры. При дальнейшем понижении температуры коэффициент теплопроводности резко падает вплоть до нуля – так же, как и теплоемкость, т. е. как T^3 .

Описанное выше изменение теплопроводности с изменением температуры хорошо подтверждается многочисленными экспериментальными данными. На рис. 4.36 приведена типичная зависимость коэффициента теплопроводности от температуры.

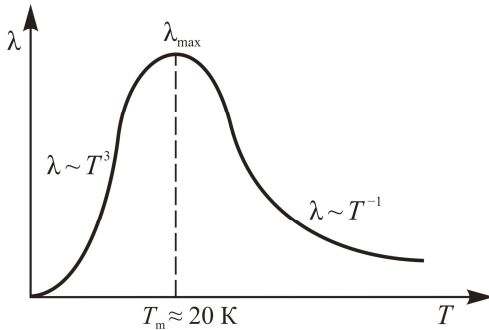


Рис. 4.36. Типичные зависимости фоновой теплопроводности от температуры для диэлектриков

4.3.4. Тепловые свойства электронного газа

Теплоемкость свободных электронов. Как было показано в п. 4.2.1, согласно классической теории удельная теплоемкость электронного газа подчиняется соотношению (4.2.9) в форме $C_e = (3/2)kn$ или для 1 моля вещества

$$C_V = (3/2)R,$$

где n – концентрация свободных электронов, k – постоянная Больцмана, R – газовая постоянная. Это означает, что свободные электроны также должны вносить вклад в тепловую энергию кристалла, приводя к его полной теплоемкости, равной

$$C_V = 3R_{(\text{ионы})} + 3R/2_{(\text{электроны})} = 9R/2.$$

Однако, как показывают эксперименты, даже для металлов, в которых наиболее высока концентрация свободных электронов, вклад электронов в теплоемкость практически отсутствует, что необъяснимо в рамках классического подхода. Данное противоречие теории и эксперимента было объяснено в рамках зонной модели энергетического спектра электронов в кристаллах.

Как следует из рис. 2.15 (см. Т. 1), основная часть электронов в силу ступенчатости функции распределения Ферми – Дирака остается совершенно

нечувствительной к изменениям температуры. В результате при обычных температурах электроны практически не вносят вклад в теплоемкость кристалла, поскольку тепловым возбуждением затронута лишь очень небольшая их часть в интервале $(kT - 2kT)$ вблизи энергии Ферми ε_F . Это легко показать, если рассчитать среднюю энергию газа свободных электронов в металле.

Средняя энергия электронов может быть представлена как (см. Т. 1, формула (2.23.3))

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2} d\varepsilon}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}\right) + 1}, \quad (4.3.16)$$

где интеграл называется *интегралом Ферми*. Нахождение интеграла Ферми в соотношении (4.3.16) приводит к следующему выражению для средней энергии газа свободных электронов в металле (см. Т. 1, п. 2.23):

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{3}{5} n \frac{(\varepsilon_F(T))^{5/2}}{(\varepsilon_F(0))^{3/2}} \left[1 + \frac{5}{8} \left(\frac{\pi kT}{\varepsilon_F(T)} \right)^2 \right].$$

Отсюда, используя формулу (4.3.16) для температурной зависимости энергии Ферми, получим выражение для полной энергии газа свободных электронов в кристалле:

$$\begin{aligned} U &= \frac{3}{5} n \varepsilon_F(0) \left[1 + \frac{5}{8} \left(\frac{\pi kT}{\varepsilon_F(0)} \right)^2 \right] \left[1 - \frac{5}{24} \left(\frac{\pi kT}{\varepsilon_F(0)} \right)^2 \right] \approx \\ &\approx \frac{3}{5} n \varepsilon_F(0) \left[1 + \frac{5}{8} \left(\frac{\pi kT}{\varepsilon_F(0)} \right)^2 - \frac{5}{24} \left(\frac{\pi kT}{\varepsilon_F(0)} \right)^2 \right] = \frac{3}{5} n \varepsilon_F(0) \left[1 + \frac{5}{12} \left(\frac{\pi kT}{\varepsilon_F(0)} \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (4.3.17)$$

где полная энергия электронов при $T = 0$ К будет

$$U_0 = \frac{3}{5} n \varepsilon_F(0).$$

Дифференцируя (4.3.17) по температуре, имеем выражение для квантовой теплоемкости электронного газа в модели Зоммерфельда

$$C_{эл} = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \frac{n\pi^2 k^2}{2\varepsilon_F(0)} T,$$

которое дает линейную зависимость от температуры (рис. 4.37).

Из последних формул можно заключить, что при повышении температуры в тепловом возбуждении принимают участие не все свободные электроны, а лишь те из них, энергия которых близка к уровню Ферми E_F . Следовательно, только такие электроны способны давать вклад не только в электрическую проводимость, но и в электронную теплоемкость кристалла. Доля этих электронов очень мала, так как пропорциональна отношению тепловой энергии решетки к энергии Ферми kT/ε_F . Например, поскольку для металлов энергия Ферми порядка единиц электрон-вольт, то для $T = 300$ К величина $kT \approx 0,003$ эВ, так что отношение $kT/\varepsilon_F \ll 1$. Именно поэтому теплоемкость электронного газа при комнатных температурах оказывается гораздо меньше теплоемкости решетки кристалла, соответствующей закону Дюлонга – Пти.

Учитывая наличие вкладов в теплоемкость кристаллов от фононов и электронов, полную теплоемкость можно записать в виде

$$C_V(T) = C_{\text{эл}} + C_{\text{реш}}. \quad (4.3.18)$$

Как следует из соотношения (4.3.18) и видно из рис. 4.37, б, в области близких к абсолютному нулю температур с уменьшением температуры теплоемкость кристаллической решетки ($C_V \sim T^3$) снижается значительно быстрее, чем теплоемкость электронного газа ($C_{\text{эл}} \sim T$), так что основным становится вклад именно электронной теплоемкости $C_{\text{эл}}$. Однако это наблюдается только при очень низких температурах (порядка десятков кельвин), и обычно теплоемкостью электронного газа в кристаллах пренебрегают. Температура T_c , при которой эти составляющие равны, обычно составляет десятую долю температуры Дебая $T_c \approx (1/10)T_D \leq 30$ К.

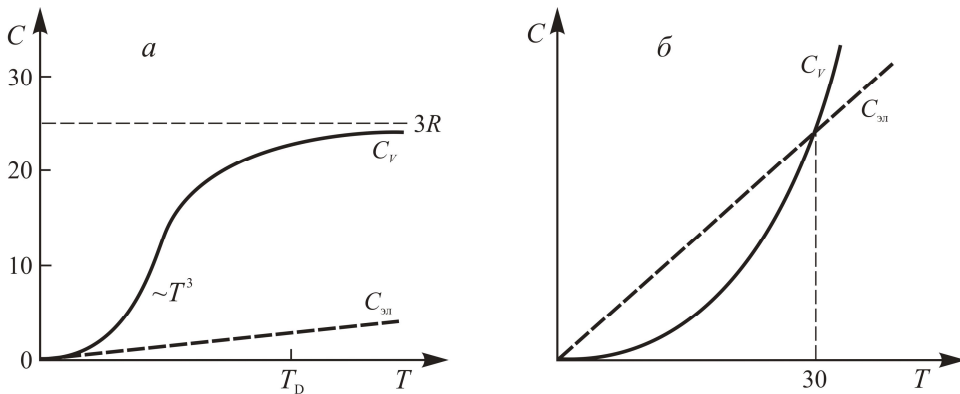


Рис. 4.37. Зависимость молярной теплоемкости твердых тел от температуры (а) и поведение кривых вблизи абсолютного нуля (б). Штриховая линия – зависимость теплоемкости электронного газа $C_{\text{эл}}$ от температуры T . C , Дж/(моль·К); T , К

Теплопроводность свободных электронов. Теплопроводность свободных электронов может быть рассмотрена в двух приближениях – классическом и квантовом. В классическом приближении Друде было получено соотношение для электронной теплопроводности в виде (4.2.10):

$$\lambda_e = \frac{1}{2} nk\tau \frac{3kT}{m} = \frac{3nk^2}{2m} \tau T,$$

в котором учтен лишь один механизм рассеяния электронов – рассеяние на неподвижных атомах. В реальности, исходя из квантовых представлений об электронном газе, при выводе его теплопроводности необходимо использовать квантовую статистику и учитывать, что основными механизмами рассеяния электронов, приводящим к ограничению переносимого электронами теплового потока, являются электрон-фононное, электрон-электронное и электрон-примесное рассеяния. Здесь отметим лишь некоторые основные моменты теплопереноса в электронном газе.

Как следует из квантовой теории электронного газа, в области высоких температур ($T \gg T_D$) основным механизмом рассеяния в металлических кристаллах являются электрон-фононные столкновения, которые приводят к не зависящему от температуры соотношению для коэффициента теплопроводности электронов

$$\lambda_e = \frac{\pi^2}{3} \frac{n\hbar^2}{mk}.$$

При низких температурах ($T \ll T_D$) необходимо принять во внимание, что электроны могут испускать или поглощать фононы лишь с энергиями $\hbar\nu \leq kT$. В этом случае концентрация участвующих в столкновениях фононов $n_\phi \sim T^2$. Отсюда следует, что вероятность электрон-фононного рассеяния в области низких температур будет обратно пропорциональна квадрату температуры, так что электрон-фононный вклад в теплопроводность будет пропорционален $1/T^2$:

$$\lambda_e \propto \frac{(\hbar\nu_D)^2}{(kT)^2}.$$

4.4. Диффузия (массоперенос) в кристаллах

Одним из важных следствий термических воздействий (нагрева) на кристаллические системы является инициирование миграции атомов по кристаллической решетке, которое принято называть диффузией.

Диффузия в конденсированных системах очень распространена. Она играет важнейшую роль в различных технологических процессах, в первую очередь таких, как кристаллизация, легирование, окисление, химико-термическая обработка, геттерирование примесей, создание *p-n*-переходов и др. Кроме того, диффузия определяет фазовые и структурные превращения, связанные с распадом пересыщенных твердых растворов, растворение или коагуляцию частиц дисперсных фаз, образование дефектных комплексов, формирование примесных атмосфер (атмосфер Коттрелла) вокруг дислокаций и границ зерен, перераспределение точечных дефектов и др. Так, например, в процессе кристаллизации твердых тел со сложной кристаллической структурой (химические соединения) без диффузии нельзя получить однородные кристаллы стехиометрического состава. Диффузия позволяет уничтожить такое нежелательное явление при кристаллизации сплавов, как ликвация и др.

Диффузия весьма важна при синтезе сложных композиционных материалов, например, при спекании порошков тугоплавких металлов. Именно она позволяет получать композиции из металлов с температурами плавления выше 2500–3000 К (вольфрам, рений и др.), которые в принципе невозможно получить методами кристаллизации из расплава.

Особо важное значение имеют диффузионные процессы, протекающие в тонкопленочных композициях, состоящих из нескольких различных по природе тонких слоев материалов. Такие композиции широко применяются в твердотельной электронике. В массивных материалах изменения состава, происходящие вследствие взаимной диффузии, практически не вызывают изменения свойств этих материалов. В тонкопленочных же композициях, в особенности в слоях толщиной 1–100 нм, диффузионные процессы могут привести к изменению состава и структуры этих слоев в целом. Следствием этого может быть деградация параметров приборов и интегральных схем, вплоть до их выхода из строя.

Можно сказать, что многие технологические процессы, используемые для получения кристаллов и готовых изделий из них, а также для придания им нужных свойств, невозможны в принципе без диффузии.

4.4.1. Общие сведения о диффузии

Тепловые колебания атомов в твердых телах сводятся в основном к колебаниям с малой амплитудой, которые они совершают около средних положений равновесия. Однако кинетическая энергия колеблющихся около положения равновесия атомов не остается постоянной вследствие их взаимодействия с соседними атомами. Даже при малой средней кинетической энергии в кристалле всегда найдется некоторое число атомов, кинетическая энергия которых достаточна для преодоления межатомного потенциального барьера и перехода в новое равновесное состояние (вследствие максвеллов-

ского закона распределения скоростей). Такой атом может уйти из своего равновесного положения (узла кристаллической решетки) и, преодолев потенциальный барьер, который создан окружающими его атомами, перейти в некоторое новое, незанятое положение равновесия (междуузлие или незанятый узел – вакансию). При этом переходе атом теряет избыточную энергию, отдавая ее окружающим атомам кристаллической решетки. Через некоторое время атом может получить достаточную энергию, чтобы снова перейти в соседний свободный узел или междуузлие. Перемещения атомов, обусловленные тепловым движением, и составляют основу диффузионных процессов в твердых телах.

Таким образом, под диффузией следует понимать процесс направленного переноса атомов в твердых телах, связанный с тепловым движением этих частиц. Элементарный акт диффузии всегда состоит в скачке одиночных атомов или небольших атомных групп на расстояния порядка межатомных.

Диффузия в конденсированных средах как процесс переноса примесных атомов или атомов основного вещества наблюдается в любом веществе, независимо от его агрегатного состояния. Тепловое движение постоянно переносит атомы из одного места в другое, непрерывно перемешивая их.

Общей причиной, вызывающей перемещение атомов при диффузии, является разность химических потенциалов в различных точках системы. Возникновение этой разности, как правило, связано с неравномерным распределением атомов, т. е. с наличием градиента их концентрации, но может быть также вызвано существованием градиентов температуры или полей (электрических, механических и др.).

В идеальной кристаллической решетке, в которой атомы совершают лишь колебательные движения около своих положений равновесия, процессы диффузии маловероятны. Поэтому диффузионное перемещение примесных атомов или собственных атомов решетки всегда определяется наличием в ней таких дефектов, как вакансий, междуузельных атомов, дивакансий, а также более сложных дефектов – дислокаций, границ раздела, вакансионных и примесных кластеров (скоплений) и др.

Первый и второй законы Фика. Диффузия атомов в твердом теле представляет собой один из трех основных процессов направленного перемещения вещества и энергии. К ним также относятся процессы переноса заряда (электронов, ионов) и распространения акустических и оптических решеточных волн (фононов), определяющих электро- и теплопроводность. Однако если последние два процесса связаны в основном с перемещением электронов и тепловой энергии, то при диффузии атомов в твердом теле всегда наблюдается направленное перемещение вещества (массоперенос). Все три процесса описываются однотипными уравнениями: плотность потока (электронов, дырок, ионов, тепла, диффундирующих атомов) прямо пропорциональна градиенту параметра, определяющего основные условия процесса:

$$I = -\sigma \frac{dU}{dx}, \quad q = -\lambda \frac{dT}{dx}, \quad j = -D \frac{dc}{dx}, \quad (4.4.1)$$

где $\frac{dU}{dx}$, $\frac{dT}{dx}$, $\frac{dc}{dx}$ – соответственно градиенты электростатического потенциала, температуры и концентрации; I – плотность потока электронов; q – плотность теплового потока; j – плотность потока диффундирующих атомов, σ – удельная электропроводность; λ – коэффициент теплопроводности; D – коэффициент диффузии. Отрицательные знаки в правой части уравнений (4.4.1) указывают на то, что процесс направлен в сторону уменьшения градиента.

Закономерности (4.4.1) имеют не только близкий смысл, но и однотипные ограничения. При очень больших градиентах потенциала, температуры и концентрации указанные соотношения неприменимы. Кроме того, параметры σ и D , определяющие перенос заряда и массы, не всегда являются константами и могут зависеть от многих факторов, основной из которых – температура. Эта зависимость имеет вид

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \quad D = D_0 \exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \quad (4.4.2)$$

где E – энергия активации соответствующего процесса. Отсутствие аналогичного соотношения для коэффициента теплопроводности в (4.4.2) обусловлено более сложными механизмами переноса тепла электронами и фононами.

Как отмечалось выше, в общей форме движущей силой диффузии является наличие градиента химического потенциала $\text{grad}\mu$ (или $d\mu/dx$ для одномерного случая), который может быть вызван разными причинами – неоднородным распределением температуры, состава, механических напряжений, внешних и встроенных электрических полей и т. д. в кристалле.

Установлено, что количество вещества, продиффундировавшего в единицу времени через единицу площади поверхности в направлении, перпендикулярном направлению диффузии, – так называемая плотность диффузионного потока атомов j , пропорционально этому градиенту. Такая зависимость описывается первым законом диффузии, который для одномерной диффузии записывается как

$$\vec{j} = -L \text{grad}\mu, \quad (4.4.3)$$

где L – коэффициент пропорциональности, определяющий скорость выравнивания химического потенциала μ . Знак «минус» перед правой частью уравнения (4.4.3) означает, что поток направлен в сторону, противоположную градиенту химического потенциала.

Наиболее распространена так называемая свободная диффузия, когда система (материал) состоит не менее, чем из двух сортов атомов, распределенных неравномерно. В этом случае градиент химического потенциала обусловлен наличием градиента концентрации C в распределении атомов $\text{grad}C \neq 0$. При ненулевом градиенте концентрации в материале возникает направленный диффузионный поток, который стремится выровнять концентрацию входящих в систему (материал) атомов, т. е. сделать их распределение по кристаллу однородным.

Диффузионный поток j , вызванный наличием градиента концентрации атомов, описывается уравнением

$$j = -D \text{grad}C, \quad (4.4.4)$$

или в случае одномерной диффузии уравнением

$$j = -D \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (4.4.5)$$

Здесь C – концентрация диффундирующих частиц (м^{-3}), а коэффициент пропорциональности D называется коэффициентом диффузии ($\text{м}^2/\text{с}$).

Уравнение (4.4.4) или (4.4.5) принято называть *первым законом Фика*.

Диффузионные процессы можно формально представить как комбинацию из трех видов миграции атомов: одномерной (миграция по цепочкам атомов), двумерной (поверхностная) и миграции в пространстве. На рис. 4.38 представлено перемещение атома-диффузанта по поверхности и в объеме кристалла с использованием элементарных скачков в соответствующих атомных цепочках.

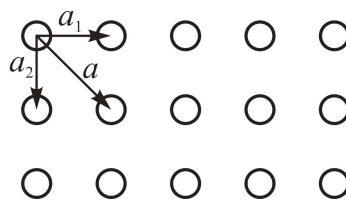


Рис. 4.38. Возможные пути диффузионного перемещения атома

Перемещение атома-диффузанта вдоль цепочки атомов со средним межатомным расстоянием a равносильно одновременному его перемещению по двум взаимно перпендикулярным атомным цепочкам с межатомными расстояниями a_1 и a_2 :

$$a = \sqrt{a_1^2 + a_2^2}.$$

Положение не меняется, если принять к сведению другой механизм диффузии (вакансионный, по междоузлиям и т. д.). Скорость диффузионного смещения атома-диффузанта за n скачков из узла в узел в направлении a равна

$$v = \frac{na}{\tau},$$

где na – путь диффундирующего атома в единицах межатомных расстояний; τ – время перемещения.

Рассмотрим в кристалле две атомные плоскости с расстоянием между ними a , с поверхностными концентрациями N_1 и N_2 атомов диффузанта (рис. 4.39).

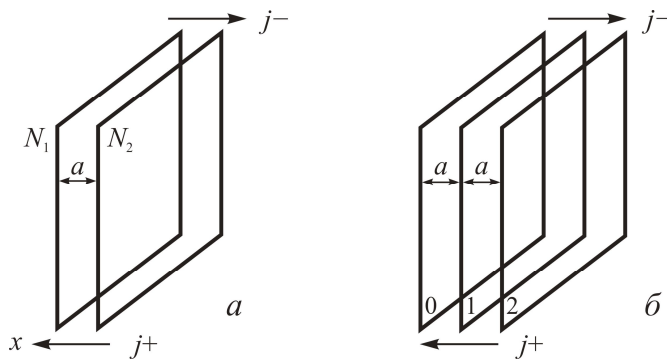


Рис. 4.39. К выводу первого (а) и второго (б) законов Фика

Предположим для определенности, что $N_1 < N_2$. Если градиент концентрации вдоль выбранного направления x равен $\partial N / \partial x$, то

$$\Delta N = a \frac{\partial N}{\partial x},$$

или, переходя к объемной концентрации C ($Ca = N$), имеем

$$\Delta C = a \frac{\partial C}{\partial x}.$$

Тогда плотность потока атомов, пересекающих плоскости, будет равна

$$j = -av \frac{\partial C}{\partial x}, \tag{4.4.6}$$

где $av = D$ – коэффициент диффузии в первом законе Фика (4.4.5).

Макроскопическая величина D определяется скоростью диффузионного смещения отдельного атома и геометрическими параметрами кристаллической решетки. Скорость диффузионного перемещения атома-диффузанта зависит от его свойств и типа кристаллической решетки, в которой происходит диффузия.

Аналогичным образом может быть выведено второе уравнение диффузии – *второй закон Фика*, которое определяет зависимость концентрации атомов-диффузантов от времени. Концентрация атомов-диффузантов в некоторой средней плоскости 1 на рис. 4.39, б зависит от диффузионных потоков, приходящих от левой крайней плоскости 0 и уходящих к правой крайней плоскости 2. Изменение концентрации во времени будет

$$\frac{\Delta c}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta x} (j_1 - j_2).$$

Переходя к пределу ($\Delta t \rightarrow 0$, $\Delta x \rightarrow 0$), получаем дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\operatorname{div} j = -\frac{\partial}{\partial x} j = av \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

или

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (4.4.7)$$

При заданном коэффициенте диффузии уравнение (4.4.7) описывает характер распределения концентрации диффундирующих частиц в различных точках среды как функцию времени и называется *вторым законом Фика*.

Уравнения (4.4.5) и (4.4.7) получены в предположении равновероятности диффузионного смещения атомов во всех кристаллографических направлениях кристалла, определяемой симметрией и одинаковой формой потенциальных барьеров. При этом ограничении коэффициент диффузии D не зависит от x , y , z и является скалярной величиной, поскольку он изотропен.

Связь коэффициента диффузии с физико-химическими свойствами кристаллов. Коэффициент диффузии является материальной константой, характеризующей скорость диффузии. Как отмечалось выше, с ростом температуры в твердых телах коэффициент диффузии обычно резко возрастает, изменяясь по экспоненциальному закону вида

$$D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{E}{kT}\right). \quad (4.4.8)$$

Здесь k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; D_0 и E – основные параметры, зависящие от механизма и скорости диффузии. Величина E носит название энергии активации диффузии, а предэкспоненциальный множитель D_0 часто называют частотным коэффициентом (фактором).

Величины D_0 и E связаны с физико-химическими свойствами вещества, в котором происходит диффузия (оно иногда называется матрицей), а также с физико-химическими свойствами диффундирующих атомов (диффузанта). В ряде случаев коэффициент диффузии зависит также от концентрации диффузанта.

Экспоненциальный характер изменения коэффициента диффузии с температурой был установлен эмпирическим путем, а затем обоснован и теоретически. Экспоненциальный (активационный) вид соотношения (4.4.8) для температурной зависимости коэффициента диффузии означает, что для совершения элементарного акта диффузии атом должен преодолеть некоторый энергетический барьер, величина которого должна быть порядка энергии активации диффузии E , но не равна ей, как будет показано ниже.

В зависимости от конкретного механизма диффузии в кристалле параметр E по порядку величины колеблется примерно от 0,5 до нескольких электрон-вольт. В то же время средняя тепловая энергия колеблющихся атомов (kT) в твердом теле в зависимости от температуры меняется от 0,02–0,03 эВ до 0,2 эВ, что существенно меньше E . Следовательно, для того чтобы диффузия атомов стала возможной, необходима весьма значительная локальная флуктуация тепловой энергии колеблющихся атомов в кристаллической решетке.

Вероятность f перескока атома из одного положения в другое как элементарного акта диффузии пропорциональна вероятности таких флуктуаций. Последняя, как и вероятность любых термически активируемых процессов, пропорциональна $\exp(-E/kT)$, так как распределение квантов тепловой энергии в кристалле при высоких температурах подчиняется статистике Максвелла – Больцмана. Вероятность перескока f , кроме того, пропорциональна частоте колебаний атомов ν , т. е. количеству попыток совершения перескока, и числу ближайших свободных мест, на которые атом может перескочить в случае преодоления активационного барьера. Эта часть вероятности перескока и определяет предэкспоненциальный множитель в соотношении (4.4.8).

Виды диффузии. Говоря о свободной диффузии, принято различать два ее вида – гетеродиффузию и самодиффузию. *Гетеродиффузия* – это диффузия чужеродных (примесных, легирующих) атомов при наличии градиента их концентрации. *Самодиффузия* – частный случай диффузии в чистом веществе или упорядоченном твердом растворе постоянного состава атомов этого вещества или компонентов раствора.

Направленная самодиффузия может осуществляться под влиянием случайно возникших локальных градиентов изотопного состава атомов в сторону выравнивания этого градиента. Искусственное создание такого градиента часто используют для экспериментального определения коэффициентов самодиффузии.

Кроме свободной диффузии различают так называемую *вынужденную диффузию*, когда градиент химического потенциала возникает под воздействием направленных внешних или внутренних сил.

Различают следующие основные виды вынужденной диффузии.

Термодиффузия (или эффект Соре) происходит под действием градиента температуры dT/dx . В этом случае поток диффундирующих частиц направлен в сторону более низких температур. Примером термодиффузии является диффузия носителей заряда от горячего спая к холодному в термоэлектрических преобразователях энергии. О термодиффузии в газах см. в п. 3.2, Т. 1.

Электродиффузия (или электромиграция) протекает под действием электрического поля (градиента потенциала dU/dx) на заряженные частицы (ионы) кристалла. При этом ионы диффундируют в сторону электрода противоположного знака – катионы к аноду, а анионы – к катоду. Примером электродиффузии является диффузия ионов примесей в полупроводниках под влиянием внутренних электрических полей (например, в *p-n*-переходах), ионов в тонкопленочных алюминиевых проводниках металлизации интегральных схем, а также электролитические процессы при электрохимической коррозии.

Бародиффузия осуществляется под действием поля силы тяжести или градиента давления dP/dx . Примером бародиффузии в твердых телах является ликвация (неоднородное распределение) примесей вследствие различия плотности компонентов сплава в слитке, кристаллизующемся из расплава. Она, в частности, приводит к обогащению нижней части слитка более тяжелыми элементами.

Восходящая диффузия происходит под действием градиента упругих напряжений, который принято характеризовать величиной da/dx , где a – параметр кристаллической решетки. Поток атомов больших размеров при этом направлен в область, испытывающую напряжения растяжения, а поток атомов с малым ионным радиусом – в сжатую область. Именно такой вид диффузии приводит к образованию примесных атмосфер вокруг дислокаций, границ зерен и дисперсных фаз при формировании кристаллов.

При наличии скорости дрейфа частиц первый закон Фика принимает вид

$$j = -D \text{grad} C + C v = -D \nabla C + C v, \quad (4.4.9)$$

где j , $\text{grad} C$ (∇C) и v – плотность потока, градиент концентрации и средняя скорость дрейфа диффундирующих частиц; D – коэффициент диффузии.

Используя уравнение непрерывности, для одномерного случая из выражения (4.4.9) можно получить уравнение диффузии

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (4.4.10)$$

4.4.2. Кинетика процессов самодиффузии и диффузии примесей в кристаллах

Как отмечалось выше, возможность диффузии обусловлена тем, что даже при малой средней кинетической энергии колеблющихся около положения равновесия атомов из-за их взаимодействия с соседними атомами в кристалле всегда найдется некоторое число атомов с достаточно большой энергией. Именно такие локальные флуктуации энергии колеблющихся атомов (ионов) и позволяют им преодолевать межатомный потенциальный барьер и путем перескока переходить в новое равновесное состояние. В твердых телах из-за больших сил взаимодействия между частицами эти процессы протекают обычно во много раз медленнее, чем в газах и жидкостях.

Для совершения элементарного акта диффузии (перескока) атом всегда преодолевает определенный энергетический барьер. Как отмечалось в предыдущем разделе, вероятность f (или P_m) перескока атома пропорциональна вероятности локальной флуктуации его энергии $\exp(-E/(kT))$, частоте колебаний атомов ν и некоторому параметру z . Последний равен числу атомов в ближайшей координационной сфере, на которые атом может перескочить, если там образуется вакансия, либо числу ближайших междоузлий. Кроме того, эта вероятность также пропорциональна возрастанию энтропии ΔS при перескоке, связанному с нарушением упорядоченного расположения атомов в решетке. Отсюда следует, что

$$f = P_m = Az \exp \frac{\Delta S}{k} \exp \left(-\frac{E}{kT} \right),$$

где A – коэффициент пропорциональности, близкий к единице.

При более строгом подходе необходимо учитывать такие дополнительные факторы, как зависимость коэффициента диффузии от концентрации, меняющейся в процессе диффузии, от наличия внутренних электрических полей, от возможного комплексообразования между диффузантом и другими примесями и дефектами и др.

Общим для всех случаев диффузии является параболический характер зависимости между временем диффузии и расстоянием, пройденным за это время диффузантом (оно называется длиной диффузии). Рассмотрим харак-

тер этой зависимости на простейшем примере одномерной диффузии при наличии градиента концентрации примесей. Для упрощения принимается, что диффузانت сконцентрирован в плоскости $x = 0$. При этом в начальный момент полагается, что в глубине кристалла примесей нет.

Пусть длина одного скачка во всех случаях одинакова и равна δ ($\sim a$), а направления скачков носят характер случайных блужданий, т. е. скачки в обоих направлениях вдоль оси X равновероятны. В таком случае при большом числе скачков среднее алгебраическое расстояние \bar{x} , на которое каждый атом удалится от места начала скачков, будет равно нулю. Однако среднеквадратичное расстояние \bar{x}^2 (среднее из значений x^2 для множества атомов, каждый из которых совершил n скачков), являющееся мерой общего расстояния, пройденного атомами от начала отсчета, не будет равно нулю. Тогда для каждого атома получим

$$\bar{x}^2 = (\delta_1 + \delta_2 + \dots + \delta_N)(\delta_1 + \delta_2 + \dots + \delta_N) = \delta_1^2 + \delta_2^2 + \dots + \delta_N^2 + 2\delta_1\delta_2 + \dots + 2\delta_{N-1}\delta_N. \quad (4.4.11)$$

Поскольку все δ_i для упрощения имеют одинаковые значения и с равной вероятностью являются положительными и отрицательными, то для скачков множества атомов сумма всех двойных произведений в (4.4.11) будет равна нулю. Отсюда следует, что

$$\bar{x}^2 = n\delta^2 \quad \text{или} \quad \sqrt{\bar{x}^2} = \sqrt{n\delta^2}.$$

Полное число скачков n будет равно произведению частоты (вероятности) скачков $f = P_m$ на время t совершения n скачков. Тогда

$$\sqrt{\bar{x}^2} = \sqrt{ft\delta^2}. \quad (4.4.12)$$

По аналогии диффузии газов (см. Т. 1, п. 3.2) для случая трехмерной диффузии имеет место соотношение

$$D = \frac{f\delta^2}{6},$$

а для одномерных случайных блужданий

$$D = \frac{f\delta^2}{2}. \quad (4.4.13)$$

Сопоставляя (4.4.12) и (4.4.13) можно показать, что для одномерной диффузии будет справедливо соотношение (см. Т. 1, п. 3.1)

$$\sqrt{\bar{x}^2} = \sqrt{2Dt}, \quad \text{т. е. } \bar{x}^2 = 2Dt. \quad (4.4.14)$$

Диффузионное перемещение атомов примеси в решетке (*атомная или примесная диффузия*) либо собственных атомов решетки (*самодиффузия*) всегда связано с наличием в ней дефектов (вакансий, междоузельных атомов, дивакансий, дислокаций, внутренних границ раздела, вакансионных и примесных кластеров и др.). Однако наиболее изученным механизмом диффузии атомов или ионов является их *диффузия по междоузлиям* либо *вакансиям* (свободным узлам решетки). В последнем случае движение атомов (ионов) может рассматриваться так же, как *диффузия вакансий*.

Простейшая модель расчета параметров диффузии в кристаллах с учетом образования вакансий либо междоузельных атомов была создана Френкелем.

Теория самодиффузии Френкеля. Процесс диффузии в модели Френкеля, разработанной на основе классической кинетической теории кристаллов, для вакансионного механизма диффузии включает в себя следующие атомные процессы:

- *колебания атома* в узле решетки около положений равновесия с частотой ω_0 ;
- *переход атома* из соседнего узла решетки в междоузлие и *образование вакансии* V ;
- *колебание атома в междоузлии*, показанное на рис. 4.40, *а* (или, что одно и то же, на вершине барьера, рис. 4.40, *б*) в течение длительного времени, прежде чем он перескочит в соседнее свободное место (на место вакансии);
- *переход атома на место вакансии* через междоузлие (рис. 4.40, *а*) путем преодоления потенциального барьера E_m (рис. 4.40, *б*);

Последнее означает перемещение вакансии на место продиффундировавшего атома. В этом смысле модель Френкеля может рассматриваться как диффузия вакансий по кристаллу.

Вследствие описанных выше тепловых диффузионных процессов происходит непрерывное перемешивание атомов или ионов в кристалле. При этом скорость перемешивания определяется вероятностью перехода атома из одного равновесного положения в другое (например, из узла на вакансию). Учитывая статистический характер процесса, эта вероятность скачка f (или P_m) изменяется с температурой по экспоненциальному закону:

$$P_m = f = \omega_0 \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right). \quad (4.4.15)$$

Здесь E_m – высота потенциального барьера, который должен преодолеть атом, чтобы перейти из одного положения равновесия в решетке в другое,

например из одного узла в другой узел; ω_0 – собственная частота колебаний атомов (порядка дебаевской характеристической частоты 10^{12} – 10^{13} Гц).

Согласно теории Френкеля, высота барьера E_m может рассматриваться как энергия миграции атома либо вакансии, которая зависит от прочности межатомной связи в решетке.

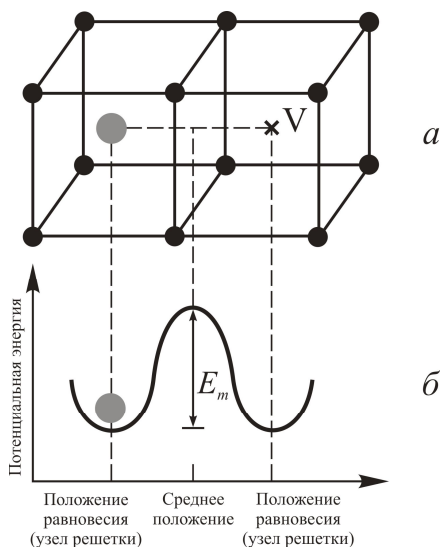


Рис. 4.40. Скачок атома диффузанта в соседний пустой узел V для кристаллической решетки (а) и зависимость потенциальной энергии диффундирующего атома от его расположения (б). E_m – энергия активации (потенциальный барьер) диффузии

Исходя из (4.4.15), Я. И. Френкель вместо величины вероятности перехода f или P_m вводит в рассмотрение обратную величину τ , представляющую собой среднее время нахождения частицы в одном из положений равновесия и называемое средним временем оседлой жизни атома в положении равновесия, для которого справедливо соотношение

$$\tau = \frac{1}{P_m} \approx \tau_0 \exp \frac{E}{kT}. \quad (4.4.16)$$

Здесь τ_0 – постоянная, по порядку величины равная периоду собственных колебаний атомов в узлах кристаллической решетки ($\sim 10^{-12}$ – 10^{-13} с).

В условиях термодинамического равновесия относительная концентрация вакансий имеет вероятностное значение

$$P_v = \frac{f}{\omega_0} = \frac{\tau_0}{\tau} = V = \frac{n}{N} = \exp \left(-\frac{E_v}{kT} \right), \quad (4.4.17)$$

где n – число вакансий, N – число атомов в единице объема. При $E_v \sim 1$ эВ для металлов с плотноупакованной структурой относительная концентрация вакансий (4.4.17) имеет порядок 10^{-3} – 10^{-4} , т. е. очень мала.

Относительно низкая концентрация термически равновесных вакансий приводит к среднему расстоянию между ними

$$l_0 = \frac{1}{n^3} = \frac{1}{(VN)^3} = \frac{1}{\left(V \frac{1}{a^3}\right)^3} = \frac{a}{V^{1/3}} \approx 3 \cdot 10^{-7} \text{ см},$$

а следовательно, к отсутствию взаимодействия между ними. Это позволяет рассматривать совокупность равновесных вакансий в кристаллах как идеальный газ и применять для определения их коэффициента диффузии известную формулу из кинетической теории газов (см. Т. 1, п. 3.2)

$$D = \frac{1}{3} \langle v_b \rangle \langle l \rangle = \frac{1}{3} \frac{\langle l^2 \rangle}{\tau}, \quad (4.4.18)$$

где $\langle l \rangle$ и $\langle v_b \rangle$ – средняя длина свободного пробега и средняя скорость движения атомов (вакансий). Отличие от газа здесь состоит в том, что элементарное перемещение вакансии (или атома) за единичный акт диффузии всегда дискретно и составляет одну и ту же величину $\delta \sim a$. Поэтому удобнее перейти от средних значений длины свободного пробега к среднеквадратичным.

Обозначим через x фактическую (переменную) длину свободного пробега частиц в газе. Тогда вероятность того, что частица пролетит этот путь x , не испытав ни одного столкновения, равна $\exp(-x/l)$, а среднеквадратичное значение (по теореме о среднем) будет равно

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\int_0^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x}{l}\right) dx}{\int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{x}{l}\right) dx} = 2 \langle l^2 \rangle. \quad (4.4.19)$$

Учитывая, что в кристаллах $\langle x^2 \rangle = \delta^2$, и используя выражения (4.4.18) и (4.4.19), для коэффициента диффузии вакансий получим

$$D_b = \frac{\delta^2}{6\tau} = \frac{\delta^2}{6\tau_0} \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right). \quad (4.4.20)$$

Если рассматривать вакансионный механизм диффузии атомов по кристаллу, то во всех соотношениях необходимо учесть тот факт, что для того, чтобы атому в узле решетки совершить элементарный акт диффузии (скачок

из узла на вакансию), необходимо «ожидать», пока к нему эта вакансия подойдет. Другими словами, в процессе диффузии по Френкелю одновременно идут как бы два процесса – генерация вакансии и скачок на нее атома. Поэтому при расчете коэффициента диффузии (вероятности скачка) необходимо учесть вероятность подхода вакансии на расстояние скачка от атома.

Поскольку вероятность образования вакансии P_v равна ее относительной концентрации V (см. (4.4.17)), полная вероятность P того, что рядом с атомом образуется вакансия и этот атом совершит на нее перескок, равна произведению вероятностей:

$$P = P_m P_v = \frac{1}{\tau_0} \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right) \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right) = \frac{1}{\tau_0} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right),$$

где E_v – энергия образования вакансии, а

$$E = E_m + E_v \quad (4.4.21)$$

и есть энергия активации процесса самодиффузии.

По аналогии с соотношением (4.4.20) и используя (4.4.21), получим новое выражение для коэффициента диффузии атомов в кристалле по вакансиям:

$$D = P_v D_v = \frac{\delta^2}{6\tau_0} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) = D_0 \exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \quad (4.4.22)$$

где предэкспоненциальный множитель как раз и равен $D_0 = \delta^2/(6\tau_0)$ (он зависит от механизма диффузии). Формула (4.4.22) находится в полном согласии с ранее установленной для твердых тел эмпирической зависимостью коэффициента диффузии от температуры.

В реальных кристаллах процессы диффузии протекают много сложнее и одновременно могут работать несколько механизмов диффузии. Поэтому выведенные соотношения пригодны лишь для грубых оценок при выполнении диффузионных экспериментов.

Прямой теоретический расчет энергии активации чрезвычайно затруднен. В связи с этим различными авторами делались попытки связать ее с некоторыми другими величинами, поддающимися расчету или экспериментальному определению. Так, согласно Френкелю, при самодиффузии энергия активации должна быть близка по величине теплоте испарения кристалла. На опыте, как правило, наблюдаются более низкие значения.

Энергии активации самодиффузии различных элементов изменяются в широких пределах (10^3 – 10^5 Дж/моль). Статистический анализ показывает справедливость простого соотношения

$$E = 3kT_{\text{пл}}b^2, \quad (4.4.23)$$

где $T_{\text{пл}}$ – температура плавления кристалла, К; b – эмпирический множитель, величина которого для многих металлов лежит в пределах 1,5–2,0. Однако соотношение (4.4.23) пригодно лишь для грубой оценки энергии активации, так как отсутствует критерий выбора величины b .

Предэкспоненциальный множитель D_0 в большинстве случаев меняется в сравнительно узких пределах – от 10^{-6} до 10^{-4} см²/с.

Таким образом, теория Френкеля правильно обосновала температурную зависимость коэффициентов диффузии в твердых телах. Следует отметить, что в данной теории не удалось полностью раскрыть физический смысл диффузионных параметров. Это относится прежде всего к предэкспоненциальному множителю D_0 , который в рамках рассматриваемой теории лишен какого-либо физического смысла.

4.4.3. Частные решения уравнения диффузии

Как видно из формулы (4.4.22), для расчета коэффициента диффузии при данной температуре необходимо знать энергию активации диффузии E и предэкспоненциальный множитель D_0 , соответствующий определенному механизму диффузии.

Однако в экспериментах поступают наоборот, поскольку механизм диффузии на самом деле никогда точно не известен и, следовательно, рассчитывать параметры диффузии невозможно. Поэтому сначала экспериментально определяют коэффициент диффузии при различных температурах, откуда находят энергию активации и предэкспоненту, а затем проводят их сравнение с результатами расчетов для разных моделей механизмов диффузии.

При экспериментальном определении коэффициента диффузии в качестве модели распределения продиффундировавших атомов по глубине и во времени обычно используют решение уравнения диффузии с определенными краевыми условиями. Затем коэффициенту диффузии приписывают такие значения, при которых экспериментальное распределение атомов по глубине для разных времен диффузии находится в наилучшем соответствии с полученным модельным решением.

Обычно при экспериментальных исследованиях диффузии примесей в конденсированных средах используют уравнения диффузии для одномерного случая (4.4.7), либо уравнение для вынужденной диффузии (4.4.9), решаемые при определенных начальных и граничных условиях. Используемые при этом начальные условия устанавливают распределение диффузанта до начала процесса диффузии $C(x, 0)$ при времени $t = 0$, а граничные – в зависимости от типа источника диффузанта его концентрацию на поверхности.

Рассмотрим теперь некоторые частные решения, справедливые при заведомо приближенном допущении о независимости коэффициента диффузии от концентрации диффузанта.

Диффузия из бесконечно тонкого слоя в неограниченное тело (диффузия из непостоянного источника). Для случая диффузии из непостоянного источника считается, что диффундирующее вещество содержится в тонком слое толщиной h внутри неограниченного тела и поступает в полу-бесконечное тело через плоскость $x = 0$ (рис. 4.41). При этом исходное количество вещества в источнике постоянно убывает.

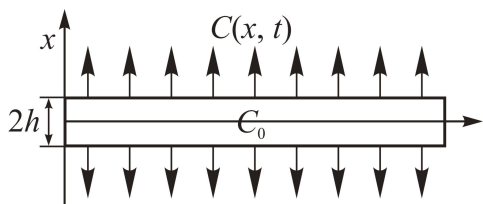


Рис. 4.41. Схема диффузии из ограниченного источника

В данном случае вследствие конечности количества диффундирующего вещества начальное распределение примеси задано в виде

$$C(x,0) = C_0 \text{ для } 0 < x < h, \quad C(x,0) = 0 \text{ в остальной области.}$$

Решая уравнение (4.4.7) методом разделения переменных, получим

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{h-x}{2\sqrt{Dt}} \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{h+x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right],$$

где $\operatorname{erf}(Y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^Y \exp(-z^2) dz$ – функция ошибок Гаусса, а $Y = \frac{h \pm x}{2\sqrt{Dt}}$. Уст-

ремля в этом соотношении h к нулю, получим формулу для диффузии из бесконечно тонкого слоя в полуограниченное тело. Учитывая, что $2C_0h = S = \text{const}$, где S – количество вещества в слое, отнесенное к единице площади слоя, имеем

$$C(x,t) = \frac{S}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp \left(-\frac{x^2}{4Dt} \right).$$

При $x = 0$ поверхностная концентрация примесных атомов равна

$$C_s = C(0,t) = \frac{S}{2\sqrt{\pi Dt}}.$$

Функция $\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$ является четной, что означает симметричное

распределение концентрации диффузанта относительно исходной плоскости источника $x = 0$ при различных временах отжига. По мере удаления от плоскости источника концентрация диффундирующих атомов C спадает, стремясь к нулю (рис. 4.42).

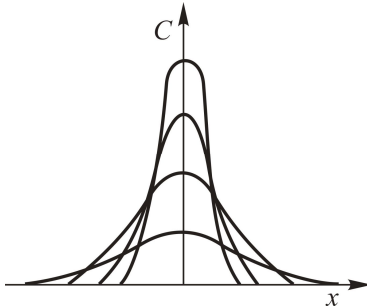


Рис. 4.42. Распределение диффузанта при диффузии из бесконечно тонкого слоя

Очевидно, что площадь под каждой из кривых равна C_0 , начальное распределение постепенно расплывается со временем, а максимум кривой понижается пропорционально корню квадратному из времени отжига. Таким образом, для диффузии из бесконечно тонкого слоя характерно уменьшение со временем количества диффундирующих атомов у поверхности за счет проникновения их в глубь кристалла.

Диффузия из бесконечно тонкого слоя в неограниченное тело при наложении вынужденной диффузии. Рассмотрим случай диффузии вещества из бесконечно тонкого слоя с концентрацией C_0 в неограниченное тело под влиянием не только градиента концентрации, но и внешнего силового поля, которое сообщает диффузанту дополнительную скорость v . Здесь необходимо использовать уравнение (4.4.10) для вынужденной диффузии, частное решение для которого будет иметь вид

$$C(x,t) = \frac{S}{2\sqrt{Dt}} \exp\left(-\frac{(x-vt)^2}{4Dt}\right).$$

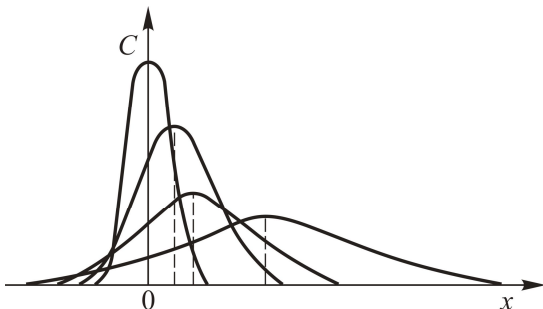


Рис. 4.43. Распределение диффузанта при диффузии из ограниченного источника и действии внешней силы

График распределения концентраций для данного случая показан на рис. 4.43. В отличие от случая свободной диффузии из источника ограниченной емкости (рис. 4.42) все концентрационные кривые сдвинуты в направлении действия поля на величину vt .

Диффузия из конечного источника толщиной h в полуограниченное тело с отражающей границей. Рассмотрим случай, когда вещество диффундирует из слоя толщиной h на поверхности полуограниченного тела. Источник толщиной h имеет в исходном состоянии повышенную, но конечную концентрацию диффузанта C_0 . При этом диффузия с поверхности вовне невозможна из-за наличия отражающей стенки, так что диффузия при отжиге идет только вверх. Для начальных условий

$$C(x,0) = C_0 \text{ при } x < h,$$

$$C(x,0) = 0 \text{ при } x > h$$

решение будет иметь вид

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{h-x}{2\sqrt{Dt}} \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{h+x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right].$$

Распределение концентрации при разных временах t для рассматриваемого случая показано на рис. 4.44. Как видно, до тех пор, пока на отражающей границе концентрация превышает $C_0/2$, на границе $x = h$ сохраняется концентрация $C_0/2$. Затем начинается уменьшение концентрации на $x = h$ до значений, меньших $C_0/2$.

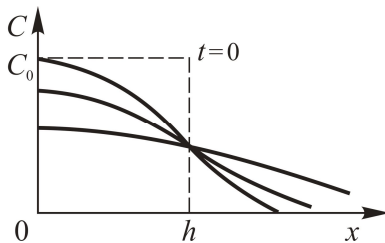


Рис. 4.44. Распределение диффузанта при диффузии из ограниченного источника с отражающей стенкой в полуограниченное тело

Примером такого вида диффузии может служить «разгонка» примеси после ее введения ионной имплантацией, например, в пластину кремния с последующим покрытием ее слоем оксида SiO_2 , через которое диффузия практически не идет.

Диффузия в полуограниченное тело из постоянного источника. Термин «диффузия из постоянного источника» означает, что в полуограниченное тело через плоскость $x = 0$ проникает извне диффундирующее вещество, причем на границе тела поддерживается постоянная, не зависящая от време-

ни поверхностная концентрация C_0 этого вещества, т. е. запас атомов диффундирующей примеси на поверхности или в питающей паровой фазе, контактирующей с ней, настолько велик, что не меняется в процессе диффузии (рис. 4.45). Примером такой диффузии является создание p - n -перехода при диффузии из газовой фазы.

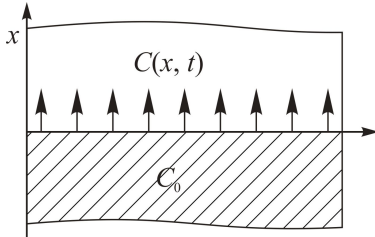


Рис. 4.45. Схема диффузии из постоянного источника

В этом случае начальные и граничные условия имеют вид

$$C(0, t) = C_0, \quad C(x, 0) = 0.$$

При таких условиях запишем решение уравнения (4.4.7):

$$C(x, t) = C_0 \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] = C_0 \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right),$$

где $\sqrt{Dt} = l_D$ – длина диффузии. Соответствующее распределение примесных атомов по глубине кристалла показано на рис. 4.46. Видно, что поток диффузии максимален в первые моменты времени и обращается в нуль при $t \rightarrow \infty$. Для таких условий диффузии характерен рост концентрации примеси в приповерхностном слое со временем и стремление ее к постоянной величине $C(x, \tau) = C_0$.

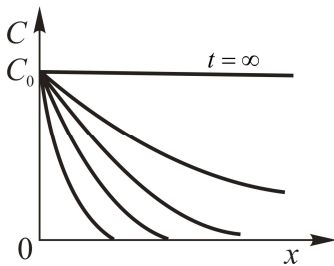


Рис. 4.46. Распределение диффузанта по глубине при диффузии из неограниченного источника

В заключение отметим, что подобные решения широко используются и в теории теплопроводности.

4.4.4. Структурные дефекты и диффузия атомов

Рассмотрим влияние дефектов на состояние кристаллической решетки и формирование механизмов диффузии. Определяющую роль в механизмах диффузии играют точечные дефекты (в особенности их взаимодействия между собой и с другими типами дефектов). Не менее важное влияние на диффузию оказывают и другие типы дефектов – линейные, поверхностные и объемные.

Говоря о влиянии дефектов на диффузию, следует указать также на изменение под их воздействием состояния кристалла как целого. В частности, образование вакансий сопровождается упругой релаксацией атомов вокруг вакансии, проявляющейся в смещении атомов, окружающих вакансию в направлении ее центра. В результате смещений атомов возникают локальные искажения решетки (статические искажения), локальные напряжения и уменьшение эффективного радиуса вакансии. Расчеты показывают, что в алмазоподобных решетках эффективный радиус вакансии составляет примерно $0,8$ ковалентного радиуса R атома. В решетках с металлическими связями – он еще меньше (примерно $(0,5-0,6)R$ атома). Поэтому появление вакансии приводит в большинстве случаев к уменьшению среднего периода решетки, так же как и примеси замещения, атомный радиус которых меньше, чем у матрицы.

Междоузельные атомы вызывают также локальные упругие искажения за счет симметричного смещения окружающих атомов в направлениях от центра междоузельного атома, т. е. эффект, противоположный по знаку, вызываемому вакансией. В результате наличие междоузельных атомов приводит к увеличению среднего периода решетки.

4.4.5. Механизмы диффузии в кристаллических твердых телах

Универсального механизма диффузионных перемещений для всех материалов и условий диффузии нет. В кристаллическом твердом теле существование кристаллической решетки, а также структурных дефектов, являющихся энергетически выгодными положениями для атомов, позволяет сравнительно легко (по отношению к газам, жидкостям и аморфным твердым телам) описать элементарные скачки атомов из одного положения равновесия в другое, составляющие основу диффузионных процессов. Тем не менее, в кристаллической решетке благодаря множеству видов дефектов существует большое число типов таких скачков атомов, т. е. большое число механизмов диффузии.

В зависимости от типа элементарного скачка из одного положения равновесия в другое можно представить следующие возможные механизмы миграции (диффузии) атомов и ионов по кристаллической решетке: парный

обмен, кольцевой обмен, вакансионный механизм, междоузельный механизм, миграция по границам зерен и др.

Парный обмен. Наиболее простым механизмом элементарного скачка, не требующим наличия структурных дефектов, является прямой обмен местами двух соседних атомов (рис. 4.47, *a*). Такой обмен может быть затруднен в кристаллах с плотной упаковкой из-за необходимости сильных сжатий окружающих атомов при элементарном скачке. Именно поэтому для такого механизма требуются в 3–4 раза большие энергии активации, чем для вакансионного механизма.

Кольцевой обмен. Если в прямом обмене одновременно участвуют несколько атомов, расположенных по кругу, и в результате все кольцо поворачивается на одно межатомное расстояние, то такой механизм называют кольцевым обменом (рис. 4.47, *б*). Хотя для кольцевого обмена атомов не требуется таких сильных сжатий кристаллической решетки, как это необходимо при парном обмене, тем не менее вероятность кольцевого механизма миграции в кристаллах также достаточно мала. Такой обмен атомов, как и парный обмен, чаще всего реализуется лишь в структурно-совершенных (бездефектных) кристаллах с достаточно рыхлой кристаллической решеткой (например, ОЦК и алмазоподобной).

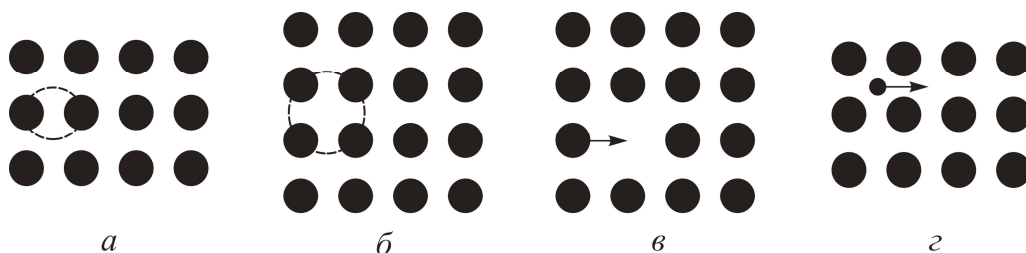


Рис. 4.47. Механизмы миграции атомов: *a* – парный обмен, *б* – кольцевой обмен, *в* – вакансионный механизм, *г* – междоузельный механизм (стрелками показаны направления элементарного скачка атомов)

Вакансионный механизм. При вакансионном механизме миграции (рис. 4.47, *в*), как описывалось выше в модели Френкеля, элементарный акт диффузии состоит в скачке атома из узла в соседнюю вакансию, при этом атом и вакансия обмениваются местами. Многократное повторение такого акта и будет представлять собой диффузию атомов в одном направлении и соответственно диффузию вакансий – в обратном. Однако даже при переходе атомов в соседнюю вакансию, находящуюся в ближайшей координационной сфере, они должны преодолеть определенный энергетический барьер. Это вызвано необходимостью частичного разрыва связей с атомами, соседними в исходном состоянии, и упругого смещения атомов, окружающих вакансию.

Как показано выше, для диффузии по вакансионному механизму нужно затратить энергию на образование вакансии и на миграцию атома по вакансии. Суммарная энергия и дает энергию активации диффузии. Значения энергии образования вакансии E_v , энергии миграции вакансии или атома E_m и энергии активации диффузии E для некоторых элементов приведены в табл. 4.5.

Таблица 4.5

Энергии образования вакансии, энергии миграции вакансии или атома и энергии активации диффузии для некоторых элементов

Энергия активации, эВ	Si	Ge	Cu	Au	α -Fe	Zn
E_v	3,5–4,0	2,0–3,0	–	–	–	–
E_m	1,0–1,5	0,5–1,0	–	–	–	–
E	4,0–5,0	2,5–3,5	2,2	1,5	2,7	1,2

Вакансионный механизм является основным для самодиффузии и гетеродиффузии примесей замещения. Энергия активации гетеродиффузии по вакансиям, как правило, меньше, а скорость диффузии больше, чем в случае самодиффузии.

Важнейшее следствие, вытекающее из приведенного выше, – высокая чувствительность скорости диффузии по вакансиям к структурным дефектам. Наличие вакансий, а также крупномасштабных дефектов структуры внутри кристалла, облегчающих образование вакансий (дислокаций, границ зерен, микропор и др.), способствует уменьшению энергии активации диффузии по вакансиям и ускорению последней. Поэтому крупномасштабные дефекты часто называют источниками вакансий.

Междоузельный механизм. Этот механизм наблюдается в том случае, когда атом при диффузии переходит из одного положения равновесия в междоузлии в другое междоузельное положение (рис. 4.47, *з*). В этом случае скорость диффузии лимитируется энергией активации E_{mi} атомов, мигрирующих по междоузлиям. Значение E_{mi} , как правило, тем больше, чем больше атомный радиус атома-диффузанта, что связано с величиной искажений решетки, которые вызываются размещением атома в междоузлиях. Последние тем больше, чем плотнее упаковка кристаллической решетки. Поэтому в металлах значения E_{mi} больше, чем в кристаллических полупроводниках с ковалентной связью. В результате в металлах вероятность самодиффузии и гетеродиффузии по междоузлиям атомов больших размеров, образующих растворы замещения, настолько мала, что практически с ней можно не считаться. Диффундируют в металлах по междоузлиям практически только примесные атомы малых размеров, образующие твердые растворы внедрения.

В полупроводниках плотность упаковки решеток обычно примерно вдвое меньше, чем у металлов, поэтому вероятность гетеродиффузии и даже самодиффузии по междоузлиям в полупроводниках достаточно велика, и на практике с ней часто встречаются, особенно при повышенных температурах.

4.4.6. Влияние структурных дефектов на параметры диффузии

Одним из проявлений высокой чувствительности диффузии к структурным дефектам является влияние концентрации вакансий и их возможных источников на скорость диффузии.

Так называемые крупномасштабные дефекты (КМД), такие как дислокации, границы зерен, дефекты упаковки, преципитаты, поры и другие, представляют собой источники вакансий в кристалле. Они, в частности, стимулируют образование точечных дефектов внутри кристалла, что исключает необходимость диффузии к внешней поверхности кристалла. Даже в том случае, когда образование и исчезновение дефектов происходят внутри кристалла (например, при образовании и аннигиляции дефектов по Френкелю), КМД часто способствуют этому процессу. Поэтому диффузия вдоль КМД обычно протекает легче, чем в объеме кристаллов, поскольку в областях кристалла, включающих такие структурные дефекты, правильная кристаллическая структура нарушена.

Чувствительность диффузии к концентрации вакансий находит полезное практическое применение, например, в геттерировании примесей и радиационно-стимулируемой диффузии. Суть радиационно-стимулируемой диффузии заключается в том, что локальный участок, в который должна быть введена легирующая примесь, предварительно подвергают ионной бомбардировке. Возникающее при этом локальное повышение плотности вакансий ускоряет последующую диффузию легирующих примесей. Продуманный подход к выбору бомбардирующих ионов позволяет получить максимально эффективный результат.

Кинетику атомной миграции вблизи таких дефектов трудно анализировать, поскольку плотность крупномасштабных дефектов слабее зависит от температуры, чем концентрация точечных дефектов, определяющих скорость миграции в объеме кристалла, следствием чего должна быть слабая температурная зависимость коэффициента диффузии примесей по таким дефектам. Это означает, что диффузия по дислокациям, дефектам упаковки и границам зерен должна быть заметна лишь при относительно низкой температуре, когда объемная диффузия относительно мала.

Диффузия по поверхности и внутренним границам раздела. Все возрастающее значение в технологии получения многослойных структур разного назначения приобретает вопрос о существенном различии скоростей диффузии по объему, внутренним границам раздела и внешним поверхно-

стям кристаллов (рис. 4.48). Эти различия приводят к тому, что при анализе и расчете диффузии в поликристаллических и неоднородных объектах (упрочняющих покрытиях, электронных твердотельных структурах и др.) всегда необходимо учитывать существование внешних и внутренних поверхностей раздела.

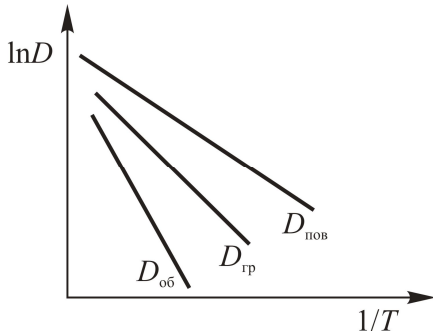


Рис. 4.48. Температурные зависимости коэффициентов объемной ($D_{об}$), граничной ($D_{гр}$) и поверхностной ($D_{пов}$) диффузии для одного и того же вещества

Диффузия по границам зерен. Если на поверхность поликристаллического образца (рис. 4.49) нанести слой диффузанта и провести высокотемпературный отжиг, то диффузия будет идти как в объеме зерен, так и вдоль границ зерен. Соотношение коэффициентов диффузии по объему и вдоль границ зерен определяется типом последних. Из данных об атомной структуре границ следует, что по степени несовершенства границы зерен существенно различаются. С этой точки зрения, обычно принято делить все границы зерен на два типа – *специальные* и *неспециальные* (или случайные, или общего типа).

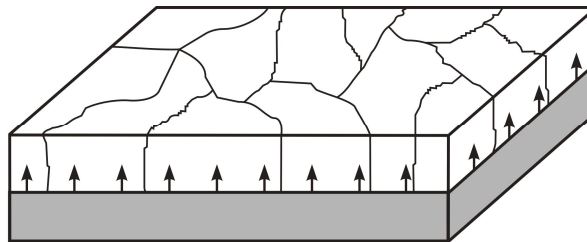


Рис. 4.49. Схема диффузии с поверхности поликристаллической пленки с колончатой зеренной структурой

Специальные границы более совершенны и поэтому диффузия вдоль них протекает с меньшей скоростью, чем вдоль случайных. Высокая скорость диффузии вдоль случайных границ вызвана несовершенством их строения, т. е. нарушениями периодичности в расположении атомов в границах и повышенным содержанием в них вакансий.

На рис. 4.50 показана схема зернограничной диффузии из источника диффузанта с концентрацией C_0 на поверхности поликристаллической пленки

ки. На этой схеме зерна (кристаллиты) разделены границами толщиной δ , показанными в виде вертикальных линий. Из приведенной на рис. 4.50 схемы следует, что одновременно с диффузией вдоль границ зерен может идти отток атомов примеси из границы в объем кристаллической решетки либо стягивание примеси из объема зерен к границе соседствующих зерен. В результате, как видно, фронт диффузии может быть негладким. Неровность последнего определяется соотношением между коэффициентами диффузии $D_{гр}$ и $D_{об}$, а оно, в свою очередь, зависит от структуры границы, температуры диффузии и других факторов. Когда коэффициент зернограницной диффузии $D_{гр}$ велик по сравнению с коэффициентом объемной диффузии $D_{об}$, так что длина диффузии в объеме зерен $l_D = \sqrt{D_{об}t}$ за время t невелика, боковой отток диффузанта из границы практически равен нулю уже на сравнительно небольшом расстоянии от поверхности. Установлено также, что ускоренная зернограницная диффузия тем эффективнее, чем меньше зерно.

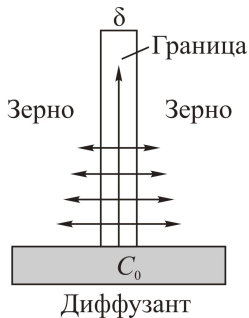


Рис. 4.50. Схема диффузии по одиночной границе зерен с поверхности поликристалла

Насколько существенно влияет на отношение $D_{гр}/D_{об}$ температура диффузии видно из следующего примера. В случае самодиффузии серебра при 480°C отношение $D_{гр}/D_{об} = 10^6$, а при 950°C величина $D_{гр}/D_{об}$ резко уменьшается и составляет только 10^3 . Заметим, что очень часто приводимые в литературе экспериментальные данные о коэффициентах диффузии в поликристаллических телах представляют собой, как правило, усредненные (интегральные) значения для зернограницного и объемного коэффициентов диффузии.

Аналогично границам зерен влияют на скорость диффузии и дислокационные скопления. Часто возникающая неровность фронта p - n -перехода объясняется ускоренной диффузией легирующих примесей вдоль дислокационных скоплений и накоплением последних до высоких концентраций, что резко уменьшает локальное электрическое сопротивление и создает предпосылки для пробоя.

Поверхностная диффузия. Поверхностная диффузия протекает вдоль поверхности твердого тела, граничащего с вакуумом либо с внешней газовой или жидкой средой. Диффузия этого вида приобретает все большее зна-

чение вследствие расширения методов получения твердотельных структур и поликристаллических пленок (получение слоев методами эпитаксии из газовой фазы, химического осаждения из паровой фазы, ионно-лучевого легирования полупроводников и др.).

Поскольку атомы, расположенные на внешних поверхностях кристалла, окружены соседними атомами не со всех сторон, существенно меняется поведение атомов в приповерхностных слоях. В частности, изменяется спектр их тепловых колебаний, величина межплоскостных расстояний и др. У полупроводниковых кристаллов на поверхности изменяется энергетическая структура носителей заряда, что изменяет положение уровня Ферми и другие параметры кристаллов.

Особенно резко эти отличия проявляются в свойствах материалов, полученных в виде свободных от чужеродных адсорбированных атомов тонких и сверхтонких пленок, ультрадисперсных частиц размерами в несколько десятков нанометров и др. В приповерхностных слоях таких материалов часто образуются фазовые состояния, отличающиеся от таковых в объеме. К примеру, ослабление химической связи в приповерхностных слоях приводит к существенному снижению температуры плавления и коэффициента теплопроводности сверхтонких пленок и т. д. Вследствие всех этих причин энергия активации поверхностной диффузии значительно ниже зернограничной, межфазной (латеральной) и тем более объемной (см. рис. 4.48).

Одной из особенностей реальных поверхностей кристаллов является то, что на них практически всегда имеются различные шероховатости, а также адсорбированные атомы. В случае наличия шероховатостей последние играют роль центров захвата (стока) диффундирующих примесей, замедляя их диффузию.

Диффузия адсорбированных атомов по поверхности кристалла зависит от многих факторов. Обычно считается, что энергия активации элементарного акта поверхностной диффузии $E_{\text{пов}}$ адсорбированных атомов равна сумме энергий захвата адсорбированного атома E_a поверхностью и его элементарного смещения (скачка) вдоль поверхности $E_{\text{см}}$.

Литература

1. Горелик С. С., Дашевский М. Я. Материаловедение полупроводников и диэлектриков. М.: МИСИС, 2003.
2. Старк Дж. П. Диффузия в твердых телах. М.: Энергия, 1980.
3. Федотов А. К. Физическое материаловедение (физика твердого тела). Минск: Вышэйшая школа, 2012.

Глава 5

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

5.1. Термодинамика фазовых превращений в материалах

Все технологии получения кристаллических материалов и придания им заданных функциональных свойств базируются, в первую очередь, на изменении таких термодинамических параметров, как температура, давление и объем. Изменение последних может вызывать изменение фазового состояния веществ (материалов), например, при изменении температуры или давления возможно превращение жидкого вещества в твердое или газообразное либо переход кристаллической структуры твердого материала от одного типа к другому (аллотропия или полиморфизм).

Одним из важнейших способов осуществления фазовых превращений в кристаллических материалах, широко используемых в современном материаловедении, может быть термическое воздействие. Термическое воздействие обеспечивается подводом к веществу или отводом от него тепловой энергии, что сопровождается повышением или понижением температуры.

Наиболее важным источником информации относительно поведения чистых веществ (элементов), соединений, твердых растворов, механических смесей и иных композиций при изменении температуры являются диаграммы фазовых равновесий. Обычно они обеспечивают информацию о фазовом составе и стабильности фаз в веществах в зависимости от температуры T , давления p и концентрации компонентов (состава) c . Эта информация дает возможность изучать и контролировать многие технологические процессы, в том числе плавление, кристаллизацию, конденсацию, сублимацию и др. Такие диаграммы описывают поведение веществ в равновесном состоянии, а также позволяют судить о поведении веществ в состоянии, далеком от равновесия, что чрезвычайно важно при разработке технологий получения тех или иных материалов и их дальнейших обработок для придания нужных свойств.

В данном разделе будут изложены основные термодинамические определения и соотношения, которые могут быть полезны при дальнейшем изучении и анализе фазовых превращений в случае термических воздействий на кристаллические материалы.

Термодинамическое равновесие. Применительно к кристаллическим материалам вопрос о равновесии можно рассматривать как одну из задач термодинамики, которая изучает условия протекания процессов, сопровождающихся изменением энергии при теплообмене и совершении разного вида работ. Наиболее полные данные о материале как термодинамической системе можно получить при рассмотрении обратимых изменений его состояния, т. е. когда в каждый момент времени состояние материала практически неотличимо от равновесного. В обратимом процессе можно вернуть систему (материал) в первоначальное состояние без каких-либо изменений в окружающей среде. Материал как термодинамическая система – это совокупность его структурных составляющих (фаз, зерен, дефектов и т. д.), находящихся во взаимодействии между собой и отделенных от окружающей среды.

Гомогенными называются материалы, внутри которых нет межфазных поверхностей раздела (моно- и поликристаллы чистых элементов, твердых растворов или химических соединений), так что свойства системы изменяются непрерывно. *Гетерогенные* материалы содержат поверхности раздела между фазами, в которых происходят резкие скачкообразные изменения свойств (например, вода – лед).

Состояния материалов как термодинамических систем делятся на следующие:

– стационарные – состояние системы не изменяется во времени ($T = \text{const}$, $p = \text{const}$) и может характеризоваться бесконечным числом значений температур или давлений, но в каждой точке они должны оставаться постоянными;

– равновесные – состояние системы не изменяется со временем, причем эта неизменность не обусловлена протеканием какого-либо внешнего по отношению к системе процесса (равновесное – частный случай стационарного), температура и давление не только постоянны, но и остаются одинаковыми во всех точках системы;

– неравновесные – состояние системы изменяется во времени и постоянство параметров в каждой точке системы поддерживается внешними по отношению к ней процессами. Следовательно, если изменяются внешние факторы, то изменяется и состояние системы.

Рассмотрим однородный металлический стержень, состоящий из одного сорта атомов, который подвергнут нагреву на одном конце и охлаждению на другом. В определенный момент времени идущие навстречу друг другу процессы нагрева и охлаждения приведут к установлению стационарного, но не-

равновесного состояния, так как постоянство параметров системы в каждой точке поддерживается внешним по отношению к системе процессом. Система окажется в состоянии равновесия только тогда, когда температура и давление внешней среды и каждой точки системы будут одинаковыми.

Для стержня из сплава, кроме температуры и давления, необходимо также учитывать концентрации растворенных веществ.

В приведенном примере со стержнем равновесное состояние устанавливается в результате того, что скорости двух противоположно направленных процессов уравниваются; равновесие нарушается при изменении условий протекания процесса. Это равновесие называется динамическим. К такому равновесию относится, например, химическое равновесие.

Как известно, в термодинамике не рассматриваются механизмы протекания процессов перехода системы из одного состояния в другое, а изучается лишь ее начальное и конечное состояния. В то же время переход в конечное состояние может идти разными путями (по разным механизмам), что оказывается очень важным, так как можно искусственно «заморозить» промежуточное состояние системы еще задолго до достижения ею конечного равновесного состояния. Система в промежуточном состоянии может существовать долго, если скорость протекания процесса мала. Такое промежуточное состояние из-за длительного существования часто может восприниматься как конечное равновесное, однако это будет ложным равновесием в отличие от истинного равновесия. Системы в истинном равновесии называются стабильными, а в ложном – метастабильными.

Эффект длительного нахождения системы в метастабильном состоянии широко используется в технологии получения твердых материалов с нужными свойствами. Так, в кристаллы при высокой температуре можно ввести примеси, например, путем диффузии и получить некоторый профиль их распределения. Если затем кристалл резко охладить, то сформулированное неравномерное распределение атомов «замораживается» и имеем типичный пример метастабильного состояния.

Если же, наоборот, необходимо быстрее привести систему к истинному равновесию (в данном примере – выровнять примесный профиль, установив равномерное распределение примесей по кристаллу), следует сообщить системе дополнительную энергию – например, нагреть кристалл до более высокой температуры, чтобы ускорить процесс диффузии.

Другим таким примером может быть получение неравновесного состояния материала в результате закалки.

Диаграмма энтальпия – температура для материалов. Используя соответствующую калориметрическую систему и энергетический (тепловой) резервуар, можно легко измерить теплоту, необходимую для расплавления или испарения чистого вещества (материала), например льда. Результат такого эксперимента схематически представлен на рис. 5.1 в координатах

температура T – подводимое тепло \bar{Q} . Напомним, что физический смысл энтальпии при изобарных процессах ($p = \text{const}$) состоит в том, что изменение энтальпии равно поглощенному количеству теплоты ($dI = TdS + Vdp$, п. 1.7, Т. 1).

Как видно из рисунка, при подводе тепловой энергии к твердому телу его температура растет вдоль линии a , пока не будет достигнута температура плавления $T_{\text{пл}}$ льда. Количество теплоты $\Delta I_{\text{пл}}$, поглощенное льдом в процессе плавления, равно длине горизонтальной прямой b . Нагрев от температуры плавления до температуры кипения соответствует прямой линии v . Количество теплоты $\Delta I_{\text{исп}}$, поглощенное испаряющейся при температуре кипения $T_{\text{кип}}$ воды, отвечает длине линии z , а нагрев пара выше температуры кипения $T_{\text{кип}}$ (испарения $T_{\text{исп}}$) – линии d .

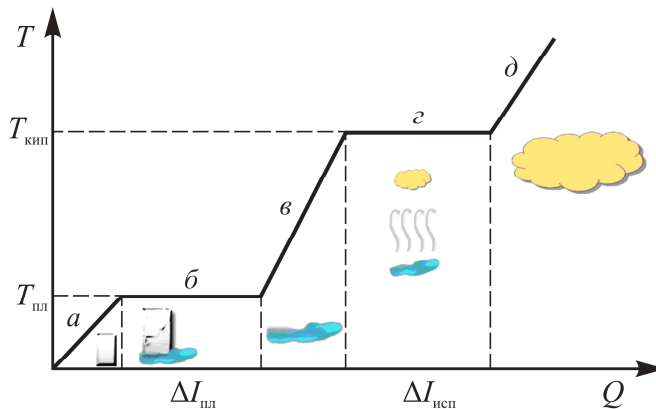


Рис. 5.1. Диаграмма энтальпия – температура для льда

Вычисляя из графика на рис. 5.1 значения обратных наклонов dI/dT линий a , v и d , можно определить теплоты, требуемые для нагрева 1 моля льда, воды или пара на 1 К. Эти величины представляют собой молярные теплоемкости при постоянном давлении C_p для льда, воды и пара соответственно.

С точки зрения термодинамики, рис. 5.1 наглядно демонстрирует те энергетические изменения, которые происходят в исследуемой системе (лед) при ее нагреве. Фактические значения энтальпии плавления в точке плавления и энтальпии испарения в точке кипения для льда равны 5,98 и 40,5 кДж/моль соответственно. Заметим, что значения скрытых теплот (удельных энтальпий) плавления или испарения являются уникальными характеристиками любых чистых веществ.

Гетерогенные равновесия. Правило фаз Гиббса. Материал, состоящий из нескольких фаз, находится в равновесии, если значения p и T во всех фазах одинаковы. Однако при этих условиях возможен переход вещества из одной фазы в другую (за счет диффузии или химических реакций). Признаком того, что система также находится в равновесии, считается равенство

удельных термодинамических или химических потенциалов данного компонента в рассматриваемых фазах.

Одним из важнейших законов гетерогенного равновесия в материалах является правило фаз Гиббса. Оно оперирует такими определенными ранее основными понятиями, как компонент и фаза. Кроме них каждая термодинамическая система характеризуется также числом степеней свободы. Под числом степеней свободы (или вариантностью системы) f понимают количество внешних и внутренних факторов, или координат (температура T , давление p , концентрация c и др.), которые можно произвольно изменять в определенном интервале значений без изменения числа фаз в системе. Другими словами, степени свободы f представляют собой параметры системы, играющие роль независимых переменных. Все остальные параметры будут их функциями. Именно эти факторы и определяют состояние равновесия между отдельными фазами в материале.

В термодинамике материалов правило фаз Гиббса (см. п. 1.11, Т. 1) связывает число компонентов n , число фаз r и число степеней свободы (число независимых переменных) f в изолированном материале соотношением

$$f = n - r + 2, \quad (5.1.1)$$

где число 2 обозначает две основные переменные – давление p и температуру T . Правило фаз является следствием того, что условием равновесия считается равенство химических или термодинамических потенциалов фаз. Поскольку значения потенциалов не зависят от количества (занимаемого объема) фаз, то и равновесие в системе не зависит от количества той или иной фазы.

Установлено, что в определенных пределах можно изменять значения независимых факторов, не нарушая числа и наименования сосуществующих фаз. Если число степеней свободы $f = 0$ (нонвариантная система), то любое изменение значений внешних и внутренних факторов вызовет изменение числа фаз. В случае моновариантной системы ($f = 1$) можно изменять величину одного из факторов (переменных) в некоторых пределах, не вызывая изменения числа фаз, и т. д.

Таким образом, правило фаз Гиббса является математической формой выражения общих закономерностей существования устойчивых фаз, отвечающих условиям равновесия. Правило фаз дает возможность предсказать и проверить процессы, происходящие в материалах при нагреве и охлаждении. Оно показывает, например, происходит ли процесс кристаллизации при постоянной температуре или в интервале температур, и указывает, какое число фаз может одновременно существовать в материале. Поэтому экспериментально построенные диаграммы состояния всегда необходимо проверять на их соответствие правилу фаз.

Рассмотрим действие правила фаз на примере термического разложения кристаллического карбоната кальция (мела) CaCO_3 . При нагреве CaCO_3 сосуществуют три фазы – две твердые и одна газообразная:



В этой реакции присутствуют три различные химические конститuentы, но число компонентов лишь два, потому что концентрации любых двух конститuent полностью определяют систему в равновесии. Концентрация любого третьего компонента может быть определена, если известны концентрации двух других. Подставляя соответствующие значения $n = 2$ и $r = 3$ в правило фаз, можно видеть, что данная система моновариантная, так как $f = n - r + 2 = 2 - 3 + 2 = 1$. Следовательно, только одна из переменных (температура либо давление) может быть изменена независимо. (Число компонентов не всегда легко определить с первого раза, так что требуется точная проверка физических условий, при которых система находится в равновесии.)

Правило фаз может быть применено лишь к динамически обратимым процессам, когда системы гетерогенные и находятся в равновесии, так что единственными независимыми переменными являются температура, давление и концентрация компонентов.

Для однокомпонентных систем максимальное количество рассматриваемых переменных равно двум – давление и температура. Такая система легко может быть представлена в обычных декартовых координатах.

Для двухкомпонентных (бинарных) систем максимальное число переменных равно трем – температура T , давление p и концентрация c . В этом случае для описания состояния системы требуется лишь знание концентрации одного компонента c , поскольку концентрация второго равна $1 - c$. Графическое представление диаграммы равновесия такой системы требует трехмерного представления. Это, однако, трудноприменимо и поэтому наиболее часто используют двойные сечения такой диаграммы в координатах давление – температура, давление – состав или состав – температура.

Поскольку в материаловедении чаще всего рассматриваются твердые и жидкие фазы при $p = \text{const}$ (0,1 МПа), где можно пренебречь давлением насыщенных паров, в этом случае в равенстве (5.1.1) можно принять число внешних факторов (переменных) равным единице. Поэтому такие системы можно описывать только с помощью двух переменных (температуры и состава), что приводит к иной формулировке правила фаз:

$$f = n - r + 1.$$

Тогда диаграмма состояния дается в двойных координатах температура – концентрация, а невариантному равновесию на ней соответствует

точка (все координаты – заданные постоянные величины), моновариантному отвечает линия (одна координата может быть выбрана произвольно), бивариантному – участок поверхности, так что две координаты могут быть выбраны произвольно.

Фазовые диаграммы однокомпонентных материалов. При построении диаграмм состояния на осях координат откладывают значения независимых параметров (T , p , c и др.), характеризующие условия существования материала. Для выражения его состава используют одну или две координаты. Области существования отдельных фаз на таких диаграммах ограничиваются линиями или поверхностями фазовых равновесий.

Диаграмма, где схематически показано фазовое равновесие между твердой, жидкой и газовой фазами для такой однокомпонентной системы как вода приведена на рис. 5.2. Изображенные кривые представляют собой набор точек (с координатами T , p), при которых две фазы (попарно) находятся в равновесии. Кроме того, как видно, в точке $T_{тр}$ одновременно сосуществуют все три фазы – пар, жидкость и твердое тело.

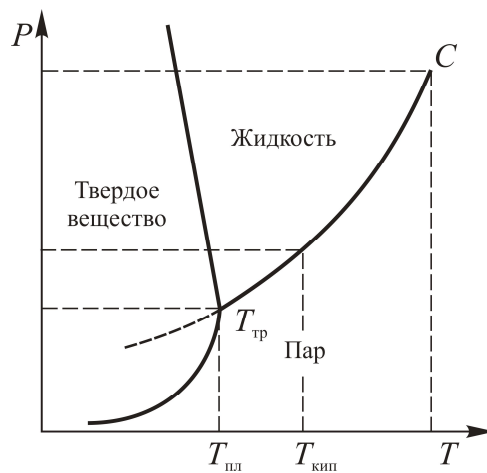


Рис. 5.2. Диаграмма фазовых равновесий для воды

Данная диаграмма изображает лишь условные границы фазовых областей, не указывая точные значения параметров, характеризующих существующие фазы. Тем не менее, представляет интерес проанализировать характер реальных линий раздела сосуществующих фаз. Легко видеть при анализе реальных линий равновесия жидкой и твердой фаз, что если лед, например, при $T = 2\text{ }^{\circ}\text{C}$ подвергается высокому давлению, то он превращается в воду. Именно поэтому конькобежец, катящийся на коньках, скользит не по льду, а по воде. Такая специфическая чувствительность к давлению, выражаемая отрицательным наклоном линии раздела жидкость – твердое тело, является важной характеристикой любых материалов, атомная структура жидкой

фазы которых характеризуется большими координационными числами, чем структура твердой фазы. К таким материалам относится вода, висмут, германий и кремний. У металлов наклон этой фазовой линии имеет противоположный знак ($dp/dT > 0$), так что металл при повышении давления, наоборот, будет превращаться из жидкого в твердый.

5.2. Плавление однокомпонентных кристаллических твердых тел

Под плавлением обычно понимается переход материала из твердого упорядоченного (кристаллического) состояния в менее упорядоченное (жидкое) состояние при подводе к нему тепла.

Плавление однокомпонентных кристаллических твердых тел при их нагревании относится к фазовым переходам 1-го рода, для которого характерно изменение скачком таких термодинамических параметров вещества как плотность, теплоемкость, вязкость и т. п. Поэтому главными характеристиками процесса плавления однокомпонентных кристаллических веществ, как фазового перехода 1-го рода являются температура плавления $T_{пл}$ и теплота, которая необходима для осуществления процесса плавления (скрытая теплота $Q_{пл}$).

Поскольку жидкое и твердое состояния представляют собой две разные фазы вещества, процесс плавления и называют фазовым переходом. При этом жидкая фаза (расплав) не возникает сразу во всем объеме кристалла: сначала внутри твердого вещества образуются зародыши новой фазы, которые затем растут, распространяясь на весь объем. При этом обе фазы (жидкая и твердая) могут сосуществовать длительное время, как, например, лед может плавать в воде, не плаваясь. Указанные особенности плавления (поглощение энергии и возможность сосуществования твердой и жидкой фаз) и являются отличительными признаками фазового перехода 1-го рода.

Зависимость температуры плавления от давления. Как показывают эксперименты, температура плавления зависит от внешнего давления p . На диаграмме состояния однокомпонентного вещества эта зависимость изображается кривой плавления (кривой сосуществования твердой и жидкой фаз, AD или AD' на рис. 5.3).

Характер зависимости $T_{пл}(p)$ определяется направлением изменения объема вещества ($\Delta V_{пл}$) при плавлении (уравнение Клапейрона – Клаузиуса). В большинстве случаев плавление кристаллов сопровождается увеличением их объема (обычно на несколько процентов) (рис. 5.4). Если это имеет место, то возрастание давления приводит к повышению $T_{пл}$ вдоль линии AD (рис. 5.3).

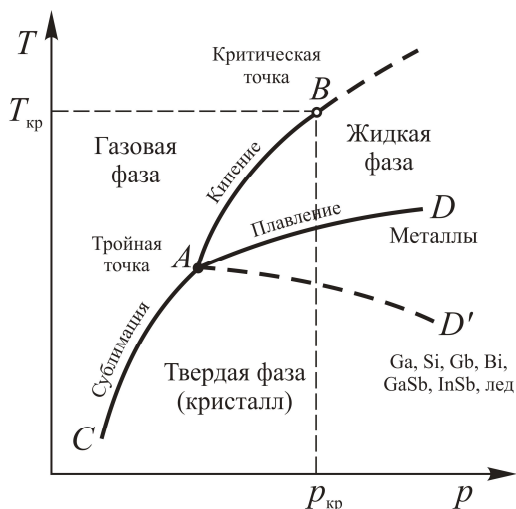


Рис. 5.3. Диаграмма состояния однокомпонентного (чистого) вещества. Линии AD и AD' – кривые плавления: по линии AD' плавятся вещества с аномальным изменением объёма при плавлении

Однако у некоторых веществ, таких как вода и ряд металлов (например, Bi , Ga , Sb) при плавлении происходит уменьшение объёма. Поэтому температура плавления этих веществ при увеличении давления снижается вдоль кривой AD' (см. рис. 5.3).

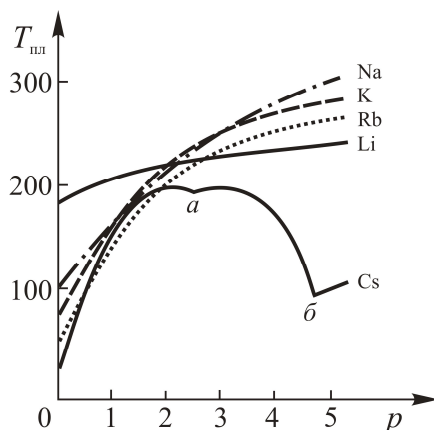


Рис. 5.4. Изменение температуры плавления $T_{пл}$ (°C) щелочных металлов с увеличением давления p (ГПа). Кривая плавления цезия указывает на существование у него при высоких давлениях двух полиморфных превращений (a и b)

Взаимосвязь температуры плавления с физическими свойствами кристаллов. Плавление сопровождается изменением целого ряда физических свойств кристаллических веществ. Например, при плавлении происходит увеличение энтропии, что отражает разупорядочение кристаллической

структуры вещества. Возрастание при плавлении энтропии ΔS составляет 3–60 Дж/(моль·К), хотя для большинства простых веществ ΔS не превышает 6–11 Дж/(моль·К). Связь между изменениями энтропии и объема веществ при плавлении и $T_{\text{пл}}$ описывается уравнением Клапейрона – Клаузиуса ((1.12.4), Т. 1).

Плавление сопровождается ростом теплоёмкости, атомного объема, а также электрического сопротивления. Исключение составляют вещества с аномальной кривой плавления AD' на рис. 5.3. К ним относятся некоторые полуметаллы (например Bi, Sb) и полупроводники (Ge), которые в жидком состоянии обладают более высокой электропроводностью. Практически до нуля падает при плавлении сопротивление механическому сдвигу, поскольку в расплаве не могут распространяться поперечные упругие волны, уменьшается скорость распространения звука (продольных упругих волн) и т. д.

Процесс плавления зависит от поверхностной энергии кристаллов, что определяет зависимость $T_{\text{пл}}$ от их размеров. Крупнозернистые чистые (однокомпонентные) поликристаллические вещества чаще всего плавятся при более высокой температуре, чем мелкокристаллические.

Процесс плавления тесно связан с тепловыми свойствами кристалла. Это позволяет описать температуру плавления веществ с однотипной кристаллической структурой известной эмпирической формулой Линдемманна

$$T_{\text{пл}} = AMT_D^2 V^{2/3},$$

где A – некоторая константа для группы веществ с однотипной кристаллической структурой, M и V – молекулярная масса и объем вещества, T_D – температура Дебая вещества.

Термодинамика процесса плавления. Зададимся вопросом, почему вещество вообще должно плавиться. Для этого поясним вначале, почему при некоторой температуре ($T_{\text{пл}}$) в кристаллическом твердом теле происходит разрыв части межатомных связей и кристалл переходит из упорядоченного состояния, характеризующегося кристаллической решеткой, в неупорядоченное.

Как следует из термодинамики фазовых превращений, при фиксированной температуре любое тело стремится минимизировать свободную энергию. При низких температурах ($T \rightarrow 0$) энтропийный фактор TS изменяется незначительно, и в результате всё сводится к минимизации внутренней энергии E . Состояние вещества с минимальной энергией и соответствует кристаллическому твёрдому телу. При повышении температуры вклад TS в свободную энергию становится всё важнее (из-за роста и T и S), и при определенной температуре оказывается выгоднее разорвать некоторые межатомные связи, переводя кристалл в неупорядоченное состояние, чем поддерживать

кристаллическую (упорядоченную) структуру. При этом внутренняя энергия E слегка повысится, но сильно возрастет и энтропия, что в результате и приведёт к понижению свободной энергии.

Согласно молекулярно-кинетическим представлениям, динамика процесса плавления состоит в следующем. При подведении теплоты к кристаллическому телу увеличивается энергия (амплитуда) колебаний образующих его атомов (ионов, молекул), что соответствует повышению температуры тела и приводит к разупорядочению кристалла. Разупорядочение сопровождается как искажением длин и направлений межатомных связей в кристалле, так и образованием в нем различного рода дефектов (см. гл. 4). В молекулярных кристаллах, к примеру, может происходить частичное разупорядочение взаимной ориентации осей молекул, если последние не обладают сферической симметрией.

Стадию возникновения и накопления дефектов часто называют стадией предплавления. На реальной диаграмме нагрева (рис. 5.5) наличие этой стадии плавления приводит к плавному изгибу кривой нагрева перед ее выходом на плато, соответствующего $T_{пл}$. Согласно рисунку, при $t < t_1$ происходит нагрев кристаллического вещества (металла). Интервал времен $t_1 < t < t_2$ соответствует стадии предплавления, на которой возникает квазижидкий слой на поверхности или на межкристаллитных границах (границах зерен) твердого тела. Область температур $t > t_3$ соответствует началу нагрева расплавленного вещества.

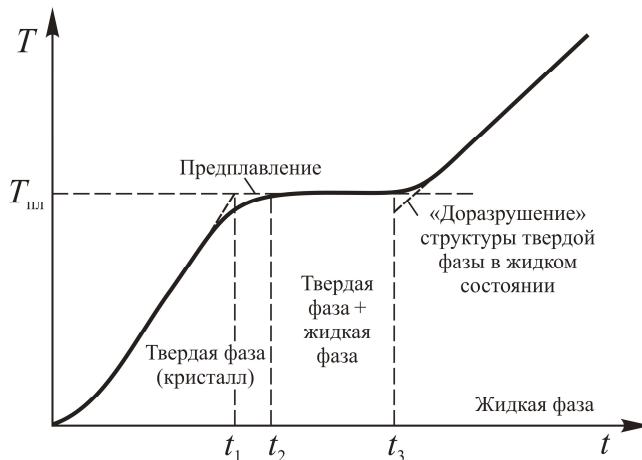


Рис. 5.5. Реальная диаграмма нагрева при плавлении кристаллического твердого тела

Считается, что при приближении к $T_{пл}$ концентрация дефектов в кристалле достигает некоторого критического значения, при котором и начинается собственно плавление. Подводимая при плавлении теплота, соответствующая плато на рис. 5.5, идёт уже не на нагрев тела, а на разрыв межатом-

ных связей и разрушение дальнего порядка в кристалле (см. гл. 4). Именно поэтому чистые монокристаллические и крупнокристаллические вещества не изменяют температуру в процессе плавления. В результате в процессе плавления кристалл, обладавший упорядоченной кристаллической решёткой, распадается на жидкие области субмикроскопических размеров. По мере нагревания эти области жидкой фазы постепенно укрупняются и сливаются в одно целое, формируя жидкую фазу, а кристаллическая фаза, наоборот, разбивается на фрагменты и уменьшается в размерах до полного их исчезновения.

Заметим, что при относительно небольших перегревах расплава координационное число для атомов в нем в большинстве случаев остаётся таким же, как и для кристаллических фрагментов. Следовательно, ближний порядок в расположении атомов в таких субмикроскопических жидких областях при плавлении существенно не меняется. Этим, в частности, объясняются меньшие значения теплот плавления $Q_{пл}$ по сравнению с теплотами парообразования, а также относительно небольшое изменение ряда физических свойств веществ при плавлении последних. Удельная энтальпия плавления большинства веществ значительно уступает энтальпии парообразования.

5.3. Кристаллизация однокомпонентных твердых тел

Под кристаллизацией материала обычно понимается его переход в упорядоченное кристаллическое состояние из неупорядоченного газообразного, парообразного, жидкого, твердого аморфного или наноструктурированного состояния, а также в процессе электролиза либо при химических реакциях. В случае образования кристаллического вещества при охлаждении расплава (этот вид кристаллизации весьма распространен в материаловедении) такой процесс можно считать обратным по отношению к описанному в предыдущем параграфе процессу плавления кристалла при его нагреве.

Кристаллизация из расплава как фазовый переход. Рассмотрим чистый металл в точке затвердевания (кристаллизации), когда и жидкая и твердая фазы находятся при одинаковой температуре. В этом случае кинетические энергии атомов в обеих фазах должны быть одинаковыми, тогда как существует значительное различие в их потенциальной энергии.

Кинетическая энергия определяется скоростью движения атомов, которая полностью определяется температурой системы жидкость – твердое тело: чем выше температура, тем больше кинетическая энергия атомов. Потенциальная энергия зависит от межатомных расстояний в обеих фазах, поэтому бóльшим средним межатомным расстояниям в жидкой фазе (расплаве) соответствуют бóльшие, чем в твердом состоянии, потенциальные энергии атомов.

Поскольку при переходе материала из жидкого в твердое состояние межатомные расстояния уменьшаются, процесс затвердевания (кристаллизации) сопровождается высвобождением энергии. Выделяемую при затвердевании (кристаллизации) теплоту часто называют скрытой теплотой $Q_{кр}$ или удельной энтальпией $\Delta I_{кр}$ кристаллизации.

У чистых (однокомпонентных) однородных веществ равновесные температуры и теплоты кристаллизации и плавления должны совпадать. Как отмечалось в предыдущем параграфе, выделение и поглощение скрытых теплот перехода – неперемный признак так называемых фазовых переходов 1-го рода. Поэтому при охлаждении жидкий расплав превращается в кристалл (происходит формирование кристаллической решетки), поскольку атомы, ионы или молекулы стремятся расположиться так, чтобы их потенциальная энергия взаимодействия была минимальна. Выделяющаяся при этом избыточная энергия переходит в кинетическую энергию теплового движения атомов (ионов) кристалла. Этот процесс упорядочения атомной системы должен бы вызвать повышение температуры, но поскольку одновременно происходит отвод тепловой энергии в окружающую среду, то он компенсируется выделяющейся при кристаллизации энергией и температура во время кристаллизации остается постоянной.

Отметим, что, как и при плавлении, в процессе кристаллизации многие свойства кристалла – плотность, теплоемкость, вязкость и некоторые другие – изменяются скачком. Изменение энтропии при кристаллизации в большинстве случаев составляет для простых веществ 5–12 Дж/(моль·К), для неорганических соединений 20–30 Дж/(моль·К), а для органических соединений 40–60 Дж/(моль·К).

В реальных условиях плавление обычно происходит при температуре выше равновесной, т. е. при перегреве, тогда как кристаллизация, наоборот, – при переохлаждении.

Условия кристаллизации из расплава. Рассмотрим условия, при которых вообще может осуществляться кристаллизация. Если кристалл не плавится, не растворяется, не испаряется и не растет, то находится в термодинамическом равновесии с расплавом или другой средой (раствором, паром, электролитом и т. д.) в которой он формируется. Равновесие кристалла с расплавом того же вещества возможно лишь при температуре плавления $T_{пл}$, а равновесие, к примеру, с раствором или паром, – если последние насыщены. Это означает, что необходимым условием для роста кристалла является перевод среды роста в неравновесное состояние путем ее переохлаждения либо пересыщения растворенным веществом. При этом скорость роста кристалла будет тем выше, чем больше это отклонение от термодинамического равновесия.

Таким образом, кристаллизацию из расплава следует рассматривать как фазовый переход вещества из состояния переохлажденного расплава в кри-

сталлическое (твердое) состояние, которое обладает меньшей свободной энергией. Процесс кристаллизации заканчивается исчерпанием количества расплава или достижением равновесных значений температуры и давления.

Рассмотрим изображенную на рис. 5.6 p – T -диаграмму процесса кристаллизации из расплава. Эта диаграмма дает связь между давлением p и температурой T при постоянном объеме для случая существования неупорядоченной (жидкой) и упорядоченной (твердой) фаз. Линия MN является линией фазового равновесия, разграничивающей области существования расплава и кристалла. Для всех точек, лежащих на этой линии, обе фазы сосуществуют в равновесии.

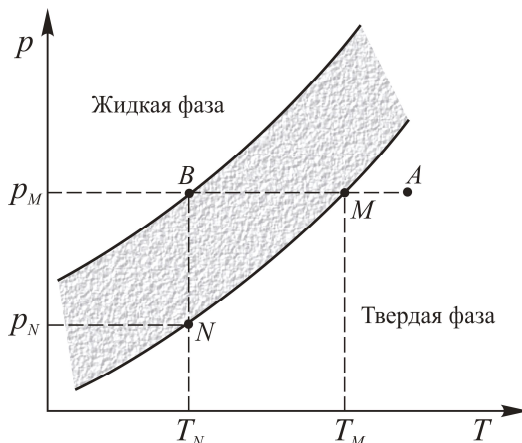


Рис. 5.6. К объяснению образования зародышей твердой фазы при охлаждении расплава

Пусть температура расплава при постоянном давлении падает таким образом, что расплав переходит из точки A в точку M , где обе фазы находятся в равновесии. Формально, если бы в расплаве существовал готовый кристалл, он стал бы расти при переходе системы расплав – кристалл в точку M . Однако если в расплав не введен готовый кристалл, который обычно называют затравкой, спонтанное (самопроизвольное) возникновение кристалла в точке M не произойдет (о причинах будет сказано ниже). Как показывают эксперименты, зарождение и рост кристалла в этом случае может начаться только при достаточном переохлаждении расплава, т. е. при переходе системы расплав – кристалл в точку B , которая соответствует температуре T_B и давлению p_M . Степень переохлаждения в точке B измеряется разностью температур $T_M - T_N = \Delta T$.

Для понимания механизмов процесса кристаллизации чистого однокомпонентного вещества необходимо прежде всего рассмотреть строение его расплава, в котором при определенных условиях могут сформироваться кристаллы.

Рассмотрим механизм гомогенной кристаллизации на примере металлического вещества. Согласно современным представлениям, металл в жидком состоянии по своему строению и свойствам значительно ближе к твердому телу, чем к газам. Теплоемкость жидкого металла, в частности, лишь на 10% выше теплоемкости твердого металла, тогда как различие по величине этого же свойства между жидким и находящимся в газообразном состоянии металлом – более 25%.

Структурные исследования показали, что при охлаждении жидкого металла до температур, близких к температуре кристаллизации, в нем образуются небольшие группировки (агрегаты) из атомов, расположенных практически с той же координацией, что и в кристалле данного металла (рис. 5.7, *а*). Число атомов в таких агрегатах очень мало, а их состояние является динамически неустойчивым. Это означает, что в одних местах такие агрегаты непрерывно возникают, затем исчезают, далее возникают вновь в этих же или в других частях расплава и снова исчезают. Такие группы атомов характеризуются так называемым ближним порядком в отличие от кристаллов, обладающих дальним порядком вследствие решетчатого строения (см. гл. 4). Они могут стать устойчивыми только при соответствующих условиях, определяемых законами термодинамики. Рассмотрим эти условия.

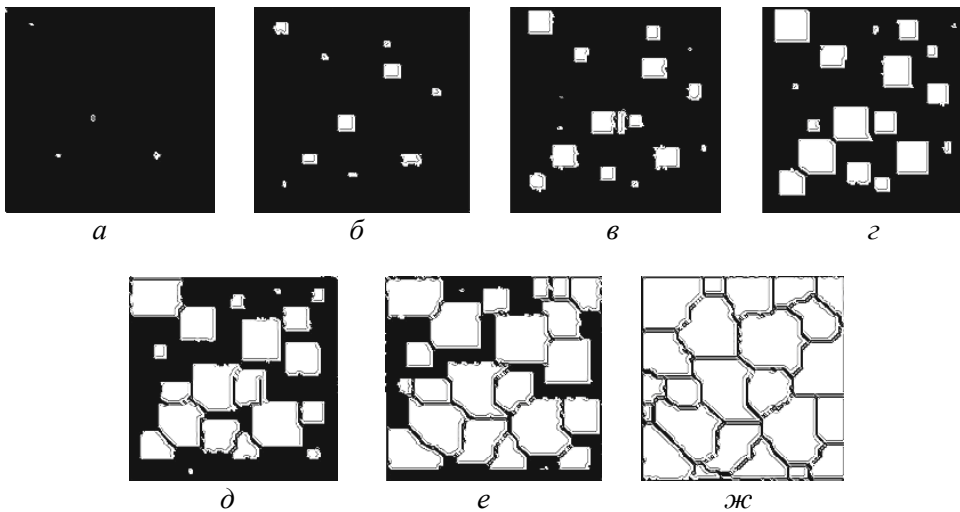


Рис. 5.7. Схема-модель процесса кристаллизации металла (светлые участки соответствуют кристаллической фазе, темные – расплаву)

Если расплав переохладить ниже $T_{кр}$, то он не сможет сохранить, не кристаллизуясь, неустойчивое метастабильное состояние при температурах сколь угодно низких по отношению к температуре кристаллизации. К примеру, мелкие капли чистого металла диаметром порядка 100 мкм можно переохладить лишь до температур порядка $0,8T_{пл}$. Эксперименты показывают,

что при достижении некоторого предельного (критического) для данных условий переохлаждения в расплаве почти мгновенно из упомянутых выше группировок атомов с ближним порядком возникает множество мелких кристалликов, называемых зародышами или центрами кристаллизации (рис. 5.7, б). Центры кристаллизации образуются независимо друг от друга в случайных местах расплава. С увеличением степени переохлаждения число зародышей, образующихся в единицу времени, возрастает (рис. 5.7, в, г). Вокруг образовавшихся центров кристаллизации начинают расти кристаллиты (рис. 5.7, д). Сначала кристаллиты имеют правильную форму, но по мере касания друг друга и последующего срастания их форма нарушается (рис. 5.7, е).

Увеличение общей массы затвердевшего металла происходит как за счет возникновения новых центров кристаллизации, так и в результате роста существующих кристаллитов. Однако рост продолжается только в направлениях, где есть свободный доступ к расплаву. Описанная схема последовательных этапов процесса затвердевания завершается формированием закристаллизовавшегося полностью металла, так что после окончания кристаллизации имеем поликристаллическое тело (рис. 5.7, ж), состоящее из кристаллитов (зерен). Как видно, процесс кристаллизации (рост доли затвердевшего расплава) вначале ускоряется, пока касание кристаллитов (из-за уменьшения доли расплава в тигле) не начинает препятствовать их росту. После кристаллизации примерно 50% объема металла скорость кристаллизации будет снижаться.

Описанная схема кристаллизации из расплава получила название спонтанной или *гомогенной кристаллизации*. Как следует из этой схемы, процесс гомогенной кристаллизации фактически состоит из двух элементарных процессов – зарождения центров кристаллизации и роста кристаллитов из этих центров. Критическое переохлаждение, при котором возникают устойчивые зародыши, зависит от температуры плавления и типа вещества, объема расплава, от наличия посторонних частиц (например, чужеродных частиц, на которых образуются зародыши, кристалликов других веществ и т. п.), от состояния поверхности стенок сосуда-кристаллизатора (тигля), от интенсивности отвода тепла от расплава, перемешивания расплава, действия излучений и ультразвука, а также многих других факторов.

Основная причина необходимости переохлаждения расплава для зарождения кристалла состоит в том, что для начала кристаллизации в метастабильной фазе (переохлажденном расплаве) необходимо затратить энергию на создание зародыша. Эта работа по созданию зародыша, называемая энергией активации зародыша кристаллической фазы, зависит от числа n частиц (атомов, молекул, ионов), из которых слагается зародыш.

Энергия активации зародыша рассчитывается как разность энергии E_1 , которую необходимо затратить на формирование поверхности раздела двух

фаз – метастабильной (жидкой) и стабильной (кристаллической), – и уменьшения свободной энергии E_2 системы жидкость – кристалл, обусловленного тем, что кристаллическому состоянию соответствует более низкая внутренняя энергия. Энергия E_1 растет пропорционально поверхности зародыша, а следовательно, пропорционально квадрату числа частиц в зародыше ($E_1 \sim n^2$), а E_2 уменьшается пропорционально росту объема зародыша, т. е. кубу числа частиц в нем ($E_2 \sim n^3$). В результате, при некотором значении n обе энергии сравниваются ($E_1 = E_2$), что означает достижение критической величины зародыша. После этого кристаллизация идет спонтанно, так как сопровождается только уменьшением свободной энергии системы вследствие выделения скрытой теплоты кристаллизации.

В отличие от описанного выше процесса гомогенного зарождения, т. е. самопроизвольного образования зародыша кристаллизации внутри расплава, при *гетерогенном* зарождении рост кристалла начинается на частицах другой фазы – пылинках, частицах окислов и т. п., на стенках сосуда; на специально введенных в расплав кристаллах (затравках), на которых и начинается наращивание кристаллической фазы из расплава.

В большей части описанных ниже промышленных методов кристаллизации чаще используют именно гетерогенное зарождение, применяя затравки из заранее выращенного кристалла необходимого вещества или из изоморфных ему веществ. Употребляя затравки с определенной кристаллографической ориентацией или придавая им особую форму, можно выращивать кристаллы с заданной ориентировкой или профилем, т. е. требуемой формы.

Термодинамика процесса гомогенной кристаллизации из расплава.

Как ясно из предыдущего раздела, самопроизвольная, или гомогенная, кристаллизация обусловлена стремлением вещества перейти в более устойчивое состояние, характеризуемое уменьшением термодинамического потенциала Φ . Кристаллизация происходит в том случае, если термодинамический потенциал вещества в твердом состоянии будет меньше термодинамического потенциала вещества в жидком состоянии, что обычно достигается за счет переохлаждения жидкого металла до температур T_n ниже равновесной $T_{кр}$.

Поскольку жидкий металл, характеризующийся лишь ближним порядком в расположении атомов, обладает большей внутренней энергией, чем твердый со структурой дальнего порядка, при кристаллизации должна выделяться теплота. Между скрытой теплотой кристаллизации ($\Delta I_{кр}$) и равновесной температурой кристаллизации ($T_{кр}$) существует определенная связь. Природу этой связи можно понять исходя из следующих соображений.

Так как при равновесной температуре кристаллизации термодинамические потенциалы в жидком и твердом состояниях равны, для термодинамического потенциала

$$\Phi = I - TS \quad (5.3.1)$$

следует, что

$$I_{\text{ж}} - T_{\text{кр}}S_{\text{ж}} = I_{\text{кр}} - T_{\text{кр}}S_{\text{кр}}, \quad (5.3.2)$$

а теплота кристаллизации, определяемая как разность энтальпий в жидком и кристаллическом состоянии, равна

$$Q_{\text{кр}} = \Delta I_{\text{кр}} = I_{\text{ж}} - I_{\text{кр}} = T_{\text{кр}}(S_{\text{ж}} - S_{\text{кр}}) = T_{\text{кр}}\Delta S. \quad (5.3.3)$$

Выражение (5.3.3), которое можно переписать как

$$\Delta S = \frac{\Delta I_{\text{кр}}}{T_{\text{кр}}}, \quad (5.3.4)$$

характеризует степень упорядоченности в расположении атомов при кристаллизации и устанавливает искомую связь между $\Delta I_{\text{кр}}$ и $T_{\text{кр}}$. В зависимости от величины энергии межатомного взаимодействия теплота кристаллизации для различных металлов изменяется от 2500 Дж/моль (Na, K и др.) до 20 000 Дж/моль (W и др.).

Теоретически для малых переохлаждений ($\Delta T = T_{\text{кр}} - T_{\text{п}}$) процесс кристаллизации изображается кривой охлаждения типа 1 на рис. 5.8, кривые охлаждения вида 2 показывают ход охлаждения для реальных процессов кристаллизации. Как видно из кривой 2, для начала кристаллизации расплав необходимо переохладить до температуры $T_{\text{п}}$, лежащей существенно ниже равновесной температуры кристаллизации $T_{\text{кр}}$. Только в этом случае создаются энергетические (термодинамические) условия, необходимые для протекания процесса кристаллизации.

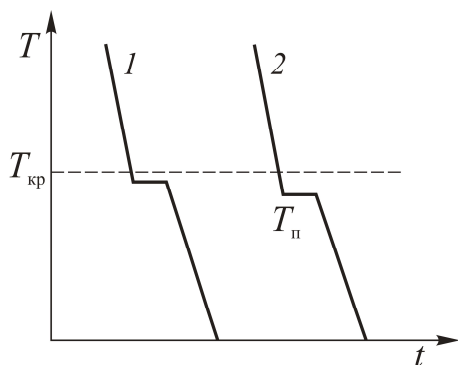


Рис. 5.8. Виды реальных кривых охлаждения при кристаллизации для малых (1) и больших (2) переохлаждений

Разница между равновесной ($T_{\text{кр}}$) и реальной ($T_{\text{п}}$) температурой кристаллизации называется степенью переохлаждения ($\Delta T = T_{\text{кр}} - T_{\text{п}}$). Степень переохлаждения зависит от природы металла: она увеличивается с повышением чистоты металла, а также с ростом скорости охлаждения.

Влияние скорости охлаждения на характер кривых охлаждения показано на рис. 5.9. При медленном охлаждении, соответствующем скорости v_1 , степень переохлаждения ΔT_1 невелика и кристаллизация протекает при температуре, близкой к равновесной. С увеличением скорости охлаждения (кривые v_2 и v_3) степень переохлаждения растет и процесс кристаллизации протекает при все более понижающейся температуре.

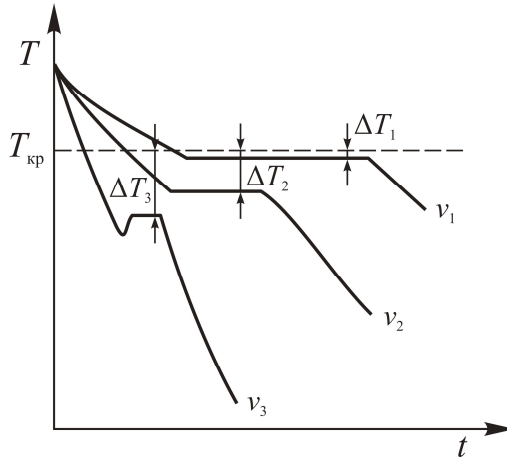


Рис. 5.9. Кривые охлаждения расплавленного металла с разными скоростями: $v_1 < v_2 < v_3$

Обычная степень переохлаждения металлов при кристаллизации в производственных условиях колеблется от 10 до 30 °С, в то время как степень перегрева при плавлении металлов, как правило, не превышает нескольких градусов. При больших скоростях охлаждения степень переохлаждения может достигать сотен градусов.

Термодинамические условия зарождения центров гомогенной кристаллизации в расплав. Как отмечалось выше, процесс гомогенной кристаллизации начинается стадией возникновения зародышей кристаллов. Появление центров кристаллизации изменяет термодинамический потенциал системы расплав – кристалл Ф. Из соотношений (5.3.1) и (5.3.4) следует, что удельная разность термодинамических потенциалов при переходе жидкости в кристаллическое состояние равна

$$\Delta\Phi_v = \frac{\Delta I_{кр} \Delta T}{T_{кр}}. \quad (5.3.5)$$

Кроме того, вследствие появления поверхности раздела фаз между расплавом и зародышем термодинамический потенциал увеличивается на $S\sigma$ (σ – поверхностное натяжение, S – площадь поверхности зародыша).

Если принять, что зародыш имеет форму сферы радиусом r , то общее изменение термодинамического потенциала будет равно (см. (1.16.9), Т. 1)

$$\Delta\Phi = -\frac{4}{3}\pi r^3 \Delta\Phi_v + S\sigma = -\frac{4}{3}\pi r^3 \Delta\Phi_v + 4\pi r^2 \sigma. \quad (5.3.6)$$

Из уравнения (5.3.6) следует, что графическая зависимость изменения термодинамического потенциала от размера зародыша имеет максимум (рис. 5.10) при некотором значении $r_{кр}$, названном критическим. Зародыши с размером больше критического вызывают уменьшение $\Delta\Phi$ и поэтому являются устойчивыми, т. е. способными к росту. Зародыши, имеющие размер меньше критического, нестабильны и растворяются в расплаве, поскольку вызывают увеличение $\Delta\Phi$.

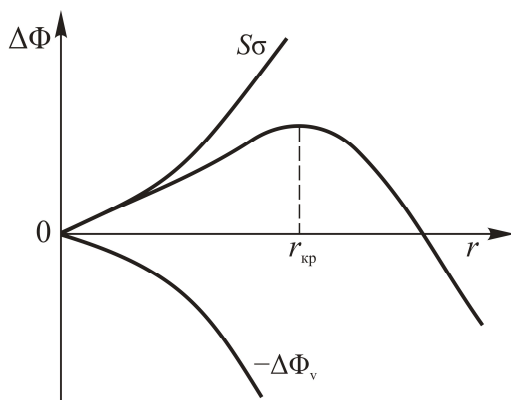


Рис. 5.10. Изменение термодинамического потенциала при образовании зародышей кристаллической фазы в зависимости от их размера

Для определения критического значения размера зародыша $r_{кр}$ нужно продифференцировать $\Delta\Phi$ по r и приравнять производную к нулю:

$$-\frac{4\pi r_{кр}^2 \Delta I_{кр} \Delta T}{T_{кр}} + 8\pi r_{кр} \sigma = 0.$$

В результате получим, что

$$r_{кр} = \frac{2\sigma T_{кр}}{\Delta I_{кр} \Delta T}. \quad (5.3.7)$$

При $T \rightarrow T_{кр}$ критический радиус зародыша $r_{кр} \rightarrow \infty$. Это указывает на необходимость переохлаждения расплава для реализации процесса кристаллизации.

С увеличением степени переохлаждения ΔT поверхностное натяжение изменяется слабо, тогда как $\Delta\Phi_v$ линейно растет (5.3.5). Следовательно, с увеличением ΔT критический размер зародыша должен уменьшаться по закону (5.3.7). Последнее означает возможность возникновения большего числа зародышей, способных к росту, при увеличении степени переохлаждения. В этом легко убедиться, если подсчитать критический размер зародыша, например железа, при разных степенях переохлаждения ($\Delta T_1 = 10$ К и $\Delta T_2 = 100$ К). Сделаем такой расчет для железа.

Если принять удельную скрытую теплоту кристаллизации железа $\Delta I_{кр} = 1,5 \cdot 10^3$ Дж/см³, а температуру кристаллизации равной $T_{кр} \approx 1800$ К, то с помощью формулы (5.3.5) получим, что при $\Delta T_1 = 10$ К величина $\Delta\Phi_v \approx 8,3$ Дж/см³. Подставив полученное значение $\Delta\Phi_v$ и значение $\sigma \approx 2,0 \cdot 10^{-5}$ Дж/см² в формулу (5.3.7), получим $r_{кр} \approx 100$ нм. Аналогичные расчеты, проведенные для переохлаждения $\Delta T_2 = 100$ К, показывают, что в этом случае $r_{кр} \approx 10$ нм.

Имея в виду, что период решетки высокотемпературной модификации железа приблизительно равен 0,3 нм, можно подсчитать число элементарных ячеек в зародыше критического размера. При степени переохлаждения 10 К зародыш железа критического размера будет содержать около $3,55 \cdot 10^7$ элементарных ячеек, а при степени переохлаждения 100 К уменьшится на три порядка – $3,55 \cdot 10^4$.

Скорость зарождения кристаллической фазы в расплаве. В кинетической теории зарождения новой фазы возникновение способного к дальнейшему росту зародыша с размером, большим критического, рассматривается как флуктуационный процесс образования термодинамически невыгодного микросостояния. Если степень отклонения системы от равновесного состояния $\Delta\Phi$ мала, в системе возникает некоторое равновесное число устойчивых зародышей \bar{I} , возникающих за единицу времени в единице объема расплава. Вероятность создания \bar{I} зародышей определяется вероятностью образования зародышей критического размера при гомогенном зарождении вследствие флуктуации теплового движения атомов $f_{фл}$ и вероятностью $f_{прис}$ дальнейшего присоединения новых атомов из расплава к зародышу критических размеров.

Вероятность образования зародышей критического размера может быть описана равновесной функцией распределения:

$$f_{фл} = N_0 \exp\left(-\frac{\Delta\Phi_v}{kT}\right),$$

где k – постоянная Больцмана, а N_0 – число мест, которые могут занимать атомы центра кристаллизации (зародыша). Последнее приближенно равно

числу атомов вещества в единице объема системы (иногда учитываются некоторые дополнительные энтропийные эффекты).

Критический зародыш твердой фазы становится центром кристаллизации только тогда, когда он получает возможность присоединять новые атомы из расплава. Вероятность присоединения атомов к зародышу дается выражением

$$f_{\text{прис}} = \omega \exp\left(-\frac{\Delta E_{\text{акт}}}{kT}\right),$$

где ω – частота колебаний атомов (число попыток перескока атома из одного равновесного положения в другое), $\Delta E_{\text{акт}}$ – энергия активации перехода атомов через межфазную границу кристаллический зародыш – расплав.

В первом приближении выражение для интенсивности образования зародышей в единице объема расплава может быть записано в виде

$$\bar{I} = N_0 \omega \exp\left(-\frac{\Delta E_{\text{акт}}}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta \Phi_v}{kT}\right). \quad (5.3.8)$$

Существенная зависимость интенсивности образования зародышей \bar{I} от $\Delta \Phi_v$ в виде соотношения (5.3.8) приводит к тому, что гомогенное зарождение новой (кристаллической) фазы возможно только при достаточно высоких значениях $\Delta \Phi_v$, в результате чего и происходит резкий рост \bar{I} с увеличением $\Delta \Phi_v$. Дальнейший рост зародышей сверхкритических размеров может определяться скоростью присоединения атомов к поверхности растущего зародыша (первая экспонента в соотношении (5.3.8)), скоростью отвода тепла, выделяющегося при кристаллизации из расплава.

В реальных процессах затвердевания расплава центры кристаллизации (зародыши) возникают гомогенно в объеме переохлажденного расплава (первичное зародышеобразование) и одновременно по гетерогенному механизму на поверхностях кристаллизатора либо посторонних твердых частицах (вторичное зародышеобразование $I_{\text{вт}}$). В этом случае общее число зародышей кристаллической фазы, возникающих в единице объема расплава в 1 с, можно определить из соотношения

$$\bar{I} = \alpha N_0 \omega \exp\left(-\frac{\Delta E_{\text{акт}}}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta \Phi_v}{kT}\right) + I_{\text{вт}}.$$

Скорость зарождения кристаллической фазы в расплаве играет большую роль в формировании микроструктуры поликристаллических слитков. В этой связи рассмотрим результаты экспериментов по изучению влияния

скорости образования зародышей \bar{I} (СОЗ) и скорости роста зародыша (СРЗ) при гомогенной кристаллизации. Размерность СОЗ $\text{мм}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$, СРЗ – $\text{мм}/\text{с}$. Фактически СРЗ определяется скоростью удаления грани зародыша от его центра. Оба процесса связаны с миграцией атомов и зависят от температуры.

Графически поведение скорости образования зародышей и скорости их роста в зависимости от степени переохлаждения представлены на рис. 5.11.



Рис. 5.11. Изменение скорости образования зародышей СОЗ (1) и скорости роста кристаллов СРЗ (2) в зависимости от степени переохлаждения ΔT . На вставках схематически показаны крупнозернистая (нижняя) и мелкозернистая (верхняя) структуры поликристалла, формирующиеся при переохлаждениях ΔT_1 и ΔT_2 соответственно

Рассмотрим причины таких зависимостей СОЗ и СРЗ от степени переохлаждения. При равновесной температуре кристаллизации, т. е. когда $\Delta T = 0$, значения СОЗ и СРЗ равны нулю, т. е. кристаллизации не происходит. С увеличением степени переохлаждения ΔT разность термодинамических потенциалов $\Delta\Phi_v = \Delta\Phi_{\text{ж}} - \Delta\Phi_{\text{кр}}$ растет, и при высокой подвижности атомов величины СОЗ и СРЗ также растут, достигая максимума. Последующее уменьшение СОЗ и СРЗ на рис. 5.11 объясняется снижением подвижности атомов (коэффициента диффузии) при уменьшении температуры в результате сильного переохлаждения, поскольку малые значения коэффициента диффузии (высокая вязкость расплава) затрудняют встраивание атомов жидкости в кристаллическую решетку твердого тела. В результате при очень сильном переохлаждении СОЗ и СРЗ снова должны становиться равными нулю и жидкость не кристаллизуется, а превращается, как отмечено выше, в аморфное тело.

Для металлов, у которых при обычных условиях отвода тепла большие переохлаждения, как правило, не реализуются, характерны восходящие ветви кривых СОЗ и СРЗ, так что с ростом ΔT скорости обоих процессов увели-

чиваются. В случае небольших степеней переохлаждения, когда зародыш критического размера велик, а скорость образования зародышей мала, при затвердевании формируется крупнокристаллическая структура (см. нижнюю вставку на рис. 5.11, соответствующую переохлаждению ΔT_1). Небольшие степени переохлаждения достигаются при разливке жидкого металла в тигель с низкой теплопроводностью или в подогретый тигель.

Увеличение переохлаждения происходит при заливке жидкого металла в холодные тигли (формы), а также при уменьшении толщины стенок тигля, что приводит к быстрому отводу тепла от расплава. Поскольку при этом скорость образования зародышей увеличивается более интенсивно, чем скорость их роста, из расплава получается много более мелких кристаллов (см. верхнюю вставку на рис. 5.11, соответствующую переохлаждению ΔT_2).

Механизмы и модели роста кристаллов. Послойный механизм роста монокристаллов. Как показано выше, для гомогенной кристаллизации из пара, жидкости или из твердой фазы необходимо, чтобы в материнской фазе зародился устойчивый кристаллический зародыш, который должен служить затравкой для дальнейшего роста. Когда зародыш сформировался, далее происходит спонтанное присоединение вещества к нему, в результате чего в равновесных условиях (без переохлаждения или пересыщения) могут расти и развиваться грани кристалла, образующие затем кристаллический многогранник.

Для описания этого процесса в щелочно-галоидных кристаллах В. Косселем и И. Странским была создана молекулярно-кинетическая модель роста. Согласно модели Косселя – Странского, поверхность растущего кристалла является плоской, а рост происходит при незначительном пересыщении или переохлаждении. В качестве механизма роста используется элементарный процесс последовательного встраивания ионов в разные позиции на поверхности кристаллического зародыша или затравки (рис. 5.12). Другими словами, предполагается, что процесс роста осуществляется как ряд последовательных повторяемых шагов, на каждом из которых выполняется работа «повторяемого шага».

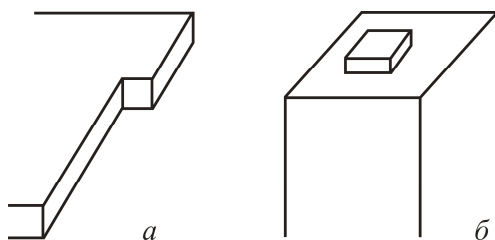


Рис. 5.12. Присоединение частиц к поверхности совершенного кристалла: *а* – разные позиции на грани кристалла; *б* – двумерный зародыш на грани кристалла

Спиральный механизм роста кристаллов. Вероятность образования двумерных зародышей на грани растущего кристалла и его последующий плоский рост являются весьма чувствительной функцией степени переохлаждения (или пересыщения). Вероятность возникновения плоского зародыша оказывается весьма незначительной при малых переохлаждениях (или пересыщениях). Термодинамические расчеты показывают, что рост кристалла может начаться лишь при относительном переохлаждении (пересыщении), не меньшем, чем десятки процентов. Однако, как показывают эксперименты, реальные процессы кристаллизации начинают идти при сколь угодно малых переохлаждениях (пересыщениях), порядка долей процента. Более того, реальные кристаллы оказываются тем более совершенными, чем меньше переохлаждение или пересыщение, при которых они росли. Это противоречие, выяснившееся в 50-х гг. XX в., послужило одним из толчков к развитию теории роста реального кристалла.

Расчеты молекулярно-кинетической теории были проведены для бездефектных щелочно-галоидных кристаллов с атомарно-гладкими гранями, на которых в лучшем случае могут существовать ступеньки (террасы) атомного масштаба (типа 3 на рис. 5.13). Такой механизм роста за счет их латерального (бокового) смещения ступенек в случае присоединения атомов из расплава (или раствора) получил название ступенчатого.

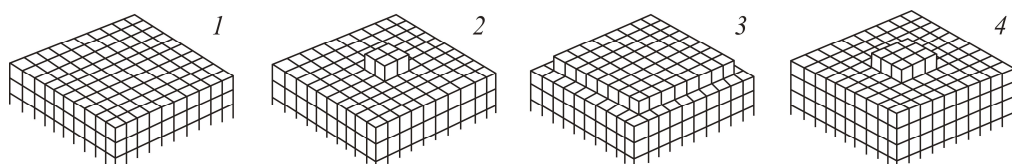


Рис. 5.13. Рост совершенной грани кристалла путем разрастания двумерного зародыша: 1–4 – последовательные стадии роста

Как показывают опыты, одним из вероятных механизмов роста реальных кристаллов оказывается присоединение частиц (атома, иона) к выходу на поверхность кристалла винтовых дислокаций, которые возникают в процессе роста из-за градиентов температуры или концентрации вещества в материнском растворе. Из рис. 5.14 видно, что выход винтовой дислокации на поверхность кристалла представляет собой ступеньку, к которой легко может присоединиться новая частица.

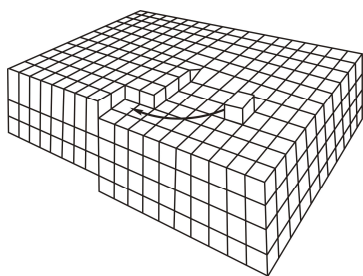


Рис. 5.14. Схемы выхода на поверхность грани кристалла винтовой дислокации и присоединения к выступу очередной частицы

Описанный характер роста кристаллов называется спирально-слоистым. Полная схема его реализации показана на рис. 5.15.

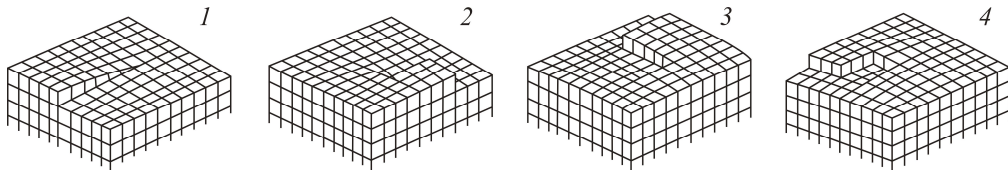


Рис. 5.15. Последовательные стадии роста совершенной грани кристалла по слоисто-спиральному механизму

Форма и строение кристаллов и кристаллических образований.

Морфология кристаллических твердых тел и их свойства зависят от химического состава (электронного строения атомов), характера взаимодействия атомов (химической связи) и их расположения в пространстве, а также условий выращивания. При выращивании в термодинамически равновесных условиях кристаллы могут иметь правильную плоскогранную форму (рис. 5.16). Такие кристаллы принято называть монокристаллами.

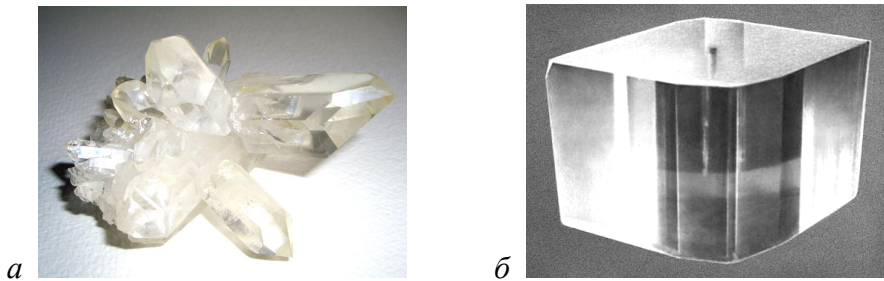


Рис. 5.16. Вид кристаллов, выращенных в менее равновесных (а) и более равновесных (б) условиях: а – друза (скопление) из монокристаллов кварца, б – монокристалл сегнетовой соли

Кристаллические тела остаются твердыми, т. е. сохраняют приданную им форму, при нагреве до вполне определенной температуры плавления. Аморфные тела при нагреве размягчаются в большом температурном интервале, становясь сначала вязкими, и лишь затем переходят в жидкое состояние. При охлаждении процесс идет в обратном направлении.

Кристаллическое состояние твердого тела более стабильно, чем аморфное. Аморфное состояние можно обнаружить во многих веществах, например ускоренным охлаждением из парообразного или жидкого состояния (см. ниже). Однако при повторном нагреве и длительной выдержке при повышенных температурах, а в некоторых случаях при деформации неустойчивость аморфного твердого тела проявляется в частичном или полном переходе в кристаллическое состояние. Примерами такого перехода могут служить

помутнение неорганических стекол при нагреве или длительном использовании, частичная кристаллизация плавленного янтаря при нагреве и др.

Атомная, нано-, микро- и макроструктура кристаллических образований. Характер атомного строения твердых материалов (упорядоченные или аморфные), их внешняя форма (правильная или случайная), размеры и форма отдельных составляющих определяются условиями их получения (выращивания). Все эти детали строения твердых кристаллических образований описываются понятием «структура».

Атомная структура указывает расположение в пространстве образующих кристалл ионов, атомов или молекул. Ее обычно изучают дифракционными методами с использованием пучков рентгеновских лучей, электронов и нейтронов. Анализируя дифракционную картину, наблюдаемую при взаимодействии атомов кристалла с рентгеновскими лучами (или пучками электронов и нейтронов), можно получить обширную информацию о строении кристаллов.

Внешняя форма и размеры кристаллов, образующихся при кристаллизации, зависят от условий их роста: скорости и направления отвода тепла, температуры плавления вещества (при кристаллизации из расплавов), скорости подвода вещества к подложке и отвода тепла (при кристаллизации из паровой или газовой фазы), содержания примесей и многих других факторов. При более или менее равновесных условиях роста кристаллы могут иметь плоскогранную форму, а в предельном случае вырастают в виде совершенного многогранника.

В случае неравновесной кристаллизации, например при возникновении в расплаве многих центров кристаллизации (зародышей), форма растущих из них кристаллов будет неправильной, так как по мере роста они будут соприкасаться и мешать друг другу расти дальше. В этом случае образовавшаяся при кристаллизации система называется поликристаллом (рис. 5.17), а составляющие его кристаллы неправильной формы – зернами или кристаллитами. Атомное строение (кристаллическая решетка) последних будет таким же, как и в одиночных монокристаллах.

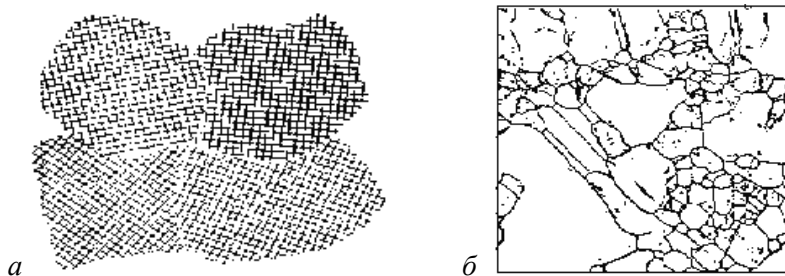


Рис. 5.17. Схема поликристаллического строения (а) и вид поверхности протравленного плоского шлифа (б) поликристаллического материала

Для обозначения характера структурных составляющих поликристаллических образований часто используется классификация (обозначение), основанная на размерах зерен (кристаллитов). Если размеры зерен в поликристаллическом образовании лежат в диапазоне 1–100 нм, то имеют в виду наноструктуру (рис. 5.18). Под микроструктурой понимают структуру поликристаллического образования с размерами зерен от микрометров до долей миллиметра. Макроструктура – это структура поликристалла с размерами зерен более миллиметра.

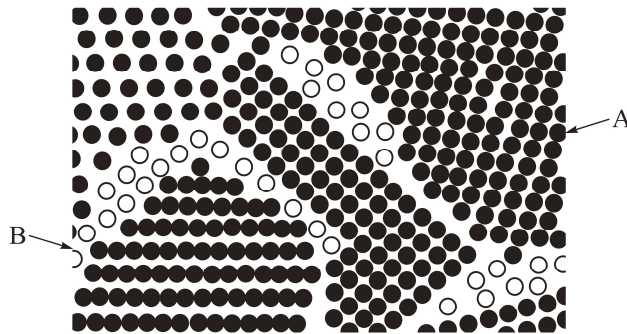


Рис. 5.18. Схематическое представление структуры нанокристаллического материала. Черные и светлые кружки – атомы, принадлежащие нанозернам (А) и межзерненным границам (В) соответственно

Пример схематического расположения атомов в двумерном сечении зерен нанокристаллического материала, построенного из идентичных атомов, показан на рис. 5.18. Как видно, такой наноструктурированный материал может быть разделен на две основные структурные составляющие: упорядоченную, которая включает в себя атомы, локализованные внутри зерен, и межзеренную, формируемую из всех атомов, расположенных на границах зерен. Из рис. 5.18 следует, что для нанокристаллитов, как и для монокристаллов, характерен дальний порядок расположения атомов. Расположение зернограницных атомов в пространстве может отличаться от расположения атомов внутри кристаллитов. Атомная структура границ не является простой и зависит от многих факторов, в первую очередь от взаимной ориентации атомных решеток соседствующих зерен. Как видно, расположение атомов и межатомные расстояния в границе типа А отличаются от таковых в границе типа В.

Наблюдать мелкие структурные составляющие (наноразмерные зерна – нанокристаллиты) можно только с помощью электронных микроскопов, а также методами атомно-силовой или туннельной микроскопии. Электронная и атомно-силовая микроскопия дают также возможность выявить в них такие дефекты, как дислокации и их скопления, ступеньки роста, границы зерен и т. д.

Равновесная кристаллизация большого количества кристаллизуемого материала из одного единственного центра кристаллизации (зародыша) приведет к образованию монокристалла. В инженерном (конструкционном) материаловедении эти монокристаллы выращиваются только при строго определенных и тщательно контролируемых условиях, что резко увеличивает их стоимость. Поэтому затраты на производство монокристаллов оправданы только для специальных применений: полупроводниковое приборостроение, микро- и нанoeлектроника, солнечные элементы, функциональные материалы для разного рода датчиков, сенсоров и др.

При неконтролируемых условиях роста кристаллических материалов их затвердевание начинается с образования множества центров кристаллизации (например, в жидкости, на холодной подложке при конденсации пара, на границах зерен в деформированных поликристаллах и т. д.), что приводит к формированию поликристаллических образований, состоящих из множества кристаллитов (зерен).

Дендритный рост кристаллов. Металлические кристаллы, растущие из расплава или пересыщенного раствора, при быстром охлаждении последних часто формируют структуру, состоящую из «главных ветвей» со многими отростками (рис. 5.19). Растущий кристалл с такой морфологией получил название дендрита, что подразумевает разветвленность, древообразность. Обычно формирование дендритов происходит при быстрой кристаллизации вещества в стеснённых условиях роста, в том числе, вследствие неравномерного поступления вещества к отдельным частям растущих кристаллов. Необходимыми условиями для образования дендритов являются сильное переохлаждение и недостаточное перемешивание.

Дендриты весьма часто возникают при разливке жидкого металла в изложницу, или кристаллизационную форму, в металлургическом производстве. На рис. 5.19 показана принципиальная трехмерная схема роста дендрита на кристаллическом зародыше кубической формы с шестью гранями. Для простоты добавление кристаллографических ячеек из атомов при непрерывном затвердевании не показано.

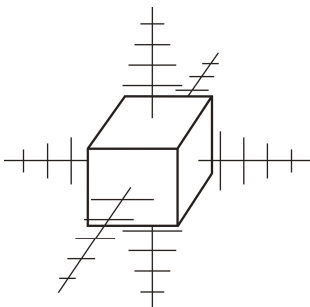


Рис. 5.19. Схема роста дендрита для кристалла с простой кубической структурой

Возможность реализации дендритной схемы формирования кристалла обусловлена тем, что максимальная скорость роста кристаллитов наблюдается по плоскостям и направлениям, которые имеют наибольшую плотность упаковки атомов (в данном случае в направлениях, нормальных к граням растущего кристалла, что показано на схеме в виде линий.). В результате в таких направлениях вырастают длинные «ветви», называемые осями первого

порядка. По мере роста на осях первого порядка дендрита появляются и начинают расти «ветви» второго порядка, от которых ответвляются «ветви» третьего порядка и т. д.

Влияние характера отвода тепла на особенности макроструктуры поликристаллических слитков. Рассмотрим особенности структуры металлического поликристалла, образуемого при достаточно быстром охлаждении расплава, например при разливке в металлургическую форму-кристаллизатор. В этом случае закристаллизовавшийся поликристалл называется слитком. Макро- и микроструктура слитка зависит от многих факторов, основными из которых являются количество и свойства примесей в чистом металле, температура разливки, скорость охлаждения при кристаллизации, а также конфигурация, температура, теплопроводность, шероховатость внутренней поверхности литейной формы и т. д.

Наиболее существенно влияют на форму и размеры растущих зерен условия отвода тепла в процессе кристаллизации. Это обусловлено тем, что процесс кристаллизации идет преимущественно в направлении, обратном отводу тепла (в первую очередь в направлении, перпендикулярном стенкам сосуда-кристаллизатора. В случае такого направленного теплоотвода обычно образуются вытянутые зерна столбчатого типа. Если же теплота от растущего кристалла отводится во всех трех направлениях с приблизительно одинаковой скоростью, то при затвердевании расплава будут формироваться равноосные кристаллиты (приблизительно одинаковых размеров во всех трех координатах).

На рис. 5.20 приведены схемы формирующейся макроструктуры слитка, получаемого литьем металлического расплава в простую вертикальную металлическую форму. Строение слитка (размеры, форма и ориентация кристаллитов) после завершения процесса кристаллизации зависит от степени переохлаждения ΔT , направлений отвода тепла и наличия готовых центров кристаллизации (шероховатостей на внутренней поверхности литейной формы). Типичные структуры металлического слитка при разливке в изложницу показаны на рис. 5.20. Проанализируем их. Одна из особенностей макроструктуры литого слитка состоит в том, что вследствие недостатка жидкого металла для заполнения междендритного пространства (из-за меньшей плотности расплава по сравнению с плотностью кристаллической фазы) в верхней части слитка, которая затвердевает в последнюю очередь, часто формируется усадочная раковина 4. Металл под усадочной раковиной получается рыхлым, в нем содержится много усадочных пор.

Усадка может вызывать появление трещин при затвердевании вещества. Поскольку самая холодная область объема жидкости находится на месте ее контакта с сосудом-кристаллизатором, затвердевание обычно начинается на их поверхности. Так как кристалл растет внутрь сосуда-кристаллизатора, материал продолжает сжиматься по мере уменьшения количества расплава.

Если твердая поверхность, на которой начинается кристаллизация, слишком жесткая, возникшие напряжения могут превысить напряжение разрыва (предел прочности) материала и вызвать образование трещин.

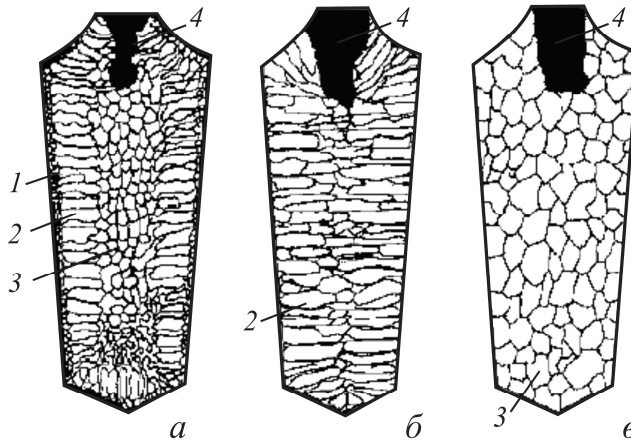


Рис. 5.20. Схематическое изображение разных видов макроструктуры литых слитков: *а* – небольшая степень переохлаждения (ΔT) (нормальное охлаждение); *б* – сильный перегрев и быстрое охлаждение (большая ΔT); *в* – очень медленное охлаждение (малая ΔT). 1 – зона мелких равноосных кристаллов; 2 – зона столбчатых кристаллов; 3 – зона равноосных кристаллов; 4 – усадочная раковина

Слитки, в структуре которых присутствуют усадочные поры и раковины, часто растрескиваются при их последующей механической обработке, что приводит к выходу сварных деталей из строя. Поэтому части слитка с поверхностной усадочной раковиной и рыхлый металл, образующийся под ней или в центре формы, обычно не используются при изготовлении ответственных деталей и других изделий.

5.4. Закалка однокомпонентных кристаллических материалов

Одним из важных способов термического воздействия на кристаллические материалы и изделия, широко применяемых в материаловедении, металлургии и технологии материалов, является закалка.

Под закалкой понимается такой вид термической обработки, приводящий к изменению структурно-фазового состояния, при котором объект закалки (материал или изделие) сначала нагревается до высокой температуры, называемой температурой закалки $T_{\text{зак}}$, выдерживается при этой температуре для приведения объекта в равновесное состояние и затем резко охлаждается

до $T \ll T_{\text{зак}}$ (комнатной или более низкой температуры) с целью фиксации высокотемпературного состояния или предотвращения (подавления) процессов, происходящих при медленном (равновесном) охлаждении и вызывающих формирование нежелательной микро- и макроструктуры кристалла. Один из вариантов закалки – перевод материала в расплавленное состояние и затем быстрое охлаждение расплава с целью его превращения в твердое неупорядоченное (в пределе в аморфное или стеклообразное) состояние. Закалка в твердом состоянии возможна только для кристаллических веществ, равновесное состояние которых при высокой температуре отличается от равновесного состояния при низкой температуре (например, числом дефектов кристаллической решетки, кристаллической структурой для однокомпонентных веществ (полиморфизм), фазовым составом для многокомпонентных веществ и т. д.).

Закалка эффективна только в том случае, если реально достижимая скорость охлаждения достаточна для того, чтобы не успели развиваться процессы, подавление которых и является целью закалки (в первую очередь стараются подавить диффузию атомов и формирование дальнего порядка).

Состояние кристаллического материала, возникающее в результате закалки, неравновесное и лишь относительно устойчивое ниже $T_{\text{зак}}$, так как при последующем нагреве материалы обязательно переходят в более устойчивое кристаллическое состояние (рекристаллизация).

Закалке могут подвергаться в естественных условиях или в определённом технологическом процессе многие вещества (металлы и их сплавы, диэлектрики, стекло и пр.).

Закалку как метод фиксации высокотемпературного состояния чистого (однокомпонентного) материала применяют для изучения дефектов кристаллической решетки (например, вакансий), которые при медленном охлаждении закристаллизованного вещества до низких (комнатных) температур остаются лишь в небольшом количестве; фиксации высокотемпературной модификации (типа) кристаллической структуры полиморфных веществ; придания материалу иных, чем в равновесии, свойств за счет изменения его микро- и макроструктуры (повышенной твердости и механической прочности, магнитожесткости, пониженной электропроводности и др.), а также для получения материалов в аморфном (стеклообразном) или наноструктурированном (в том числе нанокристаллическом) состоянии при закалке из расплава.

Закалка в твердом состоянии. Закалка в твердом состоянии нагретых до высокой температуры изделий или деталей (например, шестерни, режущий инструмент и т. д.), а также заготовок материалов (пластины, фольги, плиты и др.) чаще всего осуществляется путем их погружения в закалочную среду (воздух, вода, масло или жидкий полимер) с целью быстрого охлаждения. Обычно закалка такого типа производится путем охлаждения объек-

тов закалки с достаточно высокой скоростью, для того чтобы избежать создания нежелательной внутренней микроструктуры изделия или заготовки, а также для обеспечения однородности механических свойств и минимизации остаточных напряжений во избежание искажения формы деталей.

Закалка кристаллических твердых тел является сложным процессом и обычно включает в себя три стадии: формирование вокруг закаливаемой детали пленки из пара закалочной среды; кипение закалочной среды, в том числе зарождение процесса кипения; конвективную стадию.

Главной задачей в технологии закалки является обеспечение сохранения однородной (и высокой) скорости отвода тепла от закаливаемого объекта. Неоднородное охлаждение может привести к возникновению остаточных напряжений (и как следствие, к деформации объекта закаливания), что вызывает его коробление. В этом смысле, если в качестве закалочной среды используется жидкость, то наиболее критичной является стадия образования оболочки из пара закалочной жидкости вокруг закаливаемой детали. Эта оболочка разделяет деталь и закалочную жидкость, что уменьшает скорость отвода тепла от закаливаемого тела и тем самым снижает эффективность закалки. Обычно эту паровую оболочку стремятся разрушить путем интенсивного перемешивания закалочной среды (жидкости) вблизи поверхности закаливаемого изделия или заготовки.

Очевидно, что скорость закалки зависит не только от типа и степени перемешивания закалочной среды, но и от теплопроводности и теплоемкости самого закаливаемого объекта. Уже в случае использования относительно простых моделей при моделировании потоков жидкости внутри емкости (резервуара) с закалочной средой легко обнаруживается неоднородность распределения потоков жидкости вокруг объекта закалки (особенно сложной формы), которые могут привести к неоднородности закалки. Как показывает моделирование, однородное охлаждение деталей сложной формы может быть достигнуто в первую очередь путем модификации формы резервуара с закалочной жидкостью. Именно моделирование условий закалки позволяет оптимизировать форму закалочной ванны и тем самым существенно улучшить характеристики реального процесса закалки и избежать образования дефектов в конечном продукте, что улучшит его качество.

Закалка из расплава. Как было указано в предыдущем разделе, чем выше скорость охлаждения расплава, тем ниже температура, до которой может быть переохлажден жидкий металл перед кристаллизацией. Это создает возможность проведения закалки из расплава, которая приобрела в последние годы большое практическое значение. Оказалось, что при сверхвысоких скоростях охлаждения расплава (выше 10^6 К/с) до комнатной температуры диффузия атомов может замедлиться настолько, что произойдет подавление образования зародышей и роста кристаллитов. В этом случае, как отмечено выше, при затвердевании может быть образована аморфная или

стеклообразная структура материала. Полученные таким образом металлические или полупроводниковые материалы называются металлическими или полупроводниковыми стеклами.

Сложнее всего получить аморфную структуру чистого металла (вследствие его высокой теплопроводности и быстрого отвода тепла). Для образования аморфной структуры в чистом металле необходимы сверхвысокие скорости охлаждения расплава (10^7 – 10^9 К/с). Эти скорости обычно достигают такими способами, как катапультирование капли расплава на холодную пластину; центрифугирование капли или струи; прокатка между холодными валками жидкого металла, подаваемого в виде струи; распыление струи расплава газом или жидкостью с высокой охлаждающей способностью; лазерное плавление или абляция поверхности изделия; сверхбыстрое охлаждение пара; электролитическое осаждение; катодное либо ионно-лучевое распыление с высокими скоростями осаждения на холодные подложки и др.

Наиболее эффективными способами получения аморфных веществ, пригодных для практического применения, считаются охлаждение жидкого металла при центрифугировании на поверхностях вращающихся металлических барабанов, изготовленных из материалов с высокой теплопроводностью (обычно из меди) и большой теплоемкостью, а также прокатка жидкого металла между холодными валками. Аморфные металлы в этом случае могут быть получены лишь в виде очень тонких лент, проволок, мелких гранул, чешуек и т. д. Существенно, что аморфизованные таким образом металлы находят важное техническое применение из-за их необыкновенных свойств, которые недостижимы для металлов с упорядоченной кристаллической структурой. Как будет показано ниже, атомная структура аморфного металла может быть охарактеризована как плотная, но со случайной упаковкой твердых атомов-шаров.

Аморфный металл можно также получить при расплавлении поверхности изделий мощным лазерным лучом, когда расплавленный тонкий поверхностный слой затем кристаллизуется с высокой скоростью благодаря быстрому отводу тепла массой основного металла.

Нанокристаллические и наноструктурированные материалы. При быстрой конденсации паров материала на охлажденной подложке или охлаждении расплава с умеренной скоростью, когда диффузионная миграция атомов не полностью подавлена, процесс затвердевания может приводить не к формированию стеклообразного состояния твердого тела без дальнего порядка, как при сверхбыстрой закалке, либо поликристалла при медленном охлаждении, а к образованию промежуточного состояния, которое условно можно назвать нанокристаллическим. Такое состояние можно также получить при определенных режимах нагрева материала, находящегося в аморфном состоянии (путем твердотельной кристаллизации).

В нанокристаллическом состоянии материал конденсируется в виде наноразмерных структурных элементов (кластеров, кристаллитов, зерен, гранул), число атомов в каждом не превышает 10^2 – 10^4 . При этом атомная структура таких наноразмерных элементов в материалах может обладать не только ближним, но и дальним (в пределах зерна) порядком. Однако этот порядок не всегда совпадает с тем, который имеет кристаллическая решетка объемного (массивного) монокристалла или поликристалла такого же состава. Именно поэтому материалы, состоящие из наноразмерных структурных элементов, часто более правильно называть наноструктурированными, а не нанокристаллическими. Более того, в ряде случаев (например, для получения магнитомягких материалов на основе железа и кобальта) наноструктурирование материала осуществляется таким образом, чтобы расположение атомов в его структурных элементах (кластерах, зернах, гранулах) было близко к аморфному и характеризовалось только ближним порядком.

Наноструктурированное состояние материалов может быть реализовано в виде нанокристаллической структуры (с дальним порядком), в которой размер кристаллитов не превышает 10–15 нм; многослойных структур с толщинами чередующихся слоев из разных материалов не более 5–10 нм, когда поперек слоев реализуется ближний порядок в расположении атомов, а вдоль каждого слоя – дальний порядок; нанокомпозитов в форме смесей из кластеров или гранул разных веществ с размерами 5–10 нм (в кластерах или гранулах может существовать как ближний, так и дальний порядок); фрактальных структур.

С того момента, когда химики начали исследовать так называемые ультрадисперсные вещества (например, в виде коллоидных растворов) стало понятно, что наноструктурирование оказывает чрезвычайно сильное и необычное влияние на очень многие физические и химические свойства твердых тел. Именно поэтому наноструктурирование материалов сейчас рассматривается как эффективный (а иногда, и единственный) метод изменения (улучшения) свойств твердых тел. В металлах, например, такие изменения обнаруживаются при уменьшении средних размеров структурных элементов (кристаллитов, зерен, гранул, кластеров) уже до 100 нм, но наиболее они заметны при размерах кристаллитов менее 10 нм. Отметим, что при обычных металлургических способах получения материалов (в частности, при разливке в холодные сосуды-кристаллизаторы или при твердотельной рекристаллизации) средний размер зерен обычно колеблется от единиц микрометров до единиц миллиметров.

Одним из критических последствий наноструктурирования твердых тел является увеличение относительной доли атомов, принадлежащих внутренним поверхностям раздела между контактирующими зернами или кластерами (гранулами) в объеме материала. Часто именно это и играет решающую роль в изменении свойств материалов при их структурировании.

5.5. Изменение структуры однокомпонентных кристаллов при термических воздействиях

При наличии у чистых однокомпонентных веществ полиморфных превращений термическое воздействие (охлаждение или нагрев) будет вызывать модификацию структуры на атомном уровне в виде изменения типа кристаллической решетки. В неравновесных условиях (например, при закалке, деформации, высокой концентрации дефектов структуры вследствие нарушения условий роста и т. д.) термическое воздействие в форме нагрева будет вызывать переход чистых однокомпонентных веществ в более равновесное состояние. Этот переход сопровождается разнообразными изменениями в атомной, нано-, микро- и макроструктуре материала. При нагреве, например, закаленного из расплава или полученного иным методом аморфного (стеклообразного) твердого тела последнее будет изменять свою атомную структуру, переходя из неупорядоченного (без дальнего порядка) в упорядоченное (с дальним порядком и решетчатым строением) состояние. В наноструктурированных, нанокристаллических или сильнодеформированных веществах в результате нагрева и выдержки при определенных температурах будет изменяться характер зеренной структуры (средний размер, число, взаимная ориентация кристаллитов) и дефектной системы (концентрация и тип дефектов). В мелкозернистых поликристаллических слитках чистых веществ, полученных путем литья, под действием нагрева при переходе в более равновесное состояние будут изменяться размеры зерен, их число и взаимная ориентация, а также концентрация и тип дефектов кристаллической решетки.

Перечисленные выше возможные изменения атомно-кристаллической, зеренной и дефектной структуры чистых однокомпонентных веществ при термических воздействиях (нагреве и охлаждении) широко используются в технологии получения конструкционных и специальных материалов, а также изделий из них с целью придания последним вполне определенных функциональных свойств. Манипулируя, например, размером зерен поликристаллического материала, можно контролировать его прочностные свойства.

Рассмотрим ниже более подробно изменения атомно-кристаллической, зеренной и дефектной структуры материалов при разных видах термических воздействий.

Термическая обработка чистых веществ. Полученные разными способами материалы редко обладают полным комплексом свойств, необходимых для тех или иных применений. Поэтому материал или заготовку изделия следует обрабатывать для придания им необходимой формы, а также нужных функциональных свойств. С этой целью наряду с деформацией кристаллических материалов широко используют разные виды термических воздействий, в том числе так называемую, термическую обработку.

Термическая обработка представляет собой технологические процессы, состоящие из нагревания с определенной скоростью до определенной температуры, выдержки при заданной температуре в течение необходимого времени и последующего охлаждения с заданной скоростью для изменения структуры и свойств материалов или изделий.

Термической обработке подвергают выращенные монокристаллы (медь, кремний, германий и др.), слитки и отливки (стали, чугуны), полуфабрикаты изделий, сварные соединения, детали машин и механизмов, инструменты и т. д. Термическую обработку применяют как промежуточную операцию в цепи технологических процессов производства детали (изделия), а также как его завершающий этап. Термической обработке подвергают детали (заготовки), полученные литьем, ковкой и другими способами, чтобы снизить их твердость и улучшить обрабатываемость на металлорежущих станках и штамповочных прессах, а также уже готовые детали (изделия), для повышения их твердости, прочности, упругости и долговечности работы.

К основным видам термической обработки однокомпонентных веществ обычно относят закалку (п. 5.4), а также отжиг. Отжиг – это вид термической обработки, в результате которой чистые однокомпонентные вещества приобретают близкие к равновесным атомную, нано-, микро- и макроструктуры. Отжигу обычно подвергаются материалы, обладающие неравновесной структурой вследствие нарушения условий роста, а также пластически обработанные слитки металлов и изделия на их основе. Отжиг чаще всего вызывает разупрочнение материалов из-за снятия остаточных напряжений (уменьшения плотности дефектов кристаллической решетки) и повышение пластичности. Температура нагрева при отжиге зависит от типа металла и конкретной разновидности отжига. Скорость охлаждения с температуры отжига обычно невелика – в пределах 30–200 °С/ч.

Поскольку пластическая деформация является важной промежуточной стадией изготовления практически всех металлических изделий (например для придания им заданной формы), сначала рассмотрим отжиг металлов, подвергнутых пластической деформации. Процессы, происходящие при отжиге деформированного металла, в металловедении принято подразделять на две основные стадии – возврат и рекристаллизацию (рис. 5.21). Возврат называют все изменения в состоянии дефектной системы и свойств, которые не сопровождаются модификацией микро- и макроструктуры деформированного металла. Другими словами, размер и форма зерен на стадии возврата деформированного поликристаллического материала при отжиге не изменяются. Рекристаллизация – процесс зарождения и роста новых зерен, которые заменяют зерна исходного или деформированного поликристалла в процессе отжига. Возврат происходит при относительно низких температурах (для чистых металлов он обычно ниже $(0,1-0,2)T_{пл}$), а рекристаллизация – при более высоких (для технически чистых металлов – $0,4T_{пл}$).

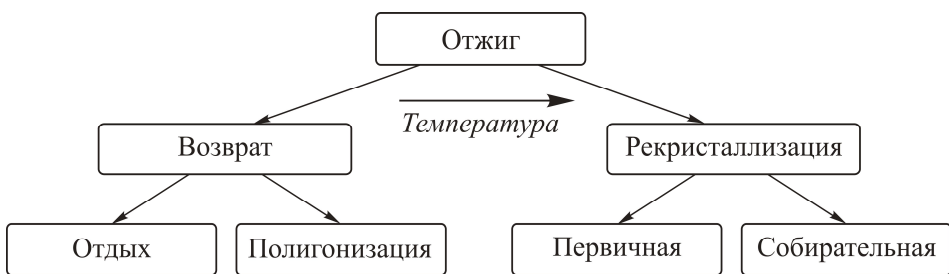


Рис. 5.21. Виды отжига пластически деформированных металлов. Горизонтальной стрелкой показано направление роста температуры при реализации различных стадий отжига

Согласно схеме стадий отжига, представленной на рис. 5.21, возврат обычно подразделяют на две стадии – отдых и полигонизацию. Отдых при нагреве деформированных металлов происходит всегда, а полигонизация развивается лишь при определенных условиях.

Стадия возврата при отжиге холоднодеформированного металла, при которой уменьшается количество собственных точечных дефектов, называется отдыхом. В процессе отдыха холоднодеформированного металла за счет уменьшения концентрации точечных дефектов (в основном вакансий и междоузельных атомов) уменьшается запасенная при деформации энергия. При этом очевидных изменений в микроструктуре материала не происходит. К примеру, возврат в чистом железе происходит уже при нагреве до 400 °С и связан с уменьшением концентрации вакансий и междоузельных атомов. Снижение плотности точечных дефектов на стадии отдыха может приводить к снижению прочности металлов на 20–30% по сравнению с исходным состоянием, а пластичность, наоборот, будет несколько увеличиваться.

Полиморфные превращения в кристаллах. Некоторые чистые элементы таблицы Менделеева в зависимости от температуры могут находиться в разных кристаллических формах, или модификациях. Такие элементы называются полиморфными.

Полиморфизм – это свойство некоторых чистых элементов таблицы Менделеева обладать более чем одним типом кристаллической решетки в твердом состоянии при изменении внешних условий. Поэтому нагрев или охлаждение обладающего полиморфизмом кристалла будет изменять тип его структуры. Если это изменение обратимо, то полиморфное превращение известно как аллотропия. Полиморфное превращение происходит в том случае, если при данной температуре может существовать металл с иной кристаллической решеткой и, соответственно, с меньшим уровнем свободной энергии. Среди элементов таблицы Менделеева полиморфизмом обладают углерод, железо, цирконий, титан, гафний, олово и др. В частности, кристаллический углерод может обладать структурой графита либо алмаза.

Наиболее известным примером аллотропного элемента является железо. Как видно из кривой охлаждения (рис. 5.22), расплавленное железо при прохождении через температуру кристаллизации 1539 °С при затвердевании приобретает структуру объемно-центрированного куба. Такую структуру принято называть δ -железом или высокотемпературным ферритом. При температуре 1390 °С δ -железо превращается в γ -железо со структурой гранецентрированного куба, которую принято называть аустенитом. Дальнейшее охлаждение γ -железа и переход через температуру 910 °С вновь превращает его решетку в ОЦК структуру – α -железо, или феррит.

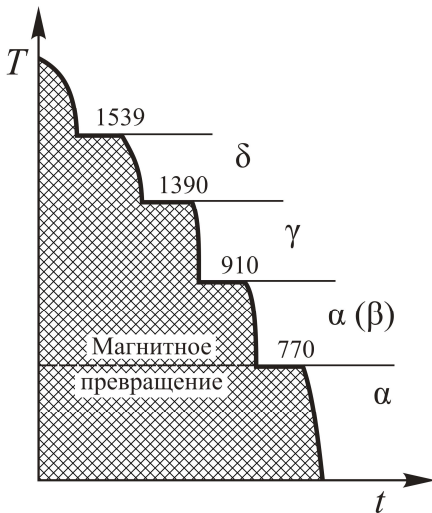


Рис. 5.22. Кривая охлаждения чистого железа. T , °С

Как видно из рис. 5.22, кривая охлаждения железа имеет еще одну ступеньку при температуре 770 °С, что указывает на существование еще одного фазового перехода 1-го рода, который связан с превращением немагнитного γ -железа в магнитное α -железо.

При полиморфном превращении одна кристаллическая решетка сменяет другую. Полиморфное превращение как любой структурный фазовый переход 1-го рода осуществляется путем образования зародышей новой фазы и последующего их роста. Поэтому полиморфное превращение можно назвать перекристаллизацией.

Образование зародышей при полиморфном превращении идет с соблюдением принципа структурного и размерного соответствия. Как и при обычной рекристаллизации, зародыши новой фазы возникают по границам зерен старой фазы или в зонах с повышенным уровнем запасенной свободной энергии (скоплений дислокаций). Рост зерен новой фазы происходит путем неупорядоченных, взаимно не связанных переходов отдельных атомов (группы атомов) через межфазную границу. Вновь образующиеся кристаллиты новой фазы закономерно ориентированы по отношению к кристаллам исходной модификации. В результате полиморфного превращения образуются новые зерна, имеющие другой размер и форму, что приводит к скачкообразному изменению свойств материала.

5.6. Фазовые равновесия и превращения в многокомпонентных кристаллических материалах при термических воздействиях

Чистые элементы (в том числе металлы) имеют достаточно ограниченное применение в технике и технологии. Среди кристаллических материалов наибольшее применение нашли сплавы, которые используются во многих конструкциях, машинах и механизмах, в приборостроении и для других целей. Широко применяются сплавы и в энергетических технологиях (в том числе в атомной энергетике), а также в энергосбережении (котлы, турбины, трубопроводы, ограждающие конструкции и т. д.). Это связано с тем, что очень часто лишь сплавы могут дать сочетание нужных функциональных характеристик, которые позволяют работать тем или иным изделиям в самых разных условиях. Особую роль играют сплавы, когда материал должен иметь взаимоисключающие функциональные характеристики, например одновременно высокую прочность и пластичность; низкую электропроводность, но высокую теплопроводность; высокую прочность при высоких температурах и в условиях воздействия агрессивной среды и т. д.

Часто создаваемые структуры в сплавах, обладающие важными полезными свойствами, являются термодинамически неравновесными и следует иметь четкие представления об условиях их фазовой стабильности. Поэтому рассмотрим основные виды сплавов и главные закономерности формирования их структуры, ее стабильности и изменения, в том числе при термических и иных воздействиях. Будут изучены общие черты и различия в поведении сплавов и образующих их чистых элементов при различных фазовых превращениях. В частности, значительное внимание уделено формированию структуры сплавов в процессе кристаллизации при различных условиях, ее зависимости от химического состава, условий охлаждения, взаимодействия компонентов и стабильности фаз. Подробно рассмотрены фазовые превращения в твердом состоянии, особенности их протекания в зависимости от режимов термических и иных обработок.

5.6.1. Виды кристаллических сплавов

Как известно, кристаллические вещества могут состоять как из атомов одного сорта, так и из нескольких видов атомов. В последнем случае существуют сложные композиции в виде сплавов, химических соединений, композитов, керамик и т. д. Поскольку в современной энергетике и энергосбережении чаще применяются не одноатомные вещества, а их сплавы или композиции (металлические, полупроводниковые, диэлектрические), их атомная, нано-, микро- и макроструктура может приобретать существенные отличия от тех, что реализуются в простых одноатомных материалах.

Рассмотрим признаки одного из основных типов композиций, называемых сплавами. Сплав – это вещество, полученное сплавлением нескольких химических элементов – компонентов сплава. Последние могут вступать во взаимодействие друг с другом, образуя химические соединения, твердые растворы или оставаться в виде чистых компонентов, создавая их механическую смесь.

Части сплава, которые имеют одинаковый химический состав, кристаллическое строение и свойства и отделены внутренними поверхностями раздела от других частей сплава с иными составом, структурой и свойствами, называют фазами. Микроструктура сплавов выявляется методами металлографического анализа с помощью оптического или электронного микроскопа, рентгеноструктурного, спектрального и микрорентгеноспектрального анализов, и других методов. Основными элементами микроструктуры металлов являются дислокации и их скопления, дефекты упаковки, зерна фаз (форма, размер, распределение) и их границы, субмикротрещины и поры, концентрационные неоднородности на границах и в объеме зерен (микро- и наносегрегации) и пр.

Сплавы, которые образуют монокристалл или состоят из зерен одной фазы (в случае поликристалла), называются однофазными. Чистый монокристаллический или поликристаллический металл или полупроводник являются однофазными материалами. Как будет показано ниже, однофазными могут быть и сплавы из нескольких элементов (компонентов) – так называемые твердые растворы и химические соединения.

Сплав, состоящий из двух или более фаз, называют многофазным или гетерогенным. Такими сплавами, например, являются многие стали, латуни, бронзы, дюрали и другие конструкционные сплавы. После нагрева, кристаллизации и медленного охлаждения высокоуглеродистая сталь состоит из двух фаз: почти чистого железа и соединения железа с углеродом – Fe_3C (цементит).

Термин «сплав» в настоящее время имеет более широкое значение, чем во время его появления. Если раньше конструкционные материалы, содержащие несколько элементов, получали преимущественно путем сплавления, то сейчас используются и другие технологические способы. К ним относятся метод порошковой металлургии (прессование твердых частиц и их последующее спекание при высоких температурах), а также диффузионный способ (проникновение одного вещества в другое твердое вещество при высоких температурах). Сплавы можно получать при ионно-лучевом, лазерном и плазменном распылении различных мишеней, в процессе кристаллизации из паров в вакууме, при химическом или электрохимическом осаждении и т. д. В сплавах элементы могут по-разному взаимодействовать между собой, образуя кристаллические фазы, различающиеся по химическому составу, типу межатомных связей, атомному строению и их нано-, микро-, макроструктуре.

В жидком состоянии большая часть металлических сплавов, применяемых в технике, представляет собой однородные жидкие растворы, структура которых около температуры кристаллизации имеет тенденцию к установлению ближнего порядка (правильному расположению атомов на определенном расстоянии). При переходе в твердое состояние во многих твердых растворах однородность сохраняется вследствие сохранения растворимости входящих в сплав химических элементов (компонентов). Поэтому твердая фаза, которая образуется в результате кристаллизации такого сплава, и называется твердым раствором.

В химических соединениях формируется новый тип кристаллической решетки, отличающийся от решеток химических элементов, его образующих. Химические соединения – это по существу те же твердые растворы, но с фиксированным составом и иной структурой. Поэтому сплавы – химические соединения под микроскопом выглядят как сплавы – твердые растворы и чистые металлы.

Химические соединения образуются как между металлами (интерметаллиды), так и между металлами и неметаллами. Они имеют следующие основные признаки: 1) постоянство состава, что отражено в стехиометрической формуле A_mB_n ; 2) иной тип кристаллической решетки, чем у компонентов. Например, одной из фаз сталей и чугунов является соединение Fe_3C – цементит. Для железа характерна кубическая решетка ОЦК или ГЦК, для углерода – гексагональная, а для цементита – сложная ромбическая кристаллическая решетка.

Кроме твердых растворов и химических соединений (промежуточных фаз) известны так называемые сплавы-смеси. Двухкомпонентные (бинарные) сплавы-смеси представляют собой механическую смесь из двух фаз. Если в сплаве А–В компоненты полностью нерастворимы друг в друге, то сплав состоит из смеси чистых компонентов А + В (фазы А и фазы В). Если компоненты ограниченно растворимы друг в друге и образуют α - и β -твердые растворы (на основе компонентов А и В соответственно), то сплав представляет собой смесь двух фаз $\alpha + \beta$.

Рассмотрим кратко основные виды сплавов с точки зрения их атомного строения, а также фазовой структуры.

Твердые растворы. Твердые растворы составляют основу большей части промышленных конструкционных сплавов и сплавов специального назначения, применяемых в энергомашиностроении, энергетике и для целей энергосбережения. Следует подчеркнуть, что твердые растворы – это кристаллы, наиболее близкие по свойствам к элементу-растворителю, так как сохраняют его кристаллическую решетку и тип межатомных связей. В зависимости от способа размещения атомов в кристаллической решетке элемента-растворителя различают следующие типы твердых растворов – замещения, внедрения и вычитания.

Двойные твердые растворы *замещения* типа А–В образуются в результате замены в кристаллической решетке части атомов компонента-растворителя (например, сорта А) на атомы другого (или других) компонента сорта В без изменения типа этой решетки. При неограниченной растворимости любое количество атомов химического элемента-растворителя типа А может быть заменено атомами типа В. Следовательно, если увеличивается концентрация атомов В, то все больше и больше атомов В будет находиться в узлах решетки вместо атомов А до тех пор, пока все атомы А не будут заменены атомами В и, таким образом, как бы плавно совершится переход от металла А к металлу В.

Для образования непрерывных (неограниченных) твердых растворов сплавляемые компоненты должны отвечать ряду условий:

1) элементы или их полиморфные модификации должны иметь кристаллическую решетку одного и того же типа (изоморфны друг другу);

2) атомные радиусы элементов должны различаться не более чем на 10–15%. Это условие называют размерным фактором или правилом Юм–Розери;

3) элементы должны принадлежать к одной и той же группе (подгруппе) или к смежным (родственным) группам периодической системы, что определяет их близкую электроотрицательность (сродство к электрону).

Выполнение сформулированных выше условий для образования непрерывных твердых растворов является необходимым, но не достаточным, о чем свидетельствуют данные об образовании твердых растворов в реальных сплавах. Поэтому кроме этих условий часто учитывают близость величин температур плавления компонентов, их упругих констант и т. д.

Примером сплавов с неограниченной растворимостью в твердом состоянии являются сплавы меди с золотом, серебром и никелем, сплавы германия с кремнием и др. В полиморфных металлах неограниченная растворимость встречается в пределах одной модификации пространственной решетки. Например, α -Fe дает неограниченный ряд твердых растворов с хромом (поскольку у обоих элементов ОЦК решетки), а γ -Fe – неограниченный ряд твердых растворов с никелем (ГЦК решетки).

Твердые растворы вычитания. Твердые растворы вычитания образуются в результате неполной (в отличие от твердых растворов замещения) замены в кристаллической решетке части атомов компонента-растворителя на атомы другого (или других) компонента без изменения типа этой решетки. В результате часть узлов кристаллической решетки элемента-растворителя остается незаполненной, т. е. образуются вакансии. Твердые растворы вычитания обычно формируются, когда в качестве компонента-растворителя используется химическое соединение. Примером такого сплава является твердый раствор железа с кислородом, в котором формируется

оксид железа типа FeO (вюстит), имеющий гранецентрированную пространственную решетку (рис. 5.23).

Как видно, все кислородные узлы такой решетки заполнены, тогда как часть металлических узлов свободна. Таким образом, оксид FeO имеет структуру с большим дефицитом металлических ионов, что определяет, к примеру, наличие у него полупроводниковых свойств.

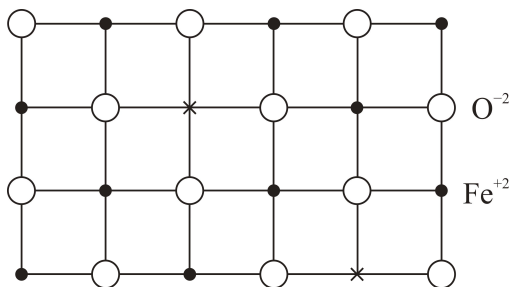


Рис. 5.23. Схема расположения атомов в твердом растворе вычитания на примере вюstitа FeO с дефицитом железа: вакансии показаны крестиками

Твердые растворы внедрения. Твердые растворы внедрения обычно возникают при сплавлении переходных и редкоземельных металлов (Fe, Mn, Co, Ti, Mo, W, V, Zr и др.) с большими ионными радиусами и неметаллов с малыми атомными радиусами (H, N, C, B). В этом случае атомы неметалла внедряются в междоузлия кристаллической решетки основного компонента – растворителя.

Твердые растворы внедрения всегда являются ограниченными. Главное условие, определяющее возможность растворения путем внедрения, – размерный фактор (R_B/R_A). В соответствии с моделью плотнейших шаровых упаковок размер R_B междоузельного атома B должен быть меньше, равным или лишь незначительно больше размера междоузлия (поры) в решетке атомов A, отвечая соотношению $R_B/R_A < 0,59$.

Твердые растворы внедрения встречаются преимущественно в том случае, когда растворитель имеет плотнейшие решетки типа ГПУ или ГЦК с октаэдрическими порами радиусом $0,41R$, где R – радиус атома растворителя. В ОЦК решетке растворимость путем внедрения мала, так как размер пор не превышает $0,29R$. Примеры твердых растворов внедрения, имеющих техническое значение, – твердые растворы углерода в α -Fe (феррит) и γ -Fe (аустенит): феррит с ГЦК решеткой растворяет до 2,14% (по массе) углерода, тогда как аустенит с ОЦК решеткой почти не растворяет углерод: его максимальная растворимость не превышает 0,02% (по массе).

Химические соединения и промежуточные фазы. Как изложено выше, кристаллическое вещество, образованное элементами из разных групп таблицы Менделеева и имеющее собственный тип кристаллической решетки,

отличающийся от решеток составляющих их элементов, называют химическим соединением. Любое химическое соединение характеризуется вполне определенным соотношением входящих в него атомов (компонентов) и записывается в виде стехиометрической формулы, которая для бинарных соединений имеет вид A_nB_m , где n и m обычно выражаются целыми числами. Выше отмечено, что химическое соединение может выступать в виде компонента сплава. В последнем случае, когда в нем растворяется один или оба входящих в него компонента, стехиометрия (правильное соотношение атомов) соединения нарушается и получаемый твердый раствор называется промежуточной фазой. Таким образом, промежуточная фаза обладает признаками как твердых растворов, так и химического соединения, поскольку эта фаза образована на основе химических соединений, в которых дополнительно растворены образующие их компоненты ($A_mB_n + A$ или $A_mB_n + B$).

Сплавы-смеси. Если сплавляемые компоненты (например, A и B) неразстворимы друг в друге либо не отвечают правилам Юм – Розери или условиям получения химических соединений и их промежуточных фаз, то они могут образовывать так называемые сплавы-смеси (типа $A + B$ в случае полной нерастворимости компонентов). Поскольку число элементов таблицы Менделеева образующих непрерывный ряд твердых растворов, невелико, сплавы-смеси являются самой многочисленной группой сплавов. Большинство технически важных сплавов, таких как стали, чугуны, латуни, бронзы и другие, относятся к данной группе. Например, по фазовому составу сплавы системы $Pb-Sb$ из абсолютно нерастворимых друг в друге компонентов относятся к сплавам типа $(A + B)$, а латуни (сплавы меди и цинка), содержащие более 39 ат.% Zn , – к сплавам типа $\alpha + \beta$ ($\alpha + \beta$), где α - и β -фазы являются ограниченными твердыми растворами цинка в меди и меди в цинке соответственно. Стали и чугуны относятся к сплавам-смесям типа $\alpha + A_mB_n$, где α – твердый раствор углерода в железе, а A_mB_n – химическое соединение Fe_3C (цементит).

5.6.2. Диаграммы состояния сплавов и их построение

Диаграммы фазового равновесия (диаграммы состояния, или фазовые диаграммы) сплава – это графическое изображение всех возможных его фазовых состояний в функции основных параметров состояния (температуры T , давления p и химического состава x). Каждое реально существующее состояние системы на диаграммах состояния изображается так называемой фигуративной точкой, положение которой определяется значениями координат (T, p, x) . Областям существования одной фазы отвечают участки трехмерного пространства (на трехмерных диаграммах состояния) или плоскости (на двумерных диаграммах состояния). Условия сосуществования фаз

определяются поверхностями или линиями раздела фаз. Изменение фазового состояния системы при изменении параметров состояния сплава рассматривается как движение фигуративной точки по диаграмме состояния.

Применительно к твердым материалам, для большинства которых давление близко к атмосферному, в качестве параметров состояния (координат фазовой диаграммы) рассматриваются только температура T и соотношения входящих в данную систему компонентов (состав) x . В этом случае на фазовых диаграммах двухкомпонентных (бинарных) систем на плоскости T - x фиксируются линии равновесия жидкой и твердой фаз (так называемые линии ликвидуса и солидуса), линии равновесия между разными твердыми фазами, а также особые точки, где могут сосуществовать три фазы. В результате, диаграмма состояния графически показывает области устойчивых состояний (концентрации компонентов и температуры), в которых при данных условиях имеются равновесные фазы.

Для сложных систем, состоящих из более чем двух компонентов и трех фаз, построение диаграмм состояния является единственным методом, позволяющим на практике установить, сколько и какие конкретно фазы образуют систему при данных значениях параметров состояния.

Анализ относительного расположения объемных участков, поверхностей, линий и точек, которые образуют диаграмму состояния, позволяет однозначно и наглядно определять условия фазового равновесия, появления в системе новых фаз и химических соединений, образования и распада жидких и твердых растворов и т. п. Диаграммы состояния используют в материаловедении, металлургии, химических технологиях (в частности, при разработке методов разделения веществ), производствах электронной техники и микроэлектроники и др. С их помощью определяют направление процессов, связанных с фазовыми превращениями, осуществляют выбор технологии обработки сплавов (например, режимов термических или механических воздействий на него), отыскивают оптимальные составы сплавов и пр. Зная диаграмму состояния, можно представить полную картину формирования структуры любого сплава, определить оптимальную температуру его получения и, как будет показано ниже, сделать заключение о его возможных свойствах.

Для построения диаграмм состояния расчетным путем необходимо знать зависимости термодинамических (химических) потенциалов всех компонентов системы от T , p и x . Приближенные методы расчета с применением методов компьютерного моделирования интенсивно развиваются, в частности, для многокомпонентных сплавов. Однако до сих пор диаграммы состояния строят на основе экспериментальных данных, которые позволяют определять зависимости температур плавления или кристаллизации от состава, а также изучения равновесий жидкость – пар и жидкость – жидкость. Широко используют рентгеновский фазовый анализ, данные о микрострук-

туре затвердевших расплавов, измерения физических свойств и построения диаграмм состав – свойство.

Экспериментальное построение диаграмм состояния базируется на методе термического анализа. Метод основан на том, что любое фазовое превращение не только чистого компонента, но и сплава сопровождается тепловым эффектом (выделением скрытой теплоты фазового превращения), а также изменением физических свойств (микротвердости, электросопротивления, удельных объемов, термоэдс, коэффициента расширения и др.). В этом случае особенности кривых охлаждения или нагрева в виде перегибов или плато используются для построения линий фазового равновесия, что позволяет проанализировать и классифицировать систему сплавов в широком интервале соотношений входящих в них компонентов. Например, для определения критических температур, при которых происходят кристаллизация или плавление сплавов разного состава, обычно фиксируется изменение температуры при нагреве или охлаждении набора сплавов разного состава в функции времени. В этом случае линии фазового равновесия жидкость – кристалл можно построить по перегибам или остановкам на кривых охлаждения.

Для того чтобы зафиксировать фазовые превращения в твердом состоянии (например, вследствие полиморфизма компонентов либо формирования химических соединений), обычно наблюдают за какой-либо физической величиной, значительно изменяющейся при фазовых превращениях (электрические, магнитные, механические или другие свойства). Это связано с тем, что такого рода фазовые превращения сопровождаются слишком малыми тепловыми эффектами в отличие от перехода жидкость – кристалл.

Как уже отмечалось выше, диаграммы состояний бинарных сплавов типа А–В изображаются на плоскости в системе координат температура – состав. По оси ординат откладывают температуру, по оси абсцисс – химический состав, например концентрацию x_B компонента В в А. Тогда любая фигуративная точка (T, x_B) на диаграмме состояний указывает температуру и состав сплава, вертикальная линия $x_B = \text{const}$ показывает изменение температуры сплава при определенном составе, а горизонтальная линия $T = \text{const}$ дает изменение состава при заданной температуре.

Рассмотрим подробно построение двойной диаграммы состояния сплавов с неограниченной растворимостью компонентов в жидком и твердом состояниях (рис. 5.24). Постоянные температуры кристаллизации (плавления) компонентов А и В, фиксируемые по положению плато на кривых охлаждения либо нагрева, определяют положение крайних точек A' и B' на диаграмме состояния (рис. 5.24, а). Как видно из рис. 5.24, б, кривые охлаждения сплавов (в отличие от таковых для чистых компонентов, рис. 5.24, в) не имеют плато при плавлении или кристаллизации. Это означает, что кристаллизация (плавление) сплава идет в интервале температур $T_1 - T_2$. Соответст-

вующие критические точки – точки излома c' и d' – на кривой охлаждения сплава состава x (рис. 5.24, б), возникающие вследствие проявления тепловых эффектов фазовых превращений, как раз и определяют интервал температур, в котором происходит кристаллизация сплава данного состава. Это дает возможность нанести точки c и d на диаграмме состояния (рис. 5.24, а), показывающие начало и конец кристаллизации сплава состава x . Построив совокупность критических точек начала и конца кристаллизации для сплавов разных составов, можно получить линии диаграммы состояния двойной системы, образующей непрерывный ряд жидких и твердых растворов между компонентами А и В (рис. 5.24, а).

Проанализируем подробнее представленную на рис. 5.24, а диаграмму состояния. На этой диаграмме геометрическое место всех точек, которые определяют температуру начала кристаллизации сплавов (кривая $A'mcB'$), называется линией ликвидуса. Однофазная область выше линии ликвидуса на диаграмме равновесия соответствует растворам А–В в жидком состоянии (обозначены буквой Ж). Геометрическое место всех точек, определяющих температуру конца кристаллизации сплавов (кривая $A'dnB'$), – линия солидуса. Область ниже линии солидуса на диаграмме состояния соответствует растворам А–В, находящимся в твердом состоянии (обозначены как ТВ). Как видно, область между линиями ликвидуса и солидуса соответствует двухфазной смеси из областей, занятых жидкими и твердыми растворами разного состава (Ж + ТВ).

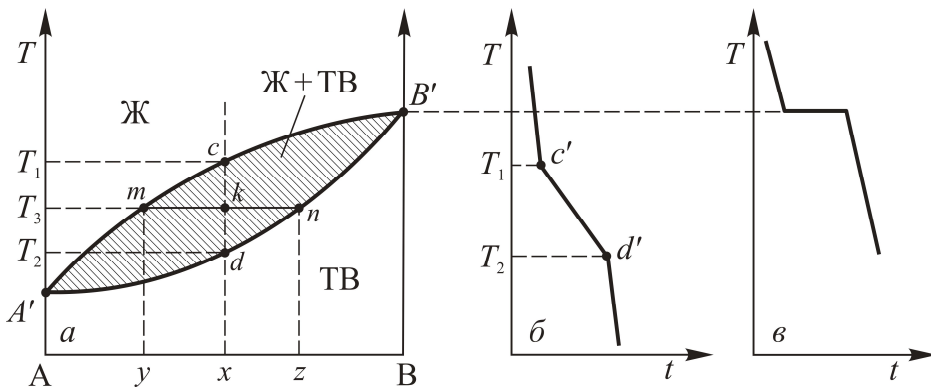


Рис. 5.24. Построение двойной диаграммы равновесия для сплавов с неограниченной растворимостью компонентов в жидком и твердом состояниях: а – диаграмма состояния, б – кривая охлаждения сплава, в – кривая охлаждения компонента В

Любая двойная диаграмма состояния представляет собой графическое изображение фазового состава сплавов данной системы в виде зависимости критических температур фазовых превращений от химического состава сплавов, откладываемого по горизонтальной оси. При этом левая крайняя точка

на оси абсцисс (рис. 5.24, *a*) соответствует 100%-му содержанию компонента А, а правая крайняя точка – 100%-му содержанию компонента В. Твердые растворы, обогащенные компонентом А, принято называть α -твердыми растворами, а обогащенные компонентой В – β -твердыми растворами.

Составы сплавов чаще всего выражают в атомных или весовых (массовых) процентах. Пересчет атомных процентов в массовые и наоборот можно осуществлять по формулам

$$a = \frac{100M_A\alpha}{M_A\alpha + M_B\beta}, \quad \alpha = \frac{100a}{a + b \frac{M_A}{M_B}},$$

где M_A и M_B – атомные массы компонентов А и В; α и a – атомные и массовые концентрации компонента А, ат.% и вес. %; β и b – атомные и массовые концентрации компонента В, ат.% и вес.%.

Условия равновесия фаз в двухкомпонентных системах. Как отмечено выше, любые точки на диаграммах состояния, которые показывают состав и температуру сплава, называют фигуративными. Фигуративная точка, соответствующая составу одной из равновесных фаз при какой-либо постоянной температуре, – нодой. Например нода m на рис. 5.24, *a* отвечает температуре T_3 и составу y , а нода n – той же температуре T_3 и составу z .

Отрезок mn прямой, соединяющий на диаграмме состояния две ноды для одной и той же температуры, называется конодой. Таким образом, конода – это геометрическое место фигуративных точек двухфазных состояний с постоянным химическим составом каждой из фаз (в случае коноды mn речь идет о жидкой и твердой фазах). Действительно, если проанализировать химический состав жидкой фазы и твердого раствора сплавов всех составов от y до z вдоль коноды mn при температуре T_3 , то в жидкой фазе состав всегда будет соответствовать точке m , а в твердом растворе – точке n (рис. 5.24, *a*). Отсюда вытекает так называемое правило концентраций, с помощью которого можно определять химический состав фаз в двухфазных областях диаграммы состояния любой системы сплавов.

Понятие коноды позволяет также сформулировать правило отрезков (его также называют правилом рычага), которое дает возможность определять относительное содержание двух фаз в сплаве. Действительно, фигуративная точка k , лежащая при температуре T_3 между линиями ликвидуса и солидуса сплава состава x , делит коноду mn на два отрезка, которые пропорциональны количеству двух фаз этого сплава при температуре T_3 . Докажем это утверждение.

Обозначим через p относительное количество жидкой фазы в сплаве состава y при температуре T_3 , а через g – относительное количество α -твердого раствора в сплаве состава z при той же температуре. Поскольку

$$p + g = 1, \quad (5.6.1)$$

среднюю концентрацию компонента В в сплаве можно определить соотношением

$$x = yp + zg, \quad (5.6.2)$$

где y и z – концентрации компонента В в жидкой и твердой фазах соответственно.

Из уравнений (5.6.1) и (5.6.2) легко найти два неизвестных параметра:

$$p = \frac{x - y}{z - y} = \frac{mk}{mn}, \quad g = \frac{z - x}{z - y} = \frac{kn}{mn}.$$

Отсюда и получим искомое соотношение для относительного содержания двух фаз в сплаве, соответствующем фигуративной точке k :

$$\frac{p}{g} = \frac{mk}{kn}. \quad (5.6.3)$$

Это и есть математическое выражение правила рычага: относительные количества равновесных фаз сплава заданного состава при заданной температуре пропорциональны отрезкам коноды для этого сплава. Поскольку для интервала кристаллизации каждого сплава можно построить множество конод, соответствующих разным температурам, это правило является универсальным.

Применение правила фаз Гиббса для анализа сплавов. Как любая термодинамическая система, каждая система сплавов в равновесии подчиняется выраженному в п. 5.1 и в п. 1.11 Т. 1, правилу фаз Гиббса в формулировках (5.1.1)

$$f = n - r + 2$$

или (при $p = \text{const}$)

$$f = n - r + 1, \quad (5.6.4)$$

которые связывают между собой число компонентов n , число фаз r и число степеней свободы f в изолированной равновесной системе (сплаве).

Поэтому экспериментально построенные диаграммы состояния обязательно проверяют на соответствие правилу фаз Гиббса, дающему возможность теоретически обосновать направление протекания процессов превращения для установления равновесного состояния системы. Правило фаз позволяет предсказать и проверить процессы, происходящие в сплавах при нагреве и охлаждении: например, показывает, происходит ли процесс кристал-

лизации при постоянной температуре или в интервале температур, и указывает, какое число фаз может одновременно существовать в системе.

Проанализируем с помощью правила фаз (5.6.4) кривые охлаждения и диаграмму состояния (рис. 5.24) для системы твердых растворов. Чистые компоненты А и В при затвердевании находятся в двухфазном состоянии (Ж + ТВ) при постоянной температуре (плато на кривых охлаждения), и не имеют степеней свободы для изменения температуры, поскольку в соответствии с расчетом по формуле (5.6.4) имеем $f = 1 - 2 + 1 = 0$.

Сплавы x , y и z в интервале кристаллизации находятся в двухфазном состоянии (Ж + ТВ) и $f = 2 - 2 + 1 = 1$, т. е. в пределах интервала кристаллизации возможно изменение температуры без нарушения числа и наименования сосуществующих фаз. Однако концентрация компонентов в этих фазах при охлаждении (изменении температуры) не остается постоянной, а изменяется в соответствии с правилом концентраций.

Из правила фаз, в частности, следует, что в двойной системе при постоянном давлении не может одновременно сосуществовать более трех фаз. Последнее возможно при $f = 0$, т. е. при $r = 2 + 1$, другими словами, только при определенных составе сплава и температуре, например в сплаве эвтектического состава для двойных механических смесей (см. ниже). Если при анализе двойной системы получаем больше трех фаз, то это значит, что сплав не находится в равновесном состоянии или в изучаемой системе сплавов неправильно определено число фаз или компонентов.

5.6.3. Диаграммы состояния двухкомпонентных сплавов

Диаграмма состояния сплавов с неограниченной растворимостью компонентов в твердом состоянии (твердые растворы с неограниченной растворимостью). Резюмируем результаты анализа диаграммы состояния для системы твердых растворов с неограниченной растворимостью компонентов (рис. 5.24):

1. Количество компонентов в сплавах $n = 2$ – компоненты А и В.
2. Число фаз $r = 2$ – жидкая фаза (Ж) и кристаллы твердого раствора (ТВ).
3. Основные линии фазовых равновесий на этой диаграмме: $A'mcB'$ – линия ликвидуса, выше которой сплавы находятся в жидком состоянии (Ж); $A'dnB'$ – линия солидуса, ниже которой сплавы находятся в твердом состоянии (ТВ).
4. Чистые компоненты А и В кристаллизуются при постоянной температуре (см. кривую охлаждения компонента В на рис. 5.24, в).
5. Все сплавы кристаллизуются аналогично сплаву состава x , кривая охлаждения которого представлена на рис. 5.24, б. Процесс кристаллизации

сплава состава x происходит следующим образом. До точки c сплав охлаждается в жидком состоянии. На участке $c-d$ процесс кристаллизации протекает при понижающейся температуре, так как, согласно правилу фаз Гиббса, в двухкомпонентной системе при наличии двух фаз (жидкой и кристаллов α -твердого раствора) число степеней свободы будет равно единице ($f = 2 - 2 + 1 = 1$). При температуре, соответствующей точке c , начинают образовываться центры кристаллизации α -твердого раствора на основе компонента А и на кривой охлаждения отмечается перегиб (критическая точка), связанный с уменьшением скорости охлаждения вследствие выделения скрытой теплоты кристаллизации. В точке k сплав представляет собой двухфазную смесь кристаллов α -фазы в жидком расплаве. При достижении температуры, соответствующей точке d , сплав затвердевает при постоянной температуре. После затвердевания всего жидкого расплава с дальнейшим понижением температуры охлаждается сплав в твердом состоянии. Он представляет собой однородные кристаллиты (зерна) α -твердого раствора с микроструктурой, аналогичной микроструктуре чистого компонента.

6. Количественный структурно-фазовый анализ сплава. Пользуясь диаграммой состояния, можно для любого сплава при любой температуре найти не только число фаз, но и химический состав каждой из них и количественное соотношение объемов, занимаемых фазами. Для этого воспользуемся правилом отрезков. Для определения состава фаз, соответствующих фигуративной точке k , через эту точку проведем горизонтальную линию (коноду) до пересечения с ближайшими линиями фазовых равновесий диаграммы – линиями ликвидуса и солидуса. Состав жидкой фазы определим как проекцию точки m , лежащей на пересечении коноды с линией ликвидуса, на ось концентрации – она соответствует точке x . Состав твердой фазы определяется точкой y , – проекцией точки n , являющейся пересечением коноды с линией солидуса, на ось концентраций.

Из рис. 5.24 следует, что состав жидкой фазы изменяется при движении вдоль линии ликвидуса, а состав твердой фазы – по линии солидуса. С понижением температуры состав фаз изменяется в сторону уменьшения содержания компонента В.

Найдем массовое (весовое) соотношение жидкой и твердой фаз при заданной температуре (например, в точке k). В соответствии с правилом рычага масса фаз в точке k обратно пропорциональна отрезкам, на которые эта точка делит проведенную коноду mn . Исходим из того, что количество всего сплава ($p + g$), как следует из формулы (5.6.1), соответствует длине всей коноды mn . Тогда, согласно соотношению (5.6.3), отрезок mk , прилегающий к линии ликвидуса, определяет количество g твердой фазы, а отрезок, прилегающий к линии солидуса (или к оси компонента) kn , – количество жидкой фазы p .

Диаграмма состояния сплавов в отсутствие растворимости компонентов в твердом состоянии (механическая смесь эвтектического типа). Рассмотрим систему сплавов, когда оба компонента в жидком состоянии неограниченно растворимы, а в твердом состоянии вообще нерастворимы друг в друге и не образуют химических соединений. Диаграмма состояния и кривые охлаждения такой системы сплавов представлены на рис. 5.25. В этом случае на диаграмме состояний (рис. 5.25, а), компонентами являются химические элементы А и В, а фазами – жидкость (Ж) и кристаллы элементов А и В (ТВ). При охлаждении сплавов ниже линии $A'C$ начинают выделяться кристаллы чистого компонента А, а ниже линии CB' – кристаллы компонента В. При кристаллизации сплава, состав которого определяется точкой C , происходит выделение кристаллов типа А и В одновременно. Механическая смесь двух видов кристаллов, одновременно кристаллизующихся из жидкости, называется *эвтектикой*, а превращение и температура кристаллизации в точке C – *эвтектическими*.

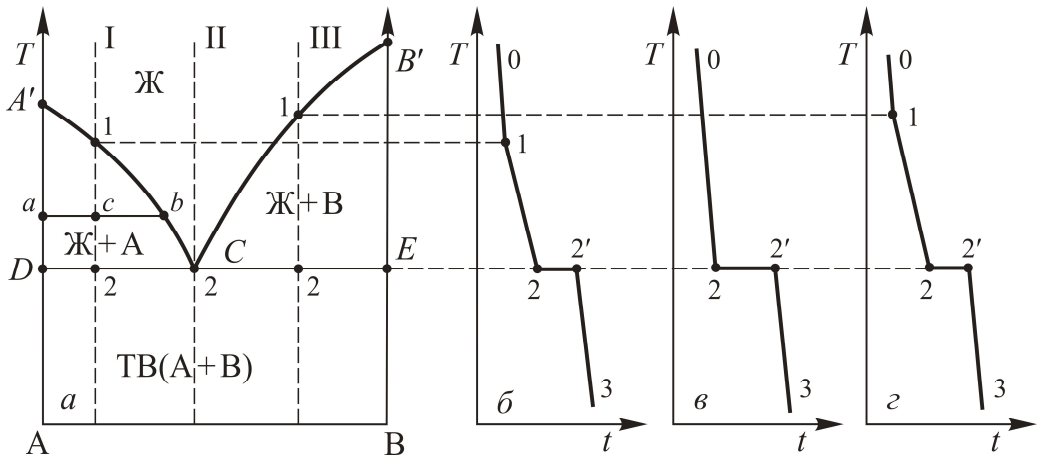


Рис. 5.25. Диаграмма состояний (а) двойной системы эвтектического типа, в которой при кристаллизации образуется механическая смесь из чистых компонентов. Кривые охлаждения приведены для сплавов типа I (б), II (в) и III (г)

Проведем более детальный анализ данной диаграммы состояния.

1. Количество компонентов $n = 2$ – компоненты А и В.
2. Число фаз $r = 3$ (кристаллы компонента А, кристаллы компонента В, жидкая фаза Ж).
3. Основные линии диаграммы: линия ликвидуса $A'CB'$, состоит из двух ветвей, сходящихся в точку C ; линия солидуса ECD параллельна оси концентраций и стремится к осям компонентов.
4. Чистые компоненты А и В кристаллизуются при постоянной температуре (точки A' и B').

5. Эвтектический сплав, соответствующий концентрации компонентов в точке *C* (сплав II), как видно из рис. 5.25, *в*, имеет кривую охлаждения, аналогичную кривым охлаждения чистых компонентов, т. е. плато, как на рис. 5.24, *в*.

Микроструктура эвтектики представляет собой кристаллиты с мелкодисперсной (обычно пластинчатого типа) механической смесью чистых компонентов А и В, кристаллизующихся одновременно при постоянной и самой низкой для рассматриваемой системы температуре.

Процесс кристаллизации сплавов эвтектического состава протекает следующим образом (рис. 5.25, *в*). На кривой охлаждения эвтектического сплава II участок 0–2 характеризует охлаждение жидкого сплава, 2–2' – кристаллизацию эвтектики, 2'–3 – охлаждение закристаллизованного сплава эвтектического состава. Процесс кристаллизации эвтектики действительно идет при постоянной температуре, так как, согласно правилу фаз, в двухкомпонентной системе при наличии трех фаз (жидкой и кристаллов компонентов А и В) число степеней свободы будет равно нулю ($f = 2 - 3 + 1 = 0$). Процесс кристаллизации завершается в точке 2'.

6. Процесс кристаллизации *доэвтектического* сплава I протекает следующим образом (рис. 5.25, *б*). На кривой охлаждения сплава I участок 0–1 – охлаждение жидкого сплава. При температуре, соответствующей точке 1, начинают образовываться центры кристаллизации избыточного компонента А. На кривой охлаждения отмечается излом (критическая точка), связанный с уменьшением скорости охлаждения вследствие выделения скрытой теплоты кристаллизации. На участке 1–2 при понижающейся температуре протекает процесс кристаллизации, так как, согласно правилу фаз, в двухкомпонентной системе при наличии двух фаз (жидкой и кристаллов компонента А) число степеней свободы будет равно единице ($f = 2 - 2 + 1 = 1$). При охлаждении состав жидкой фазы изменяется по линии ликвидуса до эвтектического, на участке 2–2' кристаллизуется в виде зерен, состоящих из пластинчатой эвтектики (А + В) аналогично кристаллизации эвтектического сплава II. Ниже точки 2' охлаждается сплав, состоящий из кристаллов первоначально закристаллизовавшегося избыточного компонента А и эвтектики (А + В).

7. Процесс кристаллизации *заэвтектического* сплава III протекает следующим образом. Кривая охлаждения сплава III (рис. 5.25, *г*) состоит из трех участков: 0–1 – охлаждение жидкого сплава, 1–2 – выделение кристаллов компонента В, 2–2' – кристаллизация эвтектики и 2'–3 – охлаждение закристаллизованного сплава (А + В). Как видно, кристаллизации этого типа сплавов присущи все особенности сплава I, описанные выше в п. 6.

8. Для количественного структурно-фазового анализа сплава I проводим коноду *acb* через заданную точку *c*. Конода пересекает линию ликвидуса и ось компонента А, поэтому состав твердой фазы для сплава I составляет 100% компонента А, а для жидкой фазы состав соответствует точке *b*.

Использование правила рычага для сплава I показывает, что доля жидкой фазы в нем при некоторой температуре T_a определяется отношением ac/ab , а твердой – cb/ab , где ab – длина коноды.

Аналогичным образом анализируется сплав типа III. Для эвтектического сплава II ниже температуры точки C любая конода опирается на оси чистых компонентов и этот сплав всегда состоит из смеси компонентов (A + B).

Диаграмма состояния сплавов с зависящим от температуры пределом растворимости компонентов в твердом состоянии. Рассмотрим случай эвтектических сплавов, когда оба компонента ограниченно растворимы в твердом состоянии, но предел растворимости хотя бы одного из компонентов в другом зависит от температуры. Пример такой системы, когда предел растворимости компонента B в компоненте A меняется (уменьшается) при охлаждении сплава, представлен на рис. 5.26.

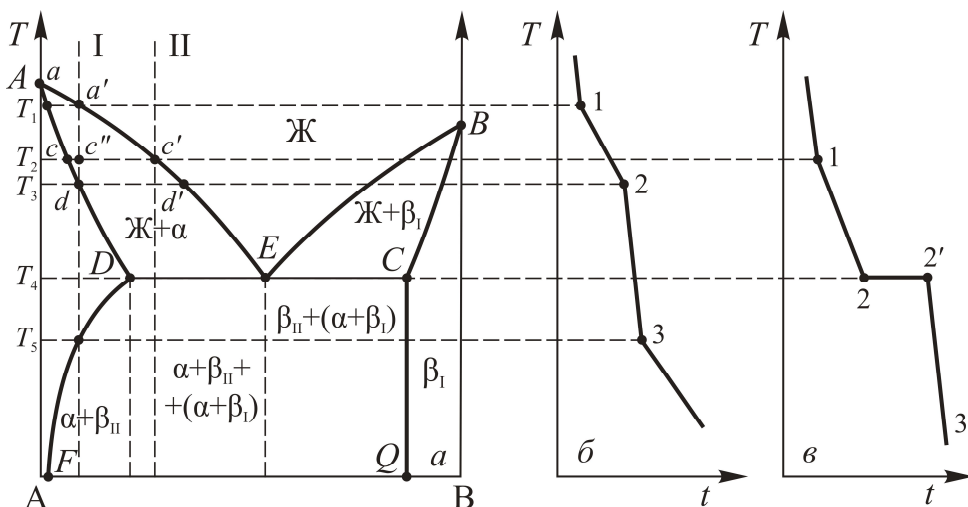


Рис. 5.26. Диаграмма состояния (а) и кривые охлаждения сплава I (б) и сплава II (е) системы эвтектического типа, когда растворимость одного из компонентов в другой зависит от температуры

Проанализируем эту систему.

1. Количество компонентов $n = 2$ – компоненты A и B.
2. Число фаз $r = 3$ – жидкая фаза Ж и кристаллиты α -твердых растворов (раствор компонента B в компоненте A) и β -твердых растворов (раствор компонента A в компоненте B).

3. Основные линии диаграммы: линия ликвидуса $Aa'a'd'EB$, состоящая из двух ветвей, которые сходятся в точке E; линия солидуса $AcdDECB$ из трех участков; DF – линия предельной растворимости компонента B в компоненте A (зависит от температуры); CQ – линия предельной растворимости компонента A в компоненте B (не зависит от температуры).

4. Чистые компоненты А и В кристаллизуются при постоянной температуре.

5. Области существования α - и β -растворов прилегают к осям температур для компонентов А и В. Максимальные растворимости компонента В в А и А в В определяются линиями растворимости DF и CQ соответственно. При этом линия DF не параллельна оси температур (растворимость зависит от температуры).

Кривая охлаждения сплава I представлена на рис. 5.26, б. Выше точки 1 (при $T > T_1$) сплав находится в жидком состоянии, а в точке 1 начинается процесс кристаллизации и происходит выделение кристаллов α -твердого раствора, причем в α -фазе и жидкости концентрация компонента В изменяется по кривым acd и $a'c'd'$ соответственно. В точке 2 кривой охлаждения кристаллизация заканчивается, и полученные кристаллы твердого раствора имеют при равновесной кристаллизации состав исходной жидкости. Эти кристаллы не претерпевают изменений при охлаждении вплоть до точки 3. Ниже этой точки α -твердый раствор становится пересыщенным и из него выделяются кристаллы β -твердого раствора, в которых концентрация компонента В определяется точкой Q . Состав α -твердого раствора изменяется по кривой DF вследствие выделения кристаллов β -твердого раствора. Кристаллы β -твердого раствора, выделившиеся из жидкой фазы Ж, называются первичными и обозначаются символом β_I , а кристаллы, выделившиеся из твердого раствора – вторичными и обозначаются β_{II} .

6. Сплавы, которые соответствуют составам, лежащим между линиями растворимости DF и CQ (находятся за пределами растворимости), являются двухфазными, поскольку состоят из смесей α - и β -твердых растворов. Кривая охлаждения сплава II для этой области приведена на рис. 5.26, в. При достижении горизонтальной линии DEC (линии эвтектики) наступает неинвариантное превращение ($f = 2 - 3 + 1 = 0$). В этом случае в равновесии находятся три фазы – жидкость Ж, кристаллы α -твердого раствора, состав которого определяется точкой D , и кристаллы β -твердого раствора состава, соответствующего точке C . При охлаждении температуры ниже T_4 (ниже горизонтальной линии DEC) происходит эвтектическое превращение типа $\alpha_E \rightarrow \alpha_D + \beta_C$, когда из жидкости одновременно выделяются кристаллы обоих твердых растворов. Здесь α_E и α_D – α -твердые растворы, состав которых соответствует точкам E и D соответственно, а β_C – твердый раствор компонента А в компоненте В состава точки C . Таким образом, при кристаллизации сплава II кроме первичных кристаллов α -твердого раствора (выделились при охлаждении от точки 1 до точки 2) образуется еще эвтектика типа $\alpha_D + \beta_C$. Дальнейшее охлаждение сопровождается распадом α -твердого раствора с выделением вторичных кристаллов β_{II} при температуре T_5 – рис. 5.26, а (в точке 3 диаграммы охлаждения на рис. 5.26, б) вследствие пересыщения α -твердого раствора компонентом В.

Диаграмма состояния сплавов, компоненты которых образуют химическое соединение. Диаграмма состояния бинарных систем, компоненты которых образуют химические соединения, имеет сложный вид и включает в себя несколько простых диаграмм. Число компонентов и количество диаграмм зависят от того, сколько и каких химических соединений образуют основные компоненты системы. На рис. 5.27 представлена диаграмма двойной системы с образованием одного нерастворимого химического соединения типа A_mB_n , компоненты которого не растворяются в этом соединении, образуя эвтектики.

Поскольку химическое соединение характеризуется определенным соотношением компонентов (m/n), это отражается на диаграмме состояния вертикальной линией, пересекающей ось составов в точке, отвечающей этому соотношению компонентов. Химическое соединение устойчиво, если его можно нагреть без разложения до расплавления, и неустойчиво, если при нагреве оно распадается.

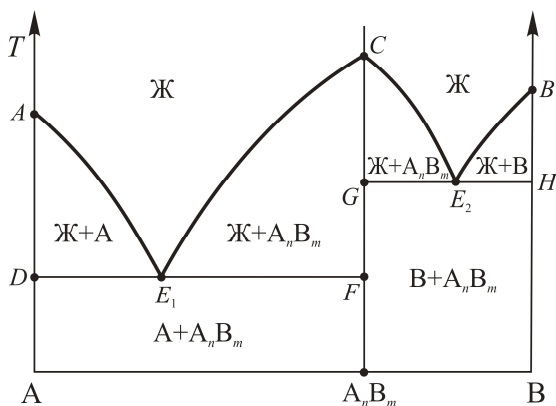


Рис. 5.27. Диаграмма состояния с устойчивым химическим соединением

Проанализируем эту систему.

1. Количество компонентов $n = 3$ – компоненты А, В и A_nB_m .
2. Чистые компоненты и химическое соединение кристаллизуются при постоянной температуре.

3. Число фаз и вид простых диаграмм определяются характером взаимодействия между компонентами. В изображенном на рис. 5.27 случае представлены две диаграммы эвтектического типа, в каждой соединении A_nB_m выступает в качестве одного из компонентов. Таким образом, компонентами данной системы являются элементы А и В, а твердыми фазами – А, В и A_nB_m . Из четырех возможных в этой системе фаз в равновесии число фаз $r = 3$ – либо Ж, А, A_nB_m , либо Ж, В, A_nB_m . Плавление химического соединения A_nB_m происходит при постоянной температуре.

4. Основные линии диаграммы: линии ликвидуса AE_1C и CE_2B для левой и правой простых диаграмм соответственно, каждая состоит из двух

ветвей, сходящихся в эвтектические точки E_1 и E_2 ; линии солидуса DF и GH для левой и правой простых диаграмм.

5. На данной диаграмме состояний имеются две эвтектические точки - E_1 и E_2 . Эвтектика E_1 состоит из кристаллитов компонентов A и A_nB_m , а эвтектика E_2 - из кристаллитов B и A_nB_m . При пересечении линий E_1C и CE_2 в процессе охлаждения расплава выделяются первичные кристаллы химического соединения.

6. Процессы кристаллизации сплавов для этой диаграммы состояния протекают аналогично кристаллизации сплавов, образующих при кристаллизации механическую смесь из кристаллов чистых компонентов, поэтому кривые охлаждения сплавов этой системы подобны изображенным на рис. 5.25. Отличие состоит только в том, что кроме выделения кристаллитов чистых компонентов A и B происходит образование кристаллитов соединения A_nB_m .

Физико-химические свойства сплавов в значительной степени определяются их фазовым составом, т. е. зависят от того, какие химические соединения или какие фазы образовали компоненты данного сплава. С другой стороны, фазовый состав сплавов отражается на их равновесных диаграммах состояния. Следовательно, между свойствами и типом равновесной диаграммы состояния любой системы сплавов должна существовать определенная взаимосвязь. Впервые на связь между видом диаграммы состояния и свойствами сплавов указал Н. С. Курнаков. Для выявления этой взаимосвязи между фазовым составом системы сплавов и их физико-химическими свойствами обычно строят так называемые диаграммы состав - свойство, которые получили название диаграмм Курнакова.

Структурные превращения в сплавах при термических воздействиях. Как отмечалось ранее, любой исходный кристаллический материал, полученный литьем или другими способами, должен быть превращен в изделие, обладающее определенной формой и заданными функциональными свойствами. С этой целью любой кристаллический сплав после изготовления и превращения его в изделие, подвергается разным видам воздействий - механических, термических, термомеханических, термохимических и других, что может приводить к фазовым превращениям в них. К основным видам термической обработки сплавов, как и для чистых металлов, относятся закалка и разные виды отжига.

Сплавы, используемые в различных силовых конструкциях, а также в энергетическом машиностроении, обычно закалывают с целью упрочнения. Сильно упрочняются при закалке сплавы, претерпевающие в равновесных условиях превращения в твердом состоянии (например, эвтектоидные превращения в сплавах железо - углерод (сталях)). При этом прочность возрастает либо вследствие измельчения зерен, образующих эвтектоидную смесь, за счет мартенситного фазового перехода, либо вследствие понижения

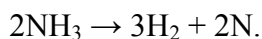
температуры эвтектоидной реакции. Сплавы для специальных применений (электротехнические, магнитные, жаростойкие и др.) закаливают, что позволяет изменять такие структурно-чувствительные физико-химические свойства, как удельное электрическое сопротивление, коэрцитивную силу, намагниченность насыщения, коррозионную стойкость и др.

Более детально перечисленные виды термических обработок и механизмы вызванных ими изменений физико-химических свойств рассмотрены в [2].

Химико-термическая обработка металлов и сплавов. Химико-термической обработкой (ХТО) называют технологические процессы, приводящие к диффузионному насыщению поверхностного слоя материала готового изделия (например, детали) различными химическими элементами с целью придания поверхности иных свойств. Применяют ХТО для повышения твердости, износостойкости, сопротивления усталости и контактной выносливости, а также для защиты от разных видов коррозии.

Различают три стадии процесса химико-термической обработки.

На *первой стадии* у поверхности обрабатываемого изделия образуются активные элементы, которые должны продиффундировать в его поверхностный слой. Эти атомы насыщающего элемента возникают за счет диссоциации (химических реакций) насыщающей среды (твердой, жидкой, газообразной). Примером служит, например, диссоциация аммиака:



На *второй стадии* процесса активные элементы адсорбируются рабочей поверхностью изделия с образованием химических связей между ионами насыщающего элемента и основного металла (хемосорбция). В результате возникает градиент концентрации этих элементов.

Третья стадия – диффузия адсорбированных активных элементов в глубь насыщаемого изделия и образование диффузионного слоя из твердых растворов, химических соединений и иных фаз.

Первая и вторая стадии процесса ХТО протекают значительно быстрее третьей – диффузионной стадии, при которой и формируется структура и свойства диффузионной зоны. Поэтому именно третья стадия определяет скорость процесса ХТО.

Существует множество способов ХТО, однако наибольшее распространение в промышленности получили процессы диффузионного насыщения из активных жидких или газовых сред. Более рациональной исходной средой является активированная газовая среда, т. е. среда, лишенная нейтральных (химически неактивных) примесей, когда активный диффундирующий элемент образуется в результате диссоциации или восстановительных реакций. В ряде случаев исходную газовую среду активизируют ионизацией в тлеющем разряде.

Обычно ХТО применяется для повышения твердости, износостойкости, кавитационной и коррозионной стойкости изделий, увеличивая их надежность и долговечность. Толщина образовавшегося после ХТО диффузионного слоя зависит от растворимости насыщающего элемента в материале, температуры нагрева T и времени выдержки при этой температуре, а также от концентрации атомов насыщающего элемента на поверхности. Под общей толщиной диффузионного слоя понимают кратчайшее расстояние от поверхности насыщения до слоя со структурой сердцевины изделия. Эффективная толщина слоя – это расстояние от поверхности до участка слоя с заданными параметрами (концентрацией, твердостью или другими характеристиками).

Фазовые и структурные изменения, происходящие на диффузионной стадии процесса ХТО, можно предсказать исходя из двойных диаграмм состояния, если в диффузионном взаимодействии участвуют всего два элемента. При этом предполагается, что диффузионный процесс не интенсифицируется и образующаяся диффузионная зона находится в равновесном состоянии. Структура диффузионного слоя образуется в той же последовательности, что и однофазные области на двойной диаграмме А–В с насыщающим элементом В при данной температуре T_1 (рис. 5.28). При переходе от одной фазы к другой отмечаются скачки концентрации диффундирующего элемента (рис. 5.28, б).

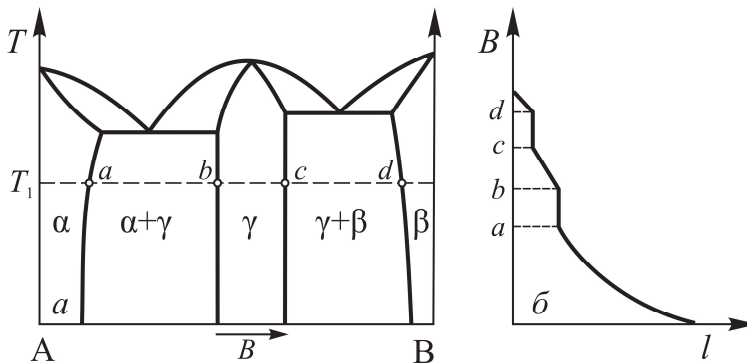


Рис. 5.28. Диаграмма состояния (а) и распределение фаз (б) в диффузионном слое при ХТО. l – расстояние от поверхности; B , %

Приведем некоторые примеры ХТО для сплавов железо – цементит. Диффузионное насыщение стали углеродом, азотом или этими элементами совместно является одним из наиболее распространенных процессов ХТО. Углерод и азот сравнительно быстро диффундируют в приповерхностную область стальных изделий, образуя с железом слои твердых растворов внедрения значительной толщины.

Технологический процесс диффузионного насыщения стали углеродом называется цементацией. Цементации обычно подвергают детали машин, которые должны иметь износостойкую рабочую поверхность и вязкую сердцевину: зубчатые колеса, валы и т. д.

Процесс диффузионного насыщения поверхностной зоны стальных деталей азотом называют азотированием. Азотирование применяют для повышения износостойкости и предела выносливости таких деталей машин, как коленчатые валы, гильзы цилиндров, червяки, валики и др.

5.7. Задачи теплопроводности при фазовых превращениях

Существенной особенностью задач теплопроводности с учетом фазовых превращений чистых веществ является наличие движущейся границы раздела фаз, закон перемещения которой должен быть найден в результате решения задачи из дополнительного условия теплового баланса на движущейся поверхности раздела фаз. Это условие делает задачу теплопроводности нелинейной. В то же время в процессах затвердевания и плавления сплавов, которые происходят в интервале температур, вместо линии раздела фаз образуется двухфазная зона.

Задача Стефана. Классическая задача Стефана о затвердевании (плавлении) полуограниченного тела ($x > 0$) формулируется как краевая задача для двух уравнений теплопроводности в твердой и жидкой фазах с четко выраженной границей фазового перехода (рис. 5.29):

$$\frac{\partial T_1(x,t)}{\partial t} = a_1 \frac{\partial^2 T_1(x,t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < \xi(t), \quad (5.7.1)$$

$$\frac{\partial T_2(x,t)}{\partial t} = a_2 \frac{\partial^2 T_2(x,t)}{\partial x^2}, \quad \xi < x < \infty, \quad (5.7.2)$$

$$T_2(x,0) = T_0, \quad (5.7.3)$$

$$T_2(x \rightarrow \infty) = T_0, \quad (5.7.4)$$

$$T_1(0,t) = T_c \quad (T_c < T_v), \quad (5.7.5)$$

где $a = \lambda/(c\rho)$ – коэффициент температуропроводности; ρ – плотность вещества, которая принимается одинаковой для обеих фаз; c – теплоемкость.

На движущейся границе раздела фаз $x = \xi(t)$ записывается условие Стефана, т. е. условие баланса тепла, учитывающее выделение (поглощение) скрытой теплоты фазового перехода Q :

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} \Big|_{x=\xi(t)} - \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{x=\xi(t)} = \rho_2 Q \frac{d\xi}{dt}, \quad (5.7.6)$$

а также дополнительное условие, отражающее кинетику фазового перехода. В задачах затвердевания (плавления) чистых веществ таким условием является

$$T_1[\xi(t), t] = T_2[\xi(t), t] = T_v = \text{const}, \quad (5.7.7)$$

которое соответствует равновесному фазовому переходу при температуре T_v . В этом случае наличие в обеих фазах градиентов температуры обеспечивает протекание равновесного фазового перехода.

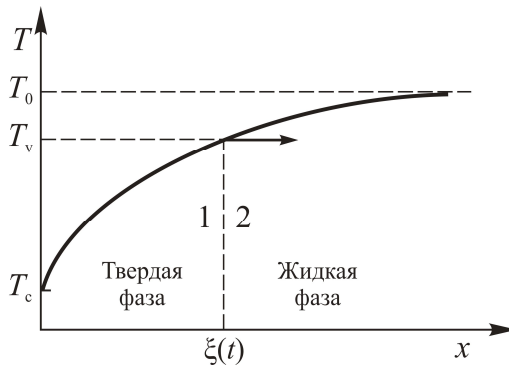


Рис. 5.29. Распределение температур в задаче Стефана (в случае затвердевания)

Если фронт фазового перехода продвинулся достаточно далеко, то поставленная задача (5.7.1)–(5.7.7) будет аналогична задаче об охлаждении системы тел, представляющей собой полуограниченный стержень. Кроме того, считается, что скорость $d\xi/dt$ мала. При таких предположениях распределение температуры будет мало отличаться от решения задачи для полуограниченного тела. Поэтому решение уравнений (5.7.1) и (5.7.2) ищем в следующем виде:

$$T_1 = A_1 + B_1 \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{a_1 t}}, \quad T_2 = A_2 + B_2 \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{a_2 t}}.$$

Постоянные A_1 и A_2 определяются из граничных условий (5.7.4) и (5.7.5). Тогда

$$T_1 = T_c + B_1 \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{a_1 t}},$$

$$T_2 = T_0 - B_2 \left(1 - \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{a_2 t}} \right) = T_0 - B_2 \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{a_2 t}}.$$

Из условия (5.7.7) имеем

$$T_c + B_1 \operatorname{erf} \frac{\xi}{2\sqrt{a_1 t}} = T_0 - B_2 \operatorname{erfc} \frac{\xi}{2\sqrt{a_2 t}} = T_v.$$

Так как B_1 и B_2 – постоянные, то

$$\frac{\xi}{\sqrt{t}} = \operatorname{const}, \quad \xi = \beta \sqrt{t},$$

где коэффициент β определяет скорость углубления зоны затвердевания. Из двух равенств (5.7.7) с T_v имеем

$$B_1 = \frac{T_v - T_c}{\operatorname{erf} \frac{\beta}{2\sqrt{a_1}}}, \quad B_2 = \frac{T_0 - T_v}{\operatorname{erfc} \frac{\beta}{2\sqrt{a_2}}}.$$

Следовательно, решение задачи (5.7.1)–(5.7.7) запишем в форме

$$T_1 = T_c + (T_v - T_c) \frac{\operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{a_1 t}}}{\operatorname{erf} \frac{\beta}{2\sqrt{a_1}}}, \quad T_2 = T_0 - \frac{T_0 - T_v}{\operatorname{erfc} \frac{\beta}{2\sqrt{a_2}}} \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{a_2 t}}. \quad (5.7.8)$$

Коэффициент β определяется из граничного условия (5.7.6)

$$\frac{\lambda_1 (T_v - T_c)}{\sqrt{a_1}} \frac{\exp\left(-\frac{\beta^2}{4a_1}\right)}{\operatorname{erf} \frac{\beta}{2\sqrt{a_1}}} - \frac{\lambda_2 (T_0 - T_v)}{\sqrt{a_2}} \frac{\exp\left(-\frac{\beta^2}{4a_2}\right)}{\operatorname{erfc} \frac{\beta}{2\sqrt{a_2}}} = \rho_2 Q \frac{\sqrt{\pi}}{2} \beta.$$

В случае плавления распределение температур схематически представлено на рис. 5.30, а условие Стефана примет вид

$$-\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{x=\xi(t)} + \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} \Big|_{x=\xi(t)} = \rho_1 Q \frac{d\xi}{dt}. \quad (5.7.9)$$

Следует отметить, что простое автомодельное (зависит от одной безразмерной переменной x/\sqrt{at}) решение (5.7.8) получено благодаря тому, что рассматривалось полуограниченное тело (в одномерной задаче отсутствуют характерные размер и время) и при $x = 0$ имеет место граничное условие первого рода. Для ограниченных областей и других граничных условий при $x = 0$ невозможно получить решение задачи Стефана в подобной замкнутой форме, поэтому применяют приближенные интегральные методы, методы рядов и численные методы.

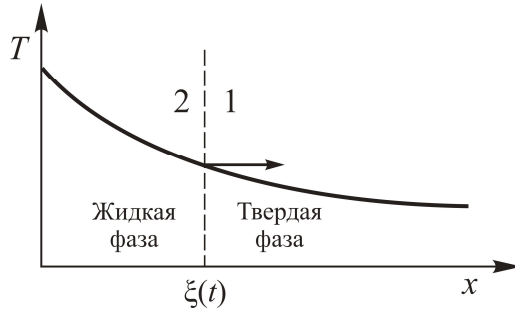


Рис. 5.30. Схема распределения температур в задаче Стефана (случай плавления)

Учет различия плотности фаз. Если плотности твердой и жидкой фаз неодинаковы, то жидкость будет перемещаться. При перемещении поверхности раздела на $d\xi$ количество образовавшегося при этом затвердевшего материала $\rho_1 d\xi$ эквивалентно количеству жидкости, находящемуся в слое толщиной $\rho_1 d\xi / \rho_2$, т. е. жидкость движется вдоль оси x со скоростью [3]

$$v_x = \left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_2} \right) \frac{d\xi}{dt}.$$

Тогда

1) если $\rho_1 > \rho_2$ (твердое тело уменьшает объем), то жидкость движется «назад» (например, для стали);

2) если $\rho_1 < \rho_2$ (твердое тело увеличивает объем), то жидкость движется «вперед» (например, плотность льда меньше плотности воды).

С учетом $\rho_1 \neq \rho_2$ уравнение теплопроводности для жидкой фазы примет вид

$$\frac{\partial T_2}{\partial t} - \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_2} \frac{d\xi}{dt} \frac{\partial T_2}{\partial x} = a_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2}.$$

Это уравнение удовлетворяется функцией

$$T_2 = T_0 - B_2 \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2\sqrt{a_2 t}} + \frac{\beta(\rho_1 - \rho_2)\sqrt{a_1}}{\rho_2\sqrt{a_2}} \right]$$

(для T_1 используется предыдущее решение). Для определения B_1 , B_2 и β необходимо использовать два условия (5.7.7) и условие (5.7.6) (или условие (5.7.9)).

Сделаем следующее замечание. Плотность льда меньше плотности воды, т. е. лед плавает в воде. Это обстоятельство играет большую роль в природе. Слой льда на поверхности воды защищает воду от охлаждения, а значит водоем не промерзает до дна. Кроме того, вода отличается известной аномалией: в области температур от 0 до 4 °С с повышением температуры ее плотность увеличивается и достигает наибольшего значения при 4 °С. Следовательно, водоемы, начиная с некоторой глубины, имеют температуру, близкую к 4 °С. Это спасает от гибели живущих в водоемах рыб.

О неравновесных условиях фазового перехода. Движущаяся граница раздела фаз, вообще говоря, является поверхностью сильного разрыва, на которой следует задавать условия сопряжения, полученные из законов сохранения массы, импульса и энергии [4]. Таким условием, в частности, является условие Стефана (5.7.6). Однако для получения однозначного решения задач тепло- и массопереноса в двух средах необходимо сформулировать дополнительные условия на поверхности раздела фаз, в частности, таким условием должно быть условие, характеризующее кинетику фазового перехода (или химической реакции). В задаче Стефана таким является условие (5.7.7) равновесного фазового перехода (затвердевания, плавления). В задачах с испарением (сублимацией) часто в качестве дополнительной связи используется кривая упругости, т. е. зависимость давления насыщенного пара испаряющегося компонента от температуры (равновесное испарение).

Однако в кинетической задаче Стефана исключена из рассмотрения собственно кинетика фазового перехода, обеспечивающая процесс зарождения новой фазы, что приводит к физически абсурдному результату, согласно которому скорость роста твердой фазы в начале процесса сколь угодно велика. Движущей силой этого процесса является переохлаждение ΔT на границе раздела фаз [5]. Для учета зависимости скорости роста новой фазы от переохлаждения в обобщенной постановке задачи Стефана вместо условия (5.7.7) вводится условие неравновесного фазового перехода [5]

$$\frac{d\xi}{dt} = K\Delta T, \quad K = \text{const}.$$

Тогда на границе раздела фаз имеем

$$T_1[\xi(t), t] = T_2[\xi(t), t] = T_v - \frac{1}{K} \frac{d\xi}{dt},$$

т. е. температура не является известной постоянной величиной.

Из решения обобщенной задачи Стефана следует [5], что перед фронтом кристаллизации находится зона переохлажденного расплава, в которой возможно зарождение новых кристаллов (п. 5.3). Классическое решение задачи Стефана пригодно для описания процесса теплообмена при фазовых превращениях после некоторого начального периода.

При испарении (сублимации) на поверхности тела продукты испарения отводятся от поверхности раздела фаз диффузией и конвекцией со скоростью, равной результирующей скорости испарения. Процесс массопереноса, вообще говоря, может контролироваться или диффузией (равновесное испарение), или скоростью испарения, или находиться в переходном режиме в зависимости от того, какой из указанных процессов более медленный.

Если процесс массопереноса контролируется и диффузией и кинетикой испарения, то в качестве дополнительного условия необходимо использовать выражение для неравновесного испарения, т. е. условие Герца – Кнудсена (условие (3.52), Т. 1). В случае интенсивного испарения (например, при воздействии лазерного излучения на металлы) процесс массопереноса контролируется только кинетикой испарения, т. е. на границе фазового перехода необходимо другое дополнительное условие (условие (3.106), Т. 1) [7–10]. Тогда постановка одномерной задачи стационарной теплопроводности в системе координат, связанной с перемещающейся границей раздела фаз, имеет вид

$$a \frac{d^2 T}{dx^2} + v_s \frac{dT}{dx} = 0,$$

$$q + \lambda \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=0} = \rho_s v_s Q, \quad T|_{x \rightarrow \infty} = 0, \quad v_s = \frac{0,8}{\rho_s} \frac{p_e(T_s)}{\sqrt{2\pi \frac{kT_s}{m}}}.$$

Здесь индекс s относится к параметрам на границе испарения; $p_e(T_s)$ – давление насыщенного пара, q – поверхностный источник.

Затвердевание сплавов. Большая часть промышленных марок стали – это сплавы, кристаллизующиеся в интервале температур между ликвидусом T_L и солидусом T_C (п. 5.6.2). Наличие интервала кристаллизации $\Delta T = T_L - T_C$ является причиной того, что фронт кристаллизации представляет собой (в отличие от задачи Стефана) двухфазную зону (см. рис. 5.24), состоящую из дендритных кристаллов и расплава [6].

Как видно из рис. 5.24, при одном и том же составе (концентрации) температура затвердевания сплава отличается от температуры его плавления, а затвердевание сплава наблюдается в интервале температур. Только сплав эвтектического состава затвердевает при определенной температуре.

Если фазовый переход происходит в интервале температур в некоторой пространственной двухфазной зоне, то в уравнение теплопроводности вводят источник тепла [6]

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda \nabla T) + \rho Q \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (5.7.10)$$

где $\psi(\text{ТВ}) = \frac{\bar{C}_{\text{ж}} - \bar{C}_0}{\bar{C}_{\text{ж}} - \bar{C}_{\text{ТВ}}}$ – объемная доля твердой фазы в элементе двухфазной зоны, которая в общем случае определяется кинетикой роста кристаллов.

Если предположить, что переохлаждение расплава невелико, то ψ можно найти по равновесной диаграмме состояния расплава. Тогда

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{d\psi}{dT} \frac{\partial T}{\partial t},$$

и уравнение (5.7.10) принимает вид

$$\rho \left(c - Q \frac{d\psi}{dT} \right) \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda \nabla T).$$

В практических расчетах полагают

$$-\frac{d\psi}{dT} = \frac{1}{T_{\text{л}} - T_{\text{с}}}.$$

При введении эффективной удельной теплоемкости сплава

$$c_{\text{эф}}(T) = \begin{cases} c_{\text{ж}}(T), & T > T_{\text{л}}; \\ c_{\text{ТВ}}(T_{\text{с}}) + \frac{Q}{T_{\text{л}} - T_{\text{с}}}, & T_{\text{с}} < T < T_{\text{л}}; \\ c_{\text{ТВ}}(T), & T < T_{\text{с}} \end{cases}$$

уравнение теплопроводности для затвердевающего сплава во всей пространственной области в однотемпературном приближении записывается в виде

$$\rho c_{\text{эф}} \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda \nabla T).$$

Литература

1. Горелик С. С., Дашевский М. Я. Материаловедение полупроводников и диэлектриков. М.: МИСИС, 2003.
2. Федотов А. К. Физическое материаловедение (фазовые превращения в металлах и сплавах). Минск: Высшая школа, 2012.
3. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964.
4. Павлюкевич Н. В. Сопряженные задачи теплообмена // Тепловые процессы в технике. 2011. Т. 3, № 4. С. 145–158.
5. Любов Б. Я. Теория кристаллизации в больших объемах. М.: Наука, 1975.
6. Самойлович Ю. А., Тимошпольский В. И., Трусова И. А., Несенчук А. П., Фоменко А. П. Стальной слиток. Минск: Белорусская наука, 2012. Т. 1.
7. Анисимов С. И., Имас Я. А., Романов Г. С., Ходыко Ю. В. Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука, 1970.
8. Рэди Дж. Действие мощного лазерного излучения. М.: Мир, 1974.
9. Рыкалин Н. Н., Углов А. А., Кокора А. Н. Лазерная обработка материалов. М.: Машиностроение, 1978.
10. Коротеев Н. И., Шумай И. Л. Физика мощного лазерного излучения. М.: Наука, 1991.

Задачи

Задача 1. Поле скорости жидкости в стационарном одномерном (вдоль оси X в декартовых координатах) течении в плоском канале (в зазоре между двумя параллельными плоскими пластинами с расстоянием $2d$ между ними) задано как

$$v_x = \frac{3}{2}U_0 \left(1 - \left(\frac{y}{d} \right)^2 \right),$$

U_0 – средняя по сечению скорость. Вязкость жидкости $\mu = 1 \text{ Н}\cdot\text{с}/\text{м}^2$, $d = 0,01 \text{ м}$, $U_0 = 1 \text{ м}/\text{с}$. Определить касательную силу, приложенную к 1 м^2 стенки канала со стороны жидкости.

Решение. Касательная сила равна

$$\sigma = -\mu \left. \frac{dv_x}{dy} \right|_{y=d} = \mu \cdot \frac{3}{2}U_0 \left. \frac{2y}{d^2} \right|_{y=d} = \mu \cdot 3 \frac{U_0}{d} = 3 \cdot 10^2 \text{ Н}/\text{м}^2.$$

Задача 2. Определить касательную силу, приложенную к 1 м^2 стенки канала со стороны жидкости в плоском течении Куэтта. Вязкость жидкости $\mu = 1 \text{ Н}\cdot\text{с}/\text{м}^2$, $d = 0,01 \text{ м}$, $v = 1 \text{ м}/\text{с}$.

Решение. Воспользуемся формулой (2.2.11) для течения Куэтта $U = vy/d$. Тогда

$$\sigma = \mu \frac{dU}{dy} = \mu \frac{v}{d} = 10^2 \text{ Н}/\text{м}^2.$$

Задача 3. Около поверхности диска, вращающегося в жидкости с угловой скоростью ω , во вращающейся вместе с диском цилиндрической системе, начало координат которой расположено в центре жидкости, поле скорости жидкости задано как $v_\varphi = \omega r(1 - kz)$, $v_r = 0$, $v_z = 0$. Вязкость жидкости $\mu = 1 \text{ Н}\cdot\text{с}/\text{м}^2$, $k = 100 \text{ 1}/\text{м}$, $\omega = 1 \text{ с}^{-1}$. Определить вращающийся момент, приложенный к диску радиусом $R = 0,2 \text{ м}$ со стороны жидкости.

Задача 4. В капиллярном вискозиметре через капилляр длиной 20 см и диаметром 1 мм при разности давления на его концах 200 Па за 10 мин вытекло 15 мл жидкости. Определить ее вязкость.

Решение. Используем формулу $\mu = \frac{\pi R^4 \Delta p}{8GL}$ (п. 2.2.3). Объемный расход

жидкости равен $G = \frac{V}{t} = \frac{15 \cdot 10^{-3} \text{ л}}{600 \text{ с}} = \frac{15}{6} \cdot 10^{-8} \text{ м}^3/\text{с}$. Тогда

$$\mu = \frac{3,14 \cdot 0,5^4 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 10^2}{8 \cdot 0,2 \cdot \frac{15}{6} \cdot 10^{-8}} = 1 \cdot 10^{-3} \text{ Н} \cdot \text{с}/\text{м}^2.$$

Задача 5. В ротационном вискозиметре геометрические характеристики зазора между статором и ротором составляют: толщина 1 мм, внутренний радиус 5 см, высота 20 см. При работе с испытуемой жидкостью ротор вращается со скоростью 1 об/с при крутящем моменте 0,1 Н·м. Определить вязкость жидкости.

Задача 6. Определить, при каком градиенте давления расход воды в течении Куэтта – Пуазейля через зазор высотой 1 мм будет нулевым, если верхняя стенка зазора движется со скоростью 0,1 м/с. Вязкость воды $\mu = 10^{-3} \text{ Па} \cdot \text{с}$ ($\text{Н} \cdot \text{с}/\text{м}^2$).

Решение. Воспользуемся формулой (п. 2.2.2) $v = \frac{h^2}{6\mu} \frac{dp}{dx}$. Тогда

$$\frac{dp}{dx} = \frac{v}{h^2} 6\mu = \frac{0,1 \cdot 6 \cdot 10^{-3}}{(10^{-3})^2} = \frac{6 \cdot 10^{-4}}{10^{-6}} = 6 \cdot 10^2 \text{ Н}/\text{м}^3.$$

Задача 7. В круглой трубе радиусом R имеет место стационарное осевое течение, единственная отличная от нуля компонента поля скорости которого в цилиндрических координатах задана как

$$v_z = 2U_0 \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right).$$

Температура жидкости для $z < 0$ совпадает с температурой стенки трубы и равна T_0 , а для $z \geq 0$ температура стенки равна T_w . Сформулировать постановку задачи (уравнения и граничные условия) о стационарном осесимметричном конвективном теплообмене в трубе для $z \geq 0$.

Решение. Уравнение теплопереноса при установившемся ламинарном потоке на развитом участке трубы имеет вид

$$2U_0 \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \frac{\partial T}{\partial z} = a \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right],$$

где $a = \lambda / (\rho c_p)$ – коэффициент температуропроводности. Установлено, что при $Pe = \frac{2RU_0}{a} > 10$ величину $\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$ можно считать пренебрежимо малой по сравнению с членом в левой части уравнения (U_0 – средняя скорость в трубе). Тогда

$$2U_0 \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \frac{\partial T}{\partial z} = a \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right].$$

Граничные условия:

$$T|_{z=0} = T_0, \quad T|_{r=R} = T_w, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{r=0} = 0.$$

Задача 8. Установлена следующая критериальная зависимость для среднего числа Нуссельта при конвективном теплообмене в круглой трубе (п. 2.9):

$$\text{для } Nu_d = 1,61 \sqrt[3]{Pe_d \frac{d}{L}} \quad Pe_d \frac{d}{L} > 12 \quad (\text{для } Pe_d \frac{d}{L} < 12 \quad Nu_d = 3,66),$$

где d и L – диаметр и длина трубы соответственно, а безразмерные критерии рассчитаны по диаметру трубы. Через трубку диаметром 1 см и длиной 1 м прокачивается вода с расходом 0,15 л/с и начальной температурой $T_0 = 20$ °С. Температура стенки трубки поддерживается на уровне $T_w = 100$ °С. Рассчитать температуру воды на выходе из трубки. Данные для воды: плотность $\rho = 1000$ кг/м³, вязкость $\mu = 10^{-3}$ Па·с, теплопроводность $\lambda = 0,58$ Вт/(м·К), теплоемкость $c = 4190$ Дж/(кг·К).

Решение. Объемный расход равен $G = 0,15 \cdot 10^{-3}$ м³/с, средняя скорость

$$U_0 = \frac{G}{\frac{\pi d^2}{4}} = \frac{0,6 \cdot 10^{-3}}{3,14 \cdot 10^{-4}} = 1,91 \text{ м/с}, \quad a = \frac{\lambda}{\rho c} = \frac{0,58}{10^3 \cdot 4,19 \cdot 10^3} = 0,14 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с},$$

$$Pe = \frac{U_0 d}{a} = \frac{1,91 \cdot 10^{-2}}{0,14 \cdot 10^{-6}} = 1,67 \cdot 10^5, \quad Pe \frac{d}{L} = 1,67 \cdot 10^5 \frac{10^{-2}}{1} = 1,67 \cdot 10^3,$$

$$\text{Nu} = 1,61\sqrt[3]{\text{Pe}_d \frac{d}{L}} \approx 19, \quad \alpha = \frac{\text{Nu}\lambda}{d} = 1102 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К}).$$

Составим уравнение теплового баланса в трубе, пренебрегая потоком тепла теплопроводностью вдоль трубы по сравнению с конвективным потоком $\left(\lambda \frac{d^2 T}{dz^2} \ll \rho c_p U \frac{dT}{dz} \right)$:

$$\rho c_p U \frac{dT}{dz} = \alpha (T_w - T) \frac{Pl}{Sl} \equiv \alpha (T_w - T) \frac{4}{d},$$

где P – периметр поперечного сечения трубы, S – его площадь, l – длина достаточно малого участка трубы. В результате имеем обыкновенное дифференциальное уравнение относительно температуры жидкости в трубе

$$\frac{dT}{dz} = \frac{4\alpha}{d\rho c_p U} (T_w - T).$$

Обозначим $y = T - T_w$, $\frac{4\alpha}{d\rho c_p U} = A$. Тогда уравнение примет вид

$$\frac{dy}{dz} + Ay = 0.$$

Запишем решение данного уравнения с учетом граничного условия $T|_{z=0} = T_0$:

$$T = T_w - (T_w - T_0) \exp(-Az).$$

По условиям задачи $A = \frac{4 \cdot 1102}{10^{-2} \cdot 10^3 \cdot 4,19 \cdot 10^3 \cdot 1,91} = 0,055$. Тогда температура воды на выходе из трубы ($z = 1$ м) равна $T = 100 - 80 \exp(-0,055) = 24,3$ °С.

Задача 9. По трубе диаметром $d = 6$ мм течет вода со скоростью $U = 0,4$ м/с. Температура стенки трубы равна $T_w = 50$ °С. Какую длину должна иметь труба, чтобы при температуре воды на входе $T_{f1} = 10$ °С температура воды на выходе из трубы была $T_{f2} = 20$ °С.

Решение. Коэффициент кинематической вязкости $\nu(T_{f2}) = 1,3 \cdot 10^{-6}$ м²/с.

Критерий $\text{Re} = \frac{Ud}{\nu} = \frac{0,4 \cdot 6 \cdot 10^{-3}}{1,3 \cdot 10^{-6}} = 1850$, т. е. течение ламинарное. Будем ис-

пользовать формулу $Nu = 1,6 \left(Re \frac{d}{L} \right)^{1/3}$ (см. задачу 8). Но так как длина трубы L неизвестна, то применим метод последовательных приближений.

Пусть $L = 100d = 0,6$ м. Тогда

$$Re = \frac{Ud}{\nu} = \frac{Ud\rho c_p}{\lambda} = \frac{0,4 \text{ м/с} \cdot 6 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3 \cdot 4,2 \cdot 10^3 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}}{0,6 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}} = 1,47 \cdot 10^4,$$

$$Re \frac{d}{L} = \frac{1,47 \cdot 10^4}{100} = 147, \quad Nu = 1,6 \sqrt[3]{147} \approx 8,4.$$

Теперь определим коэффициент теплообмена

$$\alpha = Nu \frac{\lambda}{d} = 8,4 \cdot \frac{0,6}{6 \cdot 10^{-3}} = 0,84 \cdot 10^3 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}.$$

Расход воды равен $G = \rho U \pi d^2 / 4 = 113 \cdot 10^{-4}$ кг/с. Тогда количество передаваемого тепла найдем по формуле

$$Q = G c_p (T_{f2} - T_{f1}) = 113 \cdot 10^{-4} \cdot 4,2 \cdot 10^3 \cdot 10 \approx 475 \text{ Вт}.$$

С другой стороны, это же количество тепла можно определить как

$$Q = \alpha (T_w - T_{f1}) \pi d L.$$

Тогда

$$L = \frac{Q}{\alpha (T_w - T_{f1}) \pi d} = \frac{475}{0,84 \cdot 10^3 \cdot 40 \cdot 3,14 \cdot 6 \cdot 10^{-3}} = 0,75 \text{ м}.$$

В качестве второго приближения положим $L = 0,8$ м. Тогда $Re d/L = 110$;
 $Nu = 1,6 \sqrt[3]{110} = 7,7$; $L = \frac{475}{0,77 \cdot 10^3 \cdot 40 \cdot 3,14 \cdot 6 \cdot 10^{-3}} = 0,81$ м. Таким образом, можно считать $L = 0,8$ м.

Задача 10. Тонкая пластина длиной 2 м и шириной 1,5 м обтекается продольным потоком воздуха ($U = 3$ м/с), температура которого $T_0 = 20$ °С. Температура поверхности пластины равна $T_w = 90$ °С. Определить средний по длине коэффициент теплоотдачи и количество тепла, отдаваемое пластиной воздуху.

Решение. Для $T_0 = 20\text{ }^\circ\text{C}$, $\lambda = 0.034\text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}$, $\nu = \frac{\mu}{\rho} = \frac{1,82\text{ Па}\cdot\text{с}}{1,2\text{ кг/м}^3} = 1,5\cdot 10^{-5}\text{ м}^2/\text{с}$. Тогда $Re = UL/\nu = 4\cdot 10^5$. В условиях ламинарного течения в пограничном слое средний по длине коэффициент теплоотдачи определяется по формуле (см. п. 2.4)

$$Nu = 0,66 Re^{1/2} Pr^{1/3} = 0,66 \cdot (4\cdot 10^5)^{1/2} \cdot 0,7^{1/3} \approx 372.$$

$$\text{Отсюда } \alpha = Nu \frac{\lambda}{L} = 372 \cdot \frac{0,034}{2} = 6,3 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}.$$

Количество передаваемого тепла с обеих сторон пластины равно

$$Q = \alpha(T_w - T_0)S = 6,3 \cdot (90 - 20) \cdot 2 \cdot 2 \cdot 1,5 = 2646\text{ Вт}.$$

Задача 11. Определить по условиям задачи 10 толщину пограничного слоя и местный коэффициент теплоотдачи на расстоянии $x = 0,1L$.

Решение. Число Рейнольдса рассчитаем как $Re = \frac{U \cdot 0,1L}{\nu} = \frac{3 \cdot 0,2}{1,5 \cdot 10^{-5}} = 4 \cdot 10^4$. Воспользуемся формулами п. 2.3, 2.4. Толщина пограничного слоя

$$\delta = \frac{5x}{\sqrt{Re_x}} = \frac{5 \cdot 0,2}{\sqrt{4 \cdot 10^4}} = 0,5 \cdot 10^{-2}\text{ м},$$

число Нуссельта

$$Nu_x = 0,33 \cdot (4 \cdot 10^4)^{1/2} \cdot 0,7^{1/3} \approx 58,1.$$

$$\text{Тогда } \alpha_x = Nu_x \frac{\lambda}{L} = 58,1 \cdot \frac{0,034}{0,2} = 9,9 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}$$

Задача 12. Для вязких жидкостей установлена следующая критериальная зависимость для среднего числа Нуссельта при свободно-конвективном теплообмене около вертикальной поверхности с постоянной температурой: $Nu = 0,65 \cdot (Gr Pr)^{1/4}$ (для $Pr > 10$) [1]. Вертикальная плоская поверхность высотой $h = 0,1\text{ м}$ и шириной $L = 0,4\text{ м}$ погружена в трансформаторное масло. Температура поверхности поддерживается постоянной и равной $T_w = 80\text{ }^\circ\text{C}$. Температура масла $T = 20\text{ }^\circ\text{C}$. Рассчитать расход тепла на поддержание температуры поверхности. Данные для масла: плотность $\rho = 900\text{ кг/м}^3$, вязкость $\mu = 30 \cdot 10^{-3}\text{ Па}\cdot\text{с}$, теплопроводность $\lambda = 0.38\text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}$, теплоемкость $c_p = 1670\text{ Дж/(кг}\cdot\text{К)}$, $\beta = 6 \cdot 10^{-4}\text{ 1/К}$.

Решение. Для вязкости $\nu = \frac{\mu}{\rho} = \frac{30 \cdot 10^{-3}}{0,9 \cdot 10^3} = 33 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ рассчитаем критерий Грасгофа:

$$\text{Gr} = \frac{gh^3\beta(T_w - T)}{\nu^2} = \frac{9,8 \cdot 10^{-3} \cdot 60 \cdot 6 \cdot 10^{-4}}{33^2 \cdot 10^{-12}} = 0,32 \cdot 10^6.$$

При $\text{Pr} = \frac{\nu \rho c_p}{\lambda} = 130,5$ $\text{Gr Pr} = 0,32 \cdot 10^6 \cdot 130,5 = 0,42 \cdot 10^8.$

Определим коэффициент теплообмена α при значении числа Нуссельта $\text{Nu} = 0,65 \sqrt[4]{0,42 \cdot 10^8} = 65 \sqrt[4]{0,42} = 52:$

$$\alpha = \text{Nu} \frac{\lambda}{L} = \frac{52 \cdot 0,38}{0,1} = 197,6 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}.$$

Расход тепла на поддержание температуры поверхности равен

$$Q = \alpha (T_w - T_0) S = 197,6 \cdot 60 \cdot 0,04 = 474 \text{ Вт}.$$

Задача 13. В масляном баке температура масла поддерживается с помощью горизонтальных обогревающих труб диаметром $d = 20$ мм. Определить коэффициент теплоотдачи от поверхности труб к маслу, если температура масла $T = 60$ °С, а температура поверхности труб $T_w = 90$ °С. Расстояние между трубами относительно велико и расчет теплоотдачи можно производить как для одиночного цилиндра.

Решение. Теплоотдача горизонтального цилиндра в условиях естественной конвекции может быть вычислена по формуле $\text{Nu} = 0,51 \cdot (\text{Gr Pr})^{1/4}$ [2], которая справедлива при $500 < \text{Gr Pr} < 2 \cdot 10^8$. При $T = 60$ °С $\nu = 92 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$, $\lambda = 0,133 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$, $\beta = 6,5 \cdot 10^{-4}$, $\text{Pr} = 1340$. Тогда

$$\text{Gr Pr} = \frac{g\beta\Delta T d^3}{\nu^2} \text{Pr} = \frac{9,8 \cdot 30 \cdot 2^3 \cdot 10^{-6} \cdot 1340 \cdot 6,9 \cdot 10^{-4}}{92^2 \cdot 10^{-12}} = 2,42 \cdot 10^5,$$

$$\text{Nu} = 0,51 \cdot (2,42 \cdot 10^5)^{1/4} = 5,1 \cdot 2,22 = 11,3.$$

Определим коэффициент теплоотдачи

$$\alpha = \text{Nu} \frac{\lambda}{L} = \frac{11,3 \cdot 0,133}{2 \cdot 10^{-2}} = 75,1 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}.$$

Задача 14. Определить эквивалентный коэффициент теплопроводности и плотность теплового потока через вертикальную щель толщиной $\delta = 20$ мм, заполненную воздухом. Температура горячей поверхности $T_1 = 200$ °С, холодной $T_2 = 80$ °С.

Решение. Эквивалентный коэффициент теплопроводности может быть вычислен по формуле $\lambda_{\text{экв}} = \lambda \varepsilon_k$, где λ – действительная теплопроводность воздуха, ε_k – коэффициент конвекции, который может быть приближенно вычислен как [2]

$$\varepsilon_k = 0,18 \cdot (\text{Gr Pr})^{1/4}.$$

Все физические параметры выбираются при определяющей температуре $T = 0,5(T_1 + T_2) = 0,5 \cdot (200 + 80) = 140$ °С:

$$\nu = 27,8 \text{ м}^2/\text{с}, \quad \lambda = 3,6 \cdot 10^{-2} \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}, \quad \text{Pr} = 0,68, \quad \beta = \frac{1}{273 + 140} = \frac{1}{413} \frac{1}{\text{К}}.$$

Тогда

$$\text{GrPr} = \frac{g\beta(T_1 - T_2)2^3 \cdot 10^{-6}}{413 \cdot 27,8^2 \cdot 10^{-12}} \cdot 0,68 = 2,02 \cdot 10^4.$$

Коэффициент свободной конвекции

$$\varepsilon_k = 0,18 \cdot (10^4 \cdot 2,02)^{1/4} = 2,14,$$

откуда

$$\lambda_{\text{экв}} = 3,6 \cdot 10^{-2} \cdot 2,14 = 7,7 \cdot 10^{-2} \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}.$$

Плотность теплового потока через воздушную прослойку равна

$$q = \frac{\lambda_{\text{экв}}}{\delta} (T_1 - T_2) = \frac{7,7 \cdot 10^{-2} \cdot 120}{2 \cdot 10^{-2}} = 462 \text{ Вт/м}^2.$$

Задача 15. Как изменится эквивалентный коэффициент теплопроводности, если толщину щели уменьшить в 2 раза, а все другие условия оставить такими же, как в задаче 14.

Решение. Эквивалентный коэффициент теплопроводности $\lambda_{\text{экв}}$ уменьшится в 1,69 раза.

Задача 16. В контуре для изучения гидродинамики и теплоотдачи жидкометаллических теплоносителей металл в сборном баке нагревается при помощи горизонтального электрического нагревателя, имеющего форму цилиндра диаметром 50 мм. Вычислить коэффициент теплоотдачи от поверхности нагревателя к металлу для случая, когда контур заполнен натрием с температурой $T = 200\text{ }^\circ\text{C}$, а температура поверхности нагревателя $T_w = 400\text{ }^\circ\text{C}$.

Решение. Теплоотдача при свободном движении жидких металлов ($Pr \ll 1$) может быть вычислена по формуле [1]

$$Nu = 0,53 \cdot (Gr Pr^2)^{1/4}.$$

При определяющей температуре $T_0 = 0,5(T + T_w) = 300\text{ }^\circ\text{C}$ физические параметры натрия равны: $\nu = 39,4 \cdot 10^{-8}\text{ м}^2/\text{с}$, $\lambda = 73\text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$, $Pr = 0,63 \cdot 10^{-2}$,

$$\beta = \frac{\rho - \rho_w}{\rho(T_w - T)} = \frac{903 - 854}{903(400 - 200)} = 2,71 \cdot 10^{-4}\text{ 1/К}.$$

Тогда

$$Gr = g\beta \frac{\Delta T d^3}{\nu^2} = 4,28 \cdot 10^8, \quad Nu = 0,53 \cdot (4,28 \cdot 10^8 \cdot 0,63^2 \cdot 10^{-4})^{1/4} = 6,1.$$

Коэффициент теплообмена

$$\alpha = Nu \frac{\lambda}{d} = 6,1 \cdot \frac{73}{5 \cdot 10^{-2}} = 8906 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}.$$

Задача 17. В океане живет теплокровное животное, имеющее форму, близкую к форме прямоугольной пластинки размером $0,1 \times 0,5\text{ м}$. Температура тела животного $37\text{ }^\circ\text{C}$. Температура воды в океане $10\text{ }^\circ\text{C}$. Рассчитать тепловую мощность, которая расходуется на поддержание температуры тела животного при движении его в воде со скоростью $u = 1\text{ м/с}$ (животное движется узкой стороной тела вперед). Данные для воды: плотность $\rho = 1000\text{ кг/м}^3$, вязкость $\mu = 10^{-3}\text{ Па}\cdot\text{с}$, теплопроводность $\lambda = 0,58\text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$, теплоемкость $c_p = 4190\text{ Дж}/(\text{кг}\cdot\text{К})$.

Решение. Вычислим критерий Рейнольдса для пластины длиной $L = 0,5\text{ м}$:

$$Re = \frac{uL\rho}{\mu} = \frac{1 \cdot 0,5 \cdot 10^3}{10^{-3}} = 5 \cdot 10^5.$$

Течение будем считать турбулентным. Тогда для вычисления среднего значения коэффициента теплообмена при турбулентном пограничном слое воспользуемся формулой [1, 2]

$$Nu = 0,032 Re^{0,8},$$

т. е.

$$Nu = 0,032 \cdot (5 \cdot 10^5)^{0,8} = 0,032 \cdot 10^4 \cdot (5)^{0,8} = 0,032 \cdot 10^4 \cdot 3,6 = 1152.$$

Коэффициент теплообмена

$$\alpha = Nu \frac{\lambda}{L} = 452 \cdot \frac{0,58}{0,5} = 1336 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}.$$

Тепловая мощность, которая расходуется на поддержание температуры тела животного, равна

$$Q = \alpha \Delta T S = 1336 \cdot 27 \cdot 0,5 \cdot 0,1 = 1804 \text{ Вт}.$$

Задача 18. Плоская пластина размером $0,1 \times 0,1$ м обдувается потоком воздуха со скоростью 1 м/с вдоль плоскости перпендикулярно ее длинной кромке. Температура воздуха 20°C . Температура пластины поддерживается на уровне 100°C за счет конденсирующегося на ее обратной стороне водяного пара. Рассчитать минимальный расход пара, необходимый для поддержания температуры пластины. Данные для воздуха: плотность $\rho = 1,2 \text{ кг/м}^3$, вязкость $\mu = 1,82 \cdot 10^{-5} \text{ Па}\cdot\text{с}$, теплопроводность $\lambda = 0,034 \text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}$, теплоемкость $c_p = 1001 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{К)}$, удельная теплота конденсации пара равна $2,256 \cdot 10^6 \text{ Дж/кг}$.

Решение. Критерий Рейнольдса, рассчитанный по высоте пластинки

$$h = 0,1 \text{ м, равен } Re = \frac{1 \cdot 0,1 \cdot 1,2}{1,82 \cdot 10^{-6}} = 0,66 \cdot 10^4; \text{ Pr} = \frac{1,82 \cdot 10^{-5} \cdot 1 \cdot 10^3}{1,2 \cdot 0,034} = 0,46. \text{ Тогда}$$

среднее значение числа Нуссельта определяется по следующей формуле для ламинарного обтекания пластины (п. 2.6):

$$Nu = 0,66 Re^{1/2} Pr^{1/3} = 40,1,$$

$$\text{а коэффициент теплообмена равен } \alpha = Nu \frac{\lambda}{L} = 13,6 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}.$$

Определим тепловую мощность, необходимую для поддержания температуры пластины:

$$Q = \alpha(100 - 20)S = 13,6 \cdot 80 \cdot 0,1 \cdot 0,1 = 10,88 \text{ Вт}.$$

Отсюда необходимый расход пара

$$G = \frac{Q}{2,256 \cdot 10^6} = \frac{10,88}{2,256 \cdot 10^6} = 4,82 \cdot 10^{-6} \text{ кг/с} = 0,0174 \text{ кг/ч}.$$

Задача 19. Цилиндрическая трубка с наружным диаметром $d = 20$ мм охлаждается поперечным потоком воды, скорость потока $u = 1$ м/с. Средняя температура воды $T_f = 10$ °С, температура поверхности трубки $T_w = 50$ °С. Определить коэффициент теплоотдачи от поверхности трубки к охлаждающей воде.

Решение. Расчет теплоотдачи при поперечном обтекании одиночного цилиндра капельной жидкостью можно производить по формуле [1, 2]

$$Nu = 0,25 Re^{0,6} Pr_f^{0,38} \left(\frac{Pr_f}{Pr_w} \right)^{0,25} \quad \text{при } 1 \cdot 10^3 < Re < 2 \cdot 10^5,$$

где индексы f и w означают, что соответствующие физические параметры выбираются по температуре жидкости T_f и по температуре жидкости у стенки трубки T_w . При $T_f = 10$ °С $\nu = 1,3 \cdot 10^{-6}$ м²/с, $\lambda = 0,58$ Вт/(м·К), $Pr_f = 9,5$.

При $T_w = 50$ °С значение $Pr_w = 9,5$. Следовательно, $Re = \frac{ud}{\nu} = 1,54 \cdot 10^4$,

$$Nu = 0,25 \cdot (1,54 \cdot 10^4)^{0,6} (9,5)^{0,38} \left(\frac{9,5}{9,5} \right)^{1/4} = 246.$$

Тогда коэффициент теплоотдачи равен

$$\alpha = Nu \frac{\lambda}{d} = 7130 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}.$$

Заметим, что при обтекании цилиндра *воздухом* используется формула

$$Nu = 0,22 Re^{0,6} \quad (1 \cdot 10^3 < Re < 2 \cdot 10^5)$$

или

$$Nu = 0,44 Re^{0,5} \quad (10 < Re < 1 \cdot 10^3).$$

Задача 20. Процессор, в котором рассеивается электрическая мощность $Q = 50$ Вт, охлаждается наружным радиатором, состоящим из набора достаточно удаленных друг от друга вертикальных пластин (ребер) высотой 7 см и шириной 4 см. Общий коэффициент теплообмена от тепловыделяющей зоны прибора до радиатора 15 Вт/К. Рассчитать количество ребер радиатора, необходимое для того, чтобы при температуре окружающего воздуха 30 °С температура в процессоре не превышала 60 °С. Данные для воздуха: плотность $\rho = 1,2$ кг/м³, вязкость $\mu = 1,82 \cdot 10^{-5}$ Па·с, теплопроводность $\lambda = 0.034$ Вт/(м·К), теплоемкость $c_p = 1001$ Дж/(кг·К).

Решение. Тепловой баланс в процессоре выражается формулой

$$Q = 15(T_{\text{пр}} - T_p), \quad \text{т. е. } 100 = 15(T_{\text{пр}} - T_p),$$

где T_p – температура поверхности радиатора. Отсюда

$$T_p = \frac{15 \cdot 60 - 100}{15} = 53,3^\circ\text{C}.$$

Если обозначить через α_0 коэффициент теплообмена для одного ребра радиатора, то заданное количество тепла, снимаемое радиатором из n пластин, выражается соотношением $50 = 2 \cdot (\alpha_0 n) S (53,3 - 30)$, где $S = 0,07 \cdot 0,04 = 28 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2$ – площадь ребра. Отсюда $n = \frac{25}{\alpha_0 \cdot 28 \cdot 10^{-4} \cdot 23,3}$. Определим α_0 при

$$\text{Gr} = \frac{g\beta\Delta T h^3}{\nu^2} = \frac{9,8 \cdot 23,3 \cdot 7^3 \cdot 10^{-6} \cdot 1,44}{(273 + 0,5 \cdot (30 + 53,3)) \cdot 1,82^2 \cdot 10^{-10}} = 108,2 \cdot 10^4, \quad \text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\lambda} = 0,535.$$

Тогда для $\text{Nu} = 0,54 \cdot (\text{Gr Pr})^{1/4} = 0,54 \cdot 10 \cdot (57,9)^{1/4} = 14,85$ [1]

$$\alpha_0 = \text{Nu} \frac{\lambda}{h} = 7,2 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}.$$

В результате получаем $n = 53$.

Задача 21. Процессор, в котором рассеивается электрическая мощность $Q = 100$ Вт, охлаждается наружным радиатором, состоящим из набора достаточно удаленных друг от друга вертикальных пластин (ребер) длиной 7 см и шириной 4 см. Ребра обдуваются потоком воздуха от кулера (вентилятора) со скоростью 1,5 м/с вдоль их длинной стороны. Общий коэффициент теплообмена от тепловыделяющей зоны прибора до радиатора 25 Вт/К. Рассчитать количество ребер радиатора, необходимое для того, чтобы при температуре окружающего воздуха 30°C температура в процессоре не превышала 60°C . Данные для воздуха те же, что и в задаче 20.

Задача 22. Плоская абсолютно черная поверхность излучает энергию при температуре 816°C . Чему равна направленная спектральная сила излучения абсолютно черного тела для угла 60° , отсчитываемого от нормали, при длине волны 6 мкм?

Решение. Используем формулу (3.6) для расчета интенсивности монохроматического излучения при $\lambda = 6$ мкм:

$$I_{0,\lambda} = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \left[\exp\left(\frac{hc}{\lambda T}\right) - 1 \right]^{-1} =$$

$$= \frac{2 \cdot 6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 9 \cdot 10^{16}}{6^5 \cdot 10^{-30} \left[\exp\left(\frac{10^{-34} \cdot 6,625 \cdot 3 \cdot 10^8}{6 \cdot 10^{-6} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 1089}\right) - 1 \right]} = 1,9 \cdot 10^9 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3 \cdot \text{с} \cdot \text{стер}}.$$

Тогда $I_{0,\lambda} \cos 60^\circ = 9,5 \cdot 10^8 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3 \cdot \text{с} \cdot \text{стер}}.$

Задача 23. Полусферическая интегральная поверхностная плотность потока излучения абсолютно черного тела равна 6304 Вт/м^2 . Какова температура поверхности тела? На какую длину волны приходится максимум спектральной поверхностной плотности потока излучения?

Решение. По закону Стефана – Больцмана (3.7) получаем

$$T = \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^{1/4} = \left(\frac{6304}{5,67 \cdot 10^{-8}} \right)^{1/4} = 576 \text{ К}.$$

Если $\exp \frac{hc}{\lambda T} \gg 1$, то (3.6) можно представить в виде (закон излучения Вина)

$$\frac{I_{0,\lambda}}{T^5} = \frac{2hc^2}{(\lambda T)^5 \exp \frac{hc}{\lambda T}}. \quad (*)$$

Величину $\lambda_{\max} T$ можно найти по положению пика кривой (*). Кроме того, ее можно определить путем дифференцирования функции Планка и приравнивания полученного выражения к нулю. В результате

$$\lambda_{\max} T = 2,8978 \cdot 10^{-3}$$

(закон смещения Вина), т. е. максимум интенсивности излучения смещается в сторону более коротких длин волн с увеличением температуры обратно пропорционально T . Тогда $\lambda_{\max} = 2,8978 \cdot 10^{-3} / 576 = 5,04 \cdot 10^{-6} \text{ м} = 5,04 \text{ мкм}$ [3].

Задача 24. Энергию излучения Солнца можно приближенно оценить как энергию излучения абсолютно черного тела при температуре $T = 5780 \text{ К}$. Черная элементарная площадка, находящаяся на орбите вокруг Солнца на расстоянии, равном главному радиусу земной орбиты ($R = 149,5 \cdot 10^9 \text{ м}$), ори-

ентирована по нормали к линии, соединяющей центры площадки и Солнца. Если радиус Солнца равен $r_S = 6,95 \cdot 10^8$ м, то чему равен поток излучения, падающего на площадку?

Решение. Поток излучения, падающего на элементарную площадку dS_2 на орбите, вычисляем по формуле

$$q = \frac{dQ}{dS_2} = \frac{\sigma T^4}{\pi} \frac{dS_1 \cos \beta_1 \cos \beta_2}{R^2}$$

(см. п. 3.4, интенсивность излучения, которое диффузно распределяется в полупространстве, равна $I = E/\pi$, т. е. $dQ = \sigma T^4/\pi$), где

$$dS_1 = \pi r_S^2 = 3,14 \cdot (6,95 \cdot 10^8)^2 = 152 \cdot 10^{16} \text{ м}^2.$$

Тогда

$$q = \frac{5,67 \cdot 10^{-8} \cdot (5,78 \cdot 10^3)^4 \cdot 152 \cdot 10^{16} \cdot 1}{3,14 \cdot (149,5 \cdot 10^9)^2} = 1,38 \text{ кВт/м}^2.$$

Эта величина согласуется с диапазоном измеренных значений солнечной константы 1,32–1,43 кВт/м².

Задача 25. Черная квадратная площадка со стороной $dS_1 = 0,254 \cdot 10^{-2}$ м, имеющая температуру $T_1 = 1088$ К, расположена рядом с трубкой диаметром $dS_2 = 0,254 \cdot 10^{-2}$ м. Отверстие трубки излучает как черная поверхность при температуре $T_2 = 700$ К. Чему равен поток результирующего излучения вдоль прямой L , соединяющей площадку с отверстием трубки ($\beta_2 = 20^\circ$)?

Решение. Поток результирующего излучения находим по формуле (см. задачу 24)

$$dQ_{1-2} = \frac{\sigma(T_1^4 - T_2^4)}{\pi} \frac{\cos \beta_1 \cos \beta_2}{L^2} dS_1 dS_2.$$

Значение $\cos \beta_1$ находится из рассмотрения соответствующего прямоугольного треугольника $dS_2 - 0 - dS_1$ с известными значениями сторон:

$$\cos \beta_1 = \frac{5,08 \cdot 10^{-2}}{(7,62^2 + 5,08^2)^{1/2} \cdot 10^{-2}} = 0,554.$$

Тогда

$$\begin{aligned} dQ_{1-2} &= \frac{5,67 \cdot 10^{-8} \cdot (1088^4 - 700^4) \cdot 0,554 \cdot \cos 20^\circ}{3,14 \cdot (5,08^2 + 7,62^2) \cdot 10^{-4}} \cdot (2,54 \cdot 10^{-3})^2 \times \\ &\times \frac{3,14 \cdot (2,54 \cdot 10^{-3})^2}{4} = 4,3 \cdot 10^{-5} \text{ Вт.} \end{aligned}$$

Задача 26. Две черные изотермические концентрические сферы обмениваются энергией излучения. Найти все угловые коэффициенты для такой геометрической системы, если площадь поверхности внутренней сферы S_1 , а площадь поверхности внешней сферы S_2 .

Решение. Все излучение, испускаемое S_1 , падает на S_2 , т. е. $\varphi_{1-2} = 1$. Заметим, что для замкнутой системы, состоящей из N поверхностей, интегральное излучение, испускаемое любой поверхностью (например S_k) внутрь замкнутой системы, должно падать на все поверхности, составляющие замкнутую систему. Таким образом, все доли энергии излучения, испускаемого одной поверхностью, достигающие других поверхностей замкнутой системы, должны в сумме составлять единицу, т. е.

$$\varphi_{k-1} + \varphi_{k-2} + \varphi_{k-3} + \dots + \varphi_{k-k} + \dots + \varphi_{k-N} = \sum_{j=1}^N \varphi_{k-j} = 1. \quad (**)$$

Кроме того, используя соотношение взаимности ($\varphi_{1-2}S_2 = \varphi_{2-1}S_1$), имеем

$$\varphi_{2-1} = \frac{S_1\varphi_{1-2}}{S_2} = \frac{S_1}{S_2}.$$

Тогда из (***) получаем (для S_2)

$$\varphi_{2-1} + \varphi_{2-2} = 1, \text{ т. е. } \varphi_{2-2} = 1 - \varphi_{2-1} = \frac{S_2 - S_1}{S_2}.$$

Задача 27. Записать результирующий поток между поверхностями конечных размеров [3].

Решение. Часть потока испускаемого излучения S_1 , падающая на S_2 , из определения углового коэффициента равна

$$dQ_{1-2} = \sigma T_1^4 S_1 \varphi_{1-2}.$$

Аналогично часть потока испускаемого излучения S_2 , падающая на S_1 , равна

$$dQ_{2-1} = \sigma T_2^4 S_2 \varphi_{2-1}.$$

Тогда поток результирующего излучения между S_1 и S_2 есть

$$Q = Q_{1-2} - Q_{2-1} = \sigma T_1^4 S_1 \varphi_{1-2} - \sigma T_2^4 S_2 \varphi_{2-1}.$$

С помощью соотношения взаимности ($\varphi_{1-2}S_2 = \varphi_{2-1}S_1$) это выражение можно записать в виде

$$Q = \sigma (T_1^4 - T_2^4) S_1 \varphi_{1-2}.$$

Задача 28. Обмуровка топочной камеры парового котла выполнена из шамотного кирпича, а внешняя обшивка – из листовой стали. Расстояние между обшивкой и кирпичной кладкой равно 30 мм, и его можно считать малым по сравнению с размерами стен топки. Вычислить потери тепла в окружающую среду в условиях стационарного режима за счет лучистого теплообмена между поверхностями обмуровки и обшивки. Температура внешней поверхности обмуровки $T_1 = 127^\circ\text{C}$, а температура стальной обшивки $T_2 = 50^\circ\text{C}$. Степень черноты шамота $\varepsilon_1 = 0,8$, стали – $\varepsilon_2 = 0,6$.

Решение. Для рассматриваемой системы результирующие потери излучения вычисляются по формуле [2]

$$q = \varepsilon_{\text{пр}} \sigma (T_1^4 - T_2^4),$$

где $\varepsilon_{\text{пр}} = \frac{1}{\varepsilon_1^{-1} + \varepsilon_2^{-1} - 1} = \frac{1}{0,8^{-1} + 0,6^{-1} - 1} = 0,524$. Тогда

$$q = 0,524 \cdot 5,67 \cdot 10^{-8} \cdot \left[(127 + 273)^4 - (50 + 273)^4 \right] = 525 \text{ Вт/м}^2.$$

Задача 29. Как изменятся тепловые потери в окружающую среду, если между обмуровкой и обшивкой топочной камеры, рассмотренной в задаче 28, установить стальной экран, имеющий степень черноты $\varepsilon_3 = 0,6$?

Решение. При наличии m защитных экранов в общем случае тепловой поток равен

$$q = \frac{\sigma (T_1^4 - T_2^4)}{\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} + 2 \sum_{i=1}^m \frac{1}{\varepsilon_{3i}} - (m+1)}.$$

При наличии одного экрана

$$q = \frac{\sigma (T_1^4 - T_2^4)}{\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} + 2 \left(\frac{1}{\varepsilon_3} - 1 \right)} = \frac{5,67 \cdot 10^{-8} \cdot (400^4 - 323^4)}{\frac{1}{0,8} + \frac{1}{0,6} + 2 \left(\frac{1}{0,6} - 1 \right)} = 238 \text{ Вт/м}^2,$$

т. е. тепловые потоки в окружающую среду значительно уменьшились.

Задача 30. В канале, по которому движется горячий газ, температура газа измеряется при помощи термопары. Показания термопары $T_1 = 300^\circ\text{C}$, а температура стенки при установившемся тепловом режиме $T_2 = 200^\circ\text{C}$.

Вычислить ошибку в измерении температуры газа, которая получается за счет лучистого теплообмена между корольком термомпары и стенкой канала, и истинную температуру газа. Степень черноты термомпары $\varepsilon_1 = 0,8$, а коэффициент теплоотдачи от газа к поверхности королька $\alpha = 59 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$.

Решение. Составим уравнение баланса тепла для королька термомпары. Термомпара отдает тепло за счет излучения:

$$Q = S_1 \varepsilon_1 \sigma (T_1^4 - T_2^4)$$

и получает его за счет конвекции:

$$Q = S_1 \alpha (T_2 - T_1).$$

При установившемся режиме

$$\alpha (T_2 - T_1) = \varepsilon_1 \sigma (T_1^4 - T_2^4).$$

Тогда

$$\Delta T_2 = T_2 - T_1 = \frac{0,8 \cdot 5,67 \cdot 10^{-8}}{59} \left[(300 + 273)^4 - (200 + 273)^4 \right] = 44,7 \text{ } ^\circ\text{C}.$$

Истинная температура газа равна

$$T_2 = T_1 + \Delta T_2 = 344,7 \text{ } ^\circ\text{C}.$$

Задача 31. Вычислить угловой коэффициент и тепловой поток лучистого теплообмена между двумя параллельными полосами, расстояние между которыми $h = 3 \text{ м}$. Ширина полос одинакова: $a_1 = a_2 = 2 \text{ м}$, а длина велика по сравнению с шириной. Степень черноты полос $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0,8$, а температуры их поверхностей $T_1 = 500 \text{ } ^\circ\text{C}$ и $T_2 = 200 \text{ } ^\circ\text{C}$.

Решение. Для двух параллельных полос одинаковой ширины угловые коэффициенты $\varphi_{12} = \varphi_{21}$ и находятся из уравнения

$$\varphi_{12} = \sqrt{1 + \left(\frac{h}{a}\right)^2} - \frac{h}{a} = \sqrt{1 + \left(\frac{3}{2}\right)^2} - \frac{3}{2} = 0,3.$$

Тепловой поток, отнесенный к единице длины полосы, определяется из соотношения

$$Q = \varepsilon_{\text{нр}} \sigma (T_1^4 - T_2^4) H,$$

где H – взаимная поверхность лучистого обмена на 1 м полосы:

$$H_1 = H_2 = \varphi_{12} F_1 = 0,3 \cdot 2 \cdot 1 = 0,6 \text{ м}^2/\text{м};$$

$$\varepsilon_{\text{np}} = \frac{1}{1 + \varphi_{12} \left(\frac{1}{\varepsilon_1} - 1 \right) + \varphi_{21} \left(\frac{1}{\varepsilon_2} - 1 \right)} = 0,87.$$

Тогда

$$Q = 0,87 \cdot 5,67 \cdot 10^{-8} \cdot 0,6 \cdot \left[(500 + 273)^4 - (200 + 273)^4 \right] = 10\,704 \text{ Вт/м}.$$

Задача 32. Определить поверхность нагрева и число секций водоводяного теплообменника типа труба в трубе, в котором греющая вода движется по внутренней стальной трубе ($\lambda_c = 59 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$) диаметром $d_1/d_2 = 35/32 \text{ мм}$ и имеет температуру на входе $T' = 95 \text{ }^\circ\text{C}$. Расход греющей воды $G_1 = 2130 \text{ кг/ч}$. Нагреваемая вода движется противотоком по кольцевому каналу между трубами и нагревается от температуры $T'_{f2} = 15 \text{ }^\circ\text{C}$ до $T''_{f2} = 45 \text{ }^\circ\text{C}$, внутренний диаметр внешней трубы $D = 48 \text{ мм}$, расход нагреваемой воды $G_2 = 3200 \text{ кг/ч}$, длина одной секции теплообменника $L = 1,75 \text{ м}$.

Решение. Количество передаваемого тепла нагреваемой жидкости равно

$$Q = G_2 c_{p2} (T''_{f2} - T'_{f2}) = \frac{3200}{3600} \cdot 4,2 \cdot 10^3 \cdot (45 - 15) = 11,2 \cdot 10^4 \text{ Вт}.$$

Температура греющей воды на выходе

$$T''_{f1} = T'_f - \frac{Q}{G_1 c_{p1}} = 50 \text{ }^\circ\text{C}.$$

Значения физических свойств воды определим по средним арифметическим значениям температур теплоносителей:

$$\text{при } T_{f1} = 0,5(T'_f + T''_{f1}) = 72,5 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$\rho_1 = 976 \text{ кг/м}^3, \quad v_1 = 0,4 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}, \quad \lambda_1 = 0,678 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К}), \quad \text{Pr}_1 = 2,47;$$

$$\text{при } T_{f2} = 0,5(T'_{f1} + T'_{f2}) = 0,5(15 + 45) = 30 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$\rho_2 = 996 \text{ кг/м}^3, \quad v_2 = 0,8 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}, \quad \lambda_2 = 0,626 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К}), \quad \text{Pr}_2 = 5,42.$$

Определим скорости движения теплоносителей:

$$u_1 = \frac{4G_1}{\rho_1 \pi d_1^2 \cdot 3600} = \frac{4 \cdot 2130}{976 \cdot 3,14 \cdot (32 \cdot 10^{-3})^2 \cdot 3600} = 0,755 \text{ м/с},$$

$$u_2 = \frac{4G_2}{\rho_2 \pi (D^2 - d_2^2) \cdot 3600} = 1,06 \text{ м/с}.$$

Критерий Рейнольдса для потока греющей воды

$$\text{Re}_1 = \frac{u_1 d_1}{\nu_1} = \frac{0,755 \cdot 0,32 \cdot 10^{-3}}{0,4 \cdot 10^{-6}} = 6 \cdot 10^4.$$

Так как течение греющей воды турбулентное, то расчет теплоотдачи в трубах при турбулентном течении можно проводить по формуле [1, 2]

$$\text{Nu}_1 = 0,021 \text{Re}_1^{0,8} \text{Pr}_1^{0,43} = 0,021 \cdot (6 \cdot 10^4)^{0,8} \cdot 2,47^{0,43} = 204.$$

Тогда

$$\alpha_1 = \text{Nu}_1 \frac{\lambda_1}{d_1} = 204 \cdot \frac{0,678}{32 \cdot 10^{-3}} = 4320 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}.$$

Для потока нагреваемой воды

$$\text{Re}_2 = \frac{u_2 d_2}{\nu_2} = \frac{1,06 \cdot (48 - 35) \cdot 10^{-3}}{0,8 \cdot 10^{-6}} = 1,7 \cdot 10^4.$$

Тогда

$$\text{Nu}_2 = 0,021 \text{Re}_2^{0,8} \text{Pr}_2^{0,43} = 105,$$

$$\alpha_2 = \text{Nu}_2 \frac{\lambda_2}{D - d_2} = 105 \cdot \frac{0,626}{13 \cdot 10^{-3}} = 5056 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}.$$

Общий коэффициент теплопередачи равен

$$k = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_1} + \frac{\delta_c}{\lambda_c} + \frac{1}{\alpha_2}} = \frac{1}{\frac{1}{4320} + \frac{1,5 \cdot 10^{-3}}{47} + \frac{1}{5056}} = 2183 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}},$$

а плотность теплового потока

$$q = k(T_{f1} - T_{f2}) = 2183 \cdot (72,5 - 30) = 9,28 \cdot 10^4 \text{ Вт/м}^2.$$

Определим поверхность нагрева

$$S = \frac{Q}{q} = \frac{11,2 \cdot 10^4}{9,28 \cdot 10^4} = 1,2 \text{ м}^2.$$

Число секций

$$n = \frac{S}{\pi dL} = \frac{1,2}{3,14 \cdot 3,2 \cdot 10^{-2} \cdot 1,75} \approx 7.$$

Задача 33. Солнечный свет падает перпендикулярно на некоторую область, находящуюся в Экваториальной Африке. Если поверхность излучает как абсолютно черное тело, то какова максимальная температура этой области? Солнечная постоянная равна 1395 Вт/м^2 (см. задачу 24).

Решение. Максимальную температуру этой области Земли следует определить из условия $1395 \text{ Вт/м}^2 = 5,67 \cdot 10^{-8} \cdot T^4$ и равна $122 \text{ }^\circ\text{C}$.

Задача 34. Черное тело радиусом r при температуре T окружено зачерненной с обеих сторон тонкой оболочкой радиусом R . Найдите, насколько такой радиационный экран уменьшает скорость охлаждения тела (в пространстве между телом и оболочкой вакуум, потерь, связанных с теплопроводностью, нет).

Решение. Внутреннее тело излучает в единицу времени энергию $4\pi r^2 \sigma T^4$. За это время тело поглощает энергию $4\pi r^2 \sigma T_1^4$, излученную оболочкой. Таким образом, оболочка получает от внутреннего тела энергию, равную $4\pi r^2 \sigma (T^4 - T_1^4)$. Из непрерывности потока энергии внутри и вне оболочки найдем T_1 :

$$4\pi R^2 \sigma T_1^4 = 4\pi r^2 \sigma (T^4 - T_1^4),$$

т. е.

$$T_1^4 = \frac{r^2}{r^2 + R^2} T^4.$$

Следовательно, отношение энергии, излучаемой оболочкой в единицу времени во внешнее пространство ($4\pi R^2 \sigma T_1^4$), к интенсивности излучения в отсутствие ее ($4\pi r^2 \sigma T^4$) равно $R^2/(r^2 + R^2)$. Во столько же раз уменьшается скорость охлаждения тела.

Задача 35. Рассчитайте (и запомните):

а) температуру T , при которой $kT = 1 \text{ эВ}$;

б) величину kT (в эВ) при комнатной температуре.

Задача 36. Плотность вещества в центре Солнца равна $\sim 80 \text{ г/см}^3$, а температура $\sim 13 \cdot 10^6 \text{ К}$. Вещество Солнца почти целиком состоит из протонов и электронов. Найдите давление газа и радиационное давление в центре Солнца.

Решение. Давления определяются как

$$p_{\text{г}} = \rho \frac{R}{M} T = 1,7 \cdot 10^{16} \text{ Н/м}^2, \quad p_{\text{рад}} = \frac{4}{3} \frac{\sigma T^4}{c} = 7,2 \cdot 10^4 \text{ Н/м}^2.$$

Задача 37. Солнце излучает приблизительно как черное тело при температуре 5700 К . Если солнечным светом облучать абсолютно черную медную сферу (радиус сферы r), расположенную на Земле на расстоянии 1 а. е. от Солнца, то какая равновесная температура будет достигнута при этом (диаметр Солнца виден с Земли под углом $0,55^\circ$).

Решение. Если R – радиус Солнца, то полная интенсивность излучаемой Солнцем энергии равна $4\pi R^2 \sigma T^4$. На расстоянии, равном 1 а. е. ($L = 1 \text{ а. е.} = 1,5 \cdot 10^{11} \text{ м}$), на площадь πr^2 будет падать энергия, равная

$$\pi r^2 \frac{4\pi R^2 \sigma T^4}{4\pi L^2} = \frac{\pi r^2 R^2 \sigma T^4}{L^2}.$$

Так как $R = \alpha L/2$, где α – угол, под которым виден диаметр Солнца с Земли, а интенсивность энергии, излучаемой медной сферой с температурой T_1 , равна $4\pi r^2 \sigma T_1^4$, то из условия теплового баланса

$$\frac{\pi}{4} r^2 \alpha^2 \sigma T^4 = 4\pi r^2 \sigma T_1^4$$

находим ($1^\circ = 0,0174 \text{ рад}$)

$$T_1 = \frac{T \sqrt{\alpha}}{2} = 279 \text{ К}.$$

Литература

1. Кутателадзе С. С. Основы теплообмена. Новосибирск: Наука, 1975.
2. Краснощекоев Е. А., Сукомел А. С. Задачник по теплоотдаче. М.–Л.: Госэнергоиздат, 1963.
3. Зигель Р., Хауэлл Дж. Теплообмен излучением. М.: Мир, 1965.
4. Фейнмановские лекции по физике. Задачи и упражнения с ответами и решениями. М.: Мир, 1969.

Научное издание

Байков Валентин Иванович
Павлюкевич Николай Владимирович
Федотов Александр Кириллович
Шнип Александр Иванович

ТЕПЛОФИЗИКА

Том 2

**ТЕРМОДИНАМИКА НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ,
ТЕОРИЯ КОНВЕКТИВНОГО ТЕПЛООБМЕНА, ПЕРЕНОС
ЭНЕРГИИ ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ, ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА
И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ**

Редактор В. И. Царькова

Подписано в печать 10.12.2014.
Формат 70×100 1/16. Бумага офисная.
Гарнитура «Times New Roman»
Усл. печ. л. 29,83. Уч.-изд. л. 26,47.
Тираж 200 экз. Заказ 54.

Издатель и полиграфическое исполнение:
Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси.
Свидетельство о государственной регистрации издателя,
изготовителя, распространителя печатных изданий
№ 1/275 от 04.04.2014.
ЛП № 02330/451 от 18.12.2013.
ул. П. Бровки, 15, 220072, г. Минск