УДК 536.21

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА РЕШЁТОЧНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Неумоина Н.Г., Лебедева Ю.В., Шевченко Н.Ю.

Камышинский технологический институт (филиал) ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет», Камышин, e-mail: fpt@kti.ru

На основе нелокальной версии термодинамики, разработанной Майковым В.П., аналитическим путём получено выражение для расчёта коэффициента решёточной теплопроводности металлов и сплавов в зависимости от температуры. В рамках нелокальной версии термодинамики удаётся обобщить классическую равновесную и линейную неравновесную термодинамику на новой методологической основе с введением в физику квантованной энтропии. Дискретизация термодинамических параметров позволяет ввести в термодинамику время как существенный параметр и определить минимальный линейный макроскопический масштаб для описания процесса переноса тепла. Получено выражение для равновесного потока тепла, дифференцируя которое по температуре, можно получить выражение для неравновесного теплового потока при наложении на тело разности потенциалов, т.е. разности температур. Проводя аналогию с законом Фурье, можно записать выражение для коэффициента теплопроводности вещества. Анализ этого выражения и проведённый расчёт на примере металлического сплава, позволяет сделать вывод, что получено выражение для расчёта коэффициента решёточной теплопроводности твёрдых тел, которое учитывает его температурную зависимость.

Ключевые слова: температура, тепловой поток, теплопроводность, решёточная теплопроводность

DETERMINATION OF THE COEFFICIENT OF LATTICE HEAT CONDUCTIVITY OF METALS AND ALLOYS

Neumoina N.G., Lebedev J.V., Shevchenko N.J.

A Kamyshin technological institute of the «Volgograd state technical university», Kamyshin, e-mail: fpt@kti.ru

Based on the nonlocal version of thermodynamics developed by Maikov V.P., analytically obtained expression for calculation of the coefficient of lattice heat conductivity of metals and alloys depending on temperature. In the frame of a nonlocal version of thermodynamics is possible to generalize classical equilibrium and linear nonequilibrium thermodynamics on a new methodological basis of introduction to the physics of quantized entropy. The discretization of the thermodynamic parameters allows you to enter in the thermodynamics of time as an essential parameter and determine the minimum linear macroscopic scale to describe the process of heat transfer. Received the expression for the equilibrium flow of heat, which differentiating by the temperature, one can obtain the expression for nonequilibrium heat flow when applied to the body potential difference, i.e. the temperature difference. Drawing an analogy with the Fourier law, it is possible to write down the expression for the heat conductivity of the substance. The analysis of this expression and calculated on the example of metal alloy, allows to conclude that the obtained expression for calculation of the coefficient of lattice heat conductivity of solids, which takes into account its temperature dependence.

Keywords: temperature, heat flow, heat conductivity, lattice heat conductivity

Принято считать [3], что коэффициент теплопроводности металлов складывается из двух составляющих

$$\lambda = \lambda_ф + \lambda_э, \qquad (1)$$

где $\lambda_ф$, $\lambda_э$ – коэффициенты теплопроводности фононов и электронного газа соответственно.

Под фононами понимают минимальную порцию энергии, которую может поглотить или испустить кристаллическая решётка при тепловых колебаниях в случае перехода с одного энергетического уровня на другой. Тогда поле упругих волн, заполняющих кристалл, можно трактовать как газ, образованный квантами нормальных колебаний решётки, т.е. фононами [1].

Вычисление фононовой или решёточной теплопроводности металлов и сплавов как части их общей теплопроводности, определение её доли при различных состояниях металлов и сплавов (монокристаллическое, поликристаллическое, мелкозернистое, крупнозернистое и т.п.) является актуальной практической задачей определения оного из важнейших теплофизических свойств конструкционных и инструментальных материалов.

Для решения этой задачи выбран методологически принципиально новый термодинамический метод – нелокальная версия термодинамики. Предложенная Майковым В.П. нелокальная версия термодинамики [4] позволяет обобщить классическую равновесную и линейную неравновесную термодинамику на новой методологической основе. Основной (и единственной) исходной предпосылкой данного подхода является следующее положение. В качестве макроскопического определения энтропии используем то, которое дает второй закон термодинамики

$$dS = \frac{\delta Q}{T}. \quad (2)$$

В силу квантовой природы энергии значение δQ не может быть сколь угодно малым. По смыслу этой величины оно должно быть минимальным макроскопическим значением, которое еще может быть измерено на макроуровне. В качестве $\Delta Q = \delta Q$ примем естественную границу точности измерения количества теплоты – среднее значение теплового шума – kT, где k – постоянная Больцмана, $k = 1{,}381\cdot10^{-23}$ Дж/К.

Если принять значение kT за минимальное приращение (интервал квантования) количества теплоты

$$\Delta Q = kT,$$

то из определения энтропии (2) получим минимальное приращение энтропии

$$\Delta S = \frac{kT}{T} = k,$$

то есть константа Больцмана является квантом энтропии.

Используя величину ΔQ как минимальную энергию в соотношении неопределенностей энергия-время квантовой физики, получим характерный масштаб времени

$$\Delta\tau = \hbar/(2kT), \quad (3)$$

где $\hbar$ – постоянная Планка, $\hbar = 1{,}05\cdot10^{-34}$ Дж·с.

Величина $\Delta\tau$ (она имеет порядок $10^{-13}\cdot10^{-14}$ *с*) характеризует минимальный интервал времени, для которого макроскопическое понятие температуры еще сохраняет физический смысл, т.е. этот интервал времени фактически определяет границу между микро и макромиром. Используя уравнение (3) можно сформировать первую неньютоновскую метрику макромира – минимальный линейный размер r и минимальный объём V_M распространения электромагнитных волн

$$r = c\cdot\Delta\tau, \quad (4)$$

$$V_M = \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{\pi}{6}\left(\frac{\hbar c}{kT}\right)^3, \quad (5)$$

где c – скорость распространения света в данной среде, *м/с*.

Данный объём задаёт в пространстве размеры, в пределах которых устанавливается термодинамическое равновесие и для данного объёма справедливы соотношения равновесной термодинамики. Такой объём в нелокальной версии термодинамики принято называть макроячейкой. Состояние макроячейки может быть охарактеризовано с помощью макроскопических термодинамических параметров, таких как температура, давление, энтропия, масса, количество частиц и других. Уже на макроскопическом уровне эти параметры можно рассчитать с конечной долей определенности. Возникающая неопределённость носит объективный характер и связана с тем, что макроячейки постоянно обмениваются между собой элементарными порциями количества теплоты $\Delta Q = kT$.

Если макроячейка получает элементарную порцию количества теплоты ΔQ при $P = const$, то объем, температура и масса макроячейки изменяются на величину

$$\Delta V = kT/k_S, \quad (6)$$

$$\Delta T = \frac{6}{\pi}\frac{k^4T^4}{c_P\rho\hbar^3c^3}, \quad (7)$$

$$\Delta m = \Delta V\rho M, \quad (8)$$

где k_S – адиабатический модуль сжатия, н/м²;
c_P – мольная изобарная теплоемкость, *Дж/(кмоль К)*;
ρ – молярная плотность, *кмоль*/м³;
M – молярная масса, *кг/кмоль*.

Выбор условия $P = const$ вызван тем, что в состоянии динамического (флуктуационного) равновесия каждая отдельная макроячейка выступает лишь как область пространства, охваченная электромагнитным взаимодействием за время $\Delta\tau$, т.е. макроячейка не является объемом, который был бы физически фиксирован в определенных границах.

Изменение массы макроячейки – элементарная масса Δm содержит меньше одной частицы. Это значит, что элементарную массу можно рассматривать только как квазичастицу, которая в данном случае является акустическим фононом. Этот акустический фонон и отвечает за перенос массы, тепла и импульса в данной среде.

Так как минимальная скорость распространения акустического фонона (квазичастицы) равна скорости распространения звука в данной среде (это можно доказать), то можно ввести вторую неньютоновскую метрику макромира – это радиус упругих взаимодействий между макроячейками

$$\Delta\ell = c_S\Delta\tau, \quad (9)$$

где c_S – скорость звука в данной среде, *м/с*.

Акустические фононы уже в равновесных условиях участвуют в переносе субстанции (массы, тепла, импульса) между макроячейками. Для получения равновесного потока субстанции можно использовать уравнение Умова-Пойнтинга для случая упругих взаимодействий [2], записанное в интегральной форме

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\int_V UdV = \oint S_n dF ,$$

где U – плотность субстанции,
S_n – плотность потока субстанции по нормали к поверхности n.

Поскольку параметры в рассматриваемом подходе носят элементарный макроскопический характер, то интегралы можно заменить средними величинами и получить для теплового потока

$$\frac{1}{\Delta\tau}\cdot\frac{kT}{\Delta V}\cdot\Delta V = S_n\cdot F .$$

Откуда находим равновесную плотность потока тепла как плотность потока субстанции

$$S_n = I_T^* = \frac{kT}{F\cdot\Delta\tau} .$$

Поверхность F можно определить, как отношение характерного для упругих взаимодействий объема ΔV к характерному линейному размеру Δl

$$F = \frac{\Delta V}{\Delta l} .$$

Тогда выражение равновесного потока тепла окончательно запишется

$$I_T^* = c_s^3\cdot\rho . \qquad (10)$$

Чтобы получить неравновесный тепловой поток, воспользуемся линейным приближением и запишем для неравновесного теплового потока в металлическом стержне

$$I_T = \frac{dI_T^*}{dT}\cdot\Delta T .$$

Здесь величина ΔT определяется выражением

$$\Delta T = \frac{T_1 - T_2}{\delta/\Delta l},$$

где T_1 – температура на одном конце стержня, *K*;
T_2 – температура на другом конце стержня, *K*;
δ – длина стержня, *м*.

Окончательно выражение неравновесного теплового потока в стержне конечной длины получим в виде:

$$I_T = \left(3c_s^2\cdot\rho\cdot\frac{\partial c_s}{\partial T} + c_s^3\frac{\partial\rho}{\partial T}\right)\cdot c_s\cdot\Delta\tau\cdot\frac{T_1 - T_2}{\delta} .$$

Полученное выражение для I_T имеет размерность Вт/м², т.е. размерность плотности теплового потока.

Проводя аналогию с законом теплопроводности (законом Фурье)

$$q = I_T = -\lambda\, gradT ,$$

можно положить, что

$$gradT = \frac{T_1 - T_2}{\delta} ,$$

тогда

$$\left(3c_s^2\rho\frac{\partial C_3}{\partial T} + c_s^3\frac{\partial\rho}{\partial T}\right)\cdot\Delta l = \lambda . \qquad (11)$$

По идеологии вывода уравнения (11) можно предположить, что полученное с его помощью значение коэффициента теплопроводности даст нам решёточную (фононовую) теплопроводность металлической кристаллической решётки. С целью проверки достоверности полученного выражения проведены расчеты для низкоуглеродистой стали со следующими исходными параметрами.

Плотность вещества с учетом среднего температурного коэффициента объемного расширения β определялась по соотношению

$$\rho = \frac{\rho_0}{\beta T + 1},$$

где ρ_0 = *7800 кг/м³* (сталь 40[5]); β = *4·10⁻⁶ К⁻¹*.

Скорость звука представлена в следующем виде:

$$c_s = \sqrt{\frac{E}{\rho}},$$

где E – модуль упругости, *Па*;
ρ – плотность материала стержня, *кг/м³*.

Зависимость модуля упругости низкоуглеродистой стали от температуры удалось описать квадратичной зависимостью в виде

$$E = -183441{,}55\,T^2 + 1{,}238007\times10^8\,T + 1{,}816827\times10^{11}\ (\text{Па})$$

Получены следующие значения коэффициента теплопроводности низкоуглеродистой стали при соответствующих температурах в диапазоне от *300 °К* до *1073 °К*.

Коэффициенты решёточной теплопроводности низкоуглеродистой стали

T, °K	300	373	473	573	673	773	873	973	1073
λ, Вт/(м×K)	6,78	5,25	15,35	21,64	25,27	26,69	26,29	24,23	20,65

Обсуждение результатов.

Полученные значения меньше, чем приведенные в справочной литературе (так для стали 45 в диапазоне температур T = 300…600…800 К, λ = 79…43…30 Вт/(м×К) [5, с. 343]. Но эти значения в контексте изложенного подхода соответствуют коэффициенту решёточной теплопроводности $\lambda_{реш} = \lambda_{ф}$, и составляют только часть теплопроводности металлического кристалла. Изложенная в литературе качественная тенденция [3], которая говорит о том, что с повышением температуры $\lambda_{реш}$ играет все более существенную роль, подтверждена результатами расчётов. Кроме того, в источнике [1] утверждается, что теплопроводность кристаллической решётки обусловлена ангармоническим характером колебаний атомов, что фактически означает взаимодействие между фононами. Очевидно, что с повышением температуры взаимодействие между фононами возрастает, поэтому зависимость коэффициента теплопроводности от температуры имеет явно выраженный экстремальный характер.

Таким образом, с помощью аналитического вывода выражения для коэффициента теплопроводности и проведенных расчётов подтверждена возможность использования нелокальной версии термодинамики для теоретического определения такого важного термодинамического параметра веществ, как коэффициент решёточной теплопроводности.

Список литературы

1. Елманов Г.Н., Зуев М.Т., Смирнов Е.А. Теплопроводность металлов и сплавов: Лабораторный практикум. – М.: МИФИ, 2007. – 32 с. Электронный ресурс http://library.mephi.ru/Data-IRBIS/book-mephi/Elmanov_Teploprovodnost_metallov_i_splavov_2007.pdf.

2. Кочетков А.В., Федотов П.В. О некоторых несуразностях в изложениях вектора Умова-Пойнтинга / А.В. Кочетков, П.В. Федотов // Пространство и Время. – 2014. – № 2(16). – С. 79–88. Электронный ресурс http://www.space-time.ru/assets/files/2-16.2014/2226-7271provr-st2-16.2014.24-kochetkov-fedotov.pdf.

3. Лариков Л.И Тепловые свойства металлов и сплавов. – Киев: Наукова думка, 1985. – 437с.

4. Майков В.П. Расширенная версия классической термодинамики – физика дискретного пространства-времени. – М.: МГУИЭ. 1997 – 160 с., ил.

5. Физические величины: Справочник / А.Н. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др.; Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.