

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ НА МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ МЕТАЛЛА

А.А. Мочалов, К.Д. Евфимко

*Национальный университет кораблестроения им. адмирала Макарова
пр. Героев Сталинграда, 9, г. Николаев, Украина, 54025*

Разработан теоретический метод оценки коэффициента объёмного сжатия металла при сверхвысоких давлениях. Предложена методика расчета данного коэффициента на основе потенциала Морзе для всестороннего адиабатического сжатия металла. Получена зависимость коэффициента объёмного сжатия железа от давления и температурная кривая для процесса обработки давлением порядка 10^{10} - 10^{11} Па.

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы активно развиваются фундаментальные и прикладные исследования в области получения и исследования перспективных материалов. Актуальны на сегодняшний день исследования поведения материалов в экстремальных условиях при внешних воздействиях, к которым относятся высокие давления, высокие и низкие температуры, интенсивное пластическое деформирование, электромагнитные поля, концентрированные потоки энергии и частиц. Такие исследования представляют ценность для таких технологий, как металлургия, металлообработка, машиностроение, электроника, приборостроение, нанотехнологии, твердотельный синтез. Так, современные металлургические и металлообрабатывающие технологии дают возможность улучшить или изменить те или иные характеристики материала. В рамках данных технологий разрабатываются математические модели для описания типовых технологических процессов: плавления, нагрева и охлаждения металла, прокатки,ковки,штамповки, прессования порошков, обработки давлением, термообработки, механической обработки, сварки, обработки электромагнитными полями и потоками частиц [1-12]. В большинстве случаев эти модели сводятся к теоретическим моделям физических процессов деформирования, тепло- и массопереноса. Однако, для экспериментальных исследований такие модели часто неприемлемы, так как сложность моделей не позволяет использовать их при расчетах, что препятствует применению современных экспериментальных методик исследования свойств материалов [13-15]. Анализ источников [16-18] и вышеизложенное позволяет сделать вывод, что на сегодняшний день особенно важна разработка моделей и методов оценки параметров и свойств материалов, с одной стороны достаточно адекватных и точных, а с другой – приемлемых для использования в экспериментальных исследованиях. Так, в настоящее время не достаточно хорошо изучена зависимость коэффициента объёмного сжатия вещества от давления и физических свойств материала. Имеются литературные источники, в которых рассматривалась зависимость коэффициента объёмного сжатия вещества от изменения термодинамических параметров при малых значениях давления [17-19].

Цель работы состоит в разработке метода оценки зависимости коэффициента объёмного сжатия от термодинамических параметров и физических свойств материала.

1 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

При разработке новых технологических процессов обработки различных материалов высокой температурой и сверхвысоким давлением, соизмеримым с модулем Юнга, возникает необходимость изучения зависимости коэффициента объёмного сжатия k от термодинамических параметров и свойств материала.

2 МЕТОД ОЦЕНКИ КОЭФФИЦИЕНТА ОБЪЕМНОГО СЖАТИЯ ПРИ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Для решения поставленной задачи использовался потенциал межатомного взаимодействия в форме потенциала Морзе [20]:

$$U = w((1 - \exp^{-a\delta})^2 - 1), \quad (1)$$

где w – энергия диссоциации (энергия разрыва связей) для данного материала; $\delta = (r - r_0)/r$ – относительное изменение межатомного расстояния; r_0 – межатомное расстояние при p_0, T_0 ; r – межатомное расстояние; a – константа, зависящая от природы соответствующего вещества.

Уравнение состояния для твёрдой фазы имеет вид:

$$v = v_0(1 + \beta(T - T_0) - k(p - p_0)), \quad (2)$$

где v_0 – удельный объём вещества при $p = p_0, T = T_0$, β – коэффициент объёмного расширения тела; k – коэффициент объёмного сжатия данного вещества; p – давление сжатия вещества; T – текущее значение температуры тела.

Изменение относительного межатомного расстояния в потенциале Морзе можно выразить через удельные объёмы при соответствующих параметрах давления и температуры:

$$r_0 = \sqrt[3]{\frac{\mu}{N_A}} \sqrt[3]{v_0}, \quad (3)$$

$$r = \sqrt[3]{\frac{\mu}{N_A}} \sqrt[3]{v}, \quad (4)$$

где r_0 и r – начальное и текущее значения межатомного расстояния.

С учётом выражений (2), (3) и (4), относительное изменение межатомного расстояния запишется следующим образом:

$$\delta = \sqrt[3]{1 + \beta(T - T_0) - k(p - p_0)} - 1. \quad (5)$$

Из первого начала термодинамики для адиабатического процесса сжатия материала найдём взаимосвязь между давлением p и температурой T в дифференциальной форме:

$$dT = \frac{pv_0k}{C_v + pv_0\beta} dp, \quad (6)$$

где C_v – удельная теплоёмкость при постоянном объёме.

Проинтегрировав выражение (6) от p_0 T_0 до p T получим:

$$T - T_0 = \frac{k}{\beta}(p - p_0) + \frac{C_v k}{v_0 \beta^2} \ln \frac{C_v + p_0 v_0 \beta}{C_v + p v_0 \beta}. \quad (7)$$

С учётом выражений (2) и (6) приращение потенциала взаимодействия запишется следующим образом:

$$dA_{\text{взв}} = dU = -pvd p = -p v_0 (\beta dT - k dp) = -p v_0 \left(\frac{\beta p v_0 k}{C_v + p v_0 \beta} - k \right) dp. \quad (8)$$

Изменения потенциала взаимодействия между атомами металла получим из выражения (1), дифференцируя его по относительному изменению межатомного расстояния δ :

$$dU = w[(1 - \exp^{-a\delta})^2 - 1]d\delta. \quad (9)$$

Изменение потенциала взаимодействия (9) равно работе деформации вещества, следовательно:

$$-p v_0 \left(\frac{\beta p v_0 k}{C_v + p v_0 \beta} - k \right) dp = w[(1 - \exp^{-a\delta})^2 - 1]d\delta. \quad (10)$$

Выразим коэффициент объёмного сжатия k через термодинамические параметры p (давление), v_0 (удельный объём) и физические свойства металла: C_v (удельная теплоёмкость при постоянном объёме), β (коэффициент объёмного расширения), a (константа при экспоненте потенциала Морзе) и w (энергия диссоциации атомов металла). Разложив экспоненту в выражении (10) в ряд, учитывая два первых члена ряда (ввиду малости последующих членов ряда), получим:

$$k = \frac{2wa^2\delta(C_v + \beta p v_0)^2}{v_0 C_v^2}. \quad (11)$$

С учётом выражений (5) и (7) найдём относительное изменение межатомного расстояния:

$$\delta = \sqrt[3]{1 + \frac{C_v k}{v_0 \beta} \ln \frac{C_v + p_0 v_0 \beta}{C_v + p v_0 \beta}} - 1. \quad (12)$$

Решение системы уравнений (11) и (12) позволяет исследовать зависимость коэффициента объёмного сжатия вещества от термодинамических параметров (в частности, от величины внешнего давления, путём варьирования его значений в заданном диапазоне) и физических свойств вещества.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

При известных величинах [21,22]: w (энергия диссоциации атомов металла), p_0 (начальное давление), v_0 (удельный объём), C_v (удельная теплоёмкость при постоянном объёме), β (коэффициент объёмного расширения тела), a (константа при экспоненте потенциала Морзе),

система уравнений (10), (11) даёт возможность исследовать влияние на величину k внешнего давления p при всестороннем адиабатическом сжатии металла. Также, с помощью выражения (7) возможно оценить изменение температуры в процессе деформации. В результате вычислительного эксперимента было установлено, что коэффициент объёмного сжатия вещества при высоких давлениях квадратично убывает с возрастанием величины внешнего давления. Так, на рисунке показана кривая, которая позволяет оценить характер и величину изменения коэффициента объёмного сжатия железа в диапазоне давлений порядка 10^{10} - 10^{11} Па. Данная кривая получена в результате компьютерного расчета процесса обработки железа высоким внешним давлением порядка 10^{10} - 10^{11} Па, смоделированного с помощью системы уравнений (10) и (11).

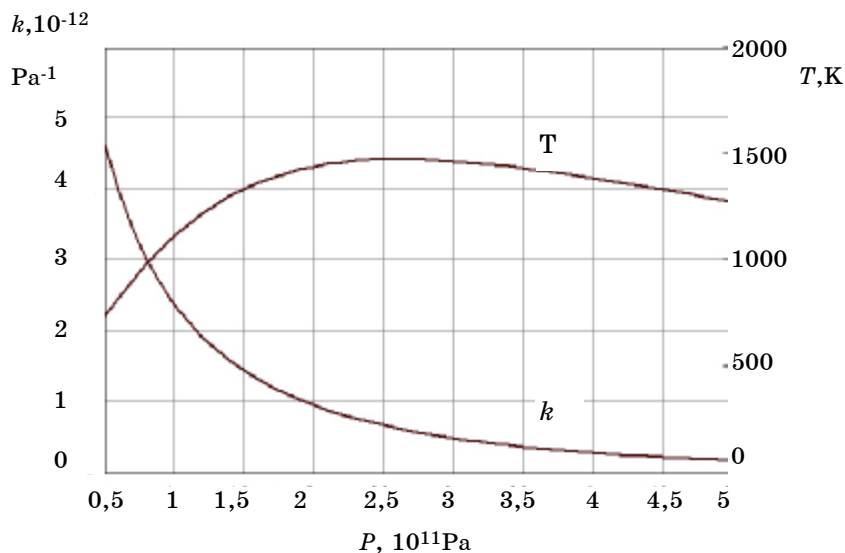


Рисунок 1 - Результаты компьютерного эксперимента по обработке железа высоким внешним давлением

ВЫВОДЫ

На основании расчётов, произведённых с помощью системы уравнений (10) и (11), изучена зависимость коэффициента объёмного сжатия вещества от давления и физических свойств материала. Результаты моделирования согласуются с экспериментальными данными и полученными ранее эмпирическими зависимостями для упругих адиабатических констант [21,22]. Значительное уменьшение величины данного коэффициента обусловлено сокращением межатомных расстояний r при обработке железа сверхвысоким давлением, соизмеримым с модулем Юнга.

Разработанный метод оценки может быть использован для изучения влияния высокого давления на величину k при различных исследованиях влияния высокого давления на физические свойства вещества и взаимосвязь термодинамических параметров при разработке новых технологических процессов.

SUMMARY

THE STUDYING OF HIGH PRESSURE INFLUENCE ON METAL MACROSCOPIC PARAMETERS

Mochalov A.A., Evfimko K.D.

*National University of Shipbuilding named after admiral Makarov
9, Geroyev Stalingrada Ave., Nikolayev, Ukraine, 54025
e-mail: idept@usmtu.edu.ua*

The theoretical method for studying the cubical compressibility coefficient of metal under the ultra high pressures is developed. The method of the cubical compressibility coefficient calculation based on Morse potential is presented for the uniform adiabatic compression process. The Fe cubical compressibility coefficient dependence on pressure and the temperature curve for 10^{10} - 10^{11} Pa adiabatic compression process are obtained.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Бейгельзимер Я.Е., Варюхин В.Н., Эфрос Б.М. Физическая механика гидростатической обработки материалов. – Донецк: ДонФТИ НАНУ, 2000.
2. В. Хермель, Т. Кайбак, В. Шатт и др. Процессы массопереноса при спекании. – Киев: Наукова думка, 1987.
3. Г.А. Фаркасов, А.Г. Фридман, В.М. Каринский. Плазменная плавка. – Москва: Металлургия, 1968.
4. Немков В.С., Полеводов Б.С. Математическое моделирование на ЭВМ устройств высокочастотного нагрева. – Ленинград: Машиностроение, 1980.
5. В.Г. Лисиенко, В.И. Лобанов, Б.И. Китаев. Теплофизика металлургических процессов. – Москва: Металлургия, 1982.
6. Ю.И. Розенгарт, Б.Б. Потапов, В.М. Ольшанский, А.В. Бородулин. Теплообмен и тепловые режимы в промышленных печах. - Киев-Донецк: Вища школа, 1986.
7. Цымбал В.П. Математическое моделирование металлургических процессов. – Москва: Металлургия, 1986.
8. Анищенко Л.М., Лавринюк С.Ю. Математические основы проектирования высокотемпературных технологических процессов. – Москва: Машиностроение, 1986.
9. Немзер Г.Г. Теплофизика кузнечно-прессового производства. – Ленинград: Машиностроение, 1988.
10. А.Г. Артамонов, В.М. Володин, В.Г. Авдеев. Математическое моделирование и оптимизация плазмохимических процессов. – Москва: Химия, 1989.
11. А.Г. Кобелев, И.Н. Потапов, Е.В. Кузнецов. Технология слоистых металлов. – Москва: Металлургия, 1991.
12. А.М. Кручинин, К.М. Махмудов, Ю.Н. Миронов и др. Автоматическое управление электротермическими установками. – Москва: Энергоиздат, 1990.
13. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах. - Киев: Наукова думка, 1987.
14. Бокштейн. Б.С. Диффузия в металлах. – Москва: Металлургия, 1978.
15. Гольдман Ф.М. Физический эксперимент и статистические выводы. – Ленинград: Изд-во ЛГУ, 1982.
16. Венгеров И.Р. Теплофизика деформируемых твердых тел // ФТВД. - 2006. - №1, Т.16. – С.7 .
17. Прут В.В. Адиабатическое сжатие вещества оболочкой // ЖТФ. – 2000. - №8. – С. 133.
18. Голубев В.К., Селезнев А.А. Использование двухчастичных потенциалов взаимодействия для молекулярно-динамического расчета изотермического, адиабатического и ударно-волнового сжатия металлов // ХФ. – 2002. – №10, Т.21. – С. 61.
19. Прозоров Л.В. Прессование металлов жидкостью высокого давления. – Москва, 2000.
20. Morse P.M. Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels // Phys. Rev. – 1929. - №34. –Р. 57.
21. Пью Х.Л. Механические свойства материалов под высоким давлением. –Москва: Мир, 1973.
22. Справочник физических констант горных пород / Г.Д. Афанасьев, Б.П. Великов, М.П. Воларович(ред). – Москва: Мир, 1969.

**Мочалов А.А., доктор техн. наук, профессор
кафедры физики;**

Евфимко К.Д., аспирант кафедры физики

Поступила в редакцию 16 февраля 2008 г.