Бурда М. Й., Дейнега Р.О., Михайлюк В.В., Петрик І.Я., Харламов Б.В.
(ІФНТУНГ, м. Івано-Франківськ)

ЗВ'ЯЗОК ЗМІНИ ХАРАКТЕРИСТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ КРИСТАЛІЧНОЇ ҐРАТКИ ІЗ ПРИХОВАНОЮ ТЕПЛОТОЮ ТВЕРДОФАЗОВОГО ПРЕТВОРЕННЯ

E-mail: iyap@ukr.net

Пластична деформація металів виникає як результат дії зовнішніх факторів, що призводить до складної реорганізації розміщення атомів в зернах металу і на їх границі. Враховуючи анізотропію матеріалів, зовнішній дія передається не всьому матеріалу одночасно, а певному його об’єму, утворюючи таким чином флуктуації температури та енергії. В областях де температура, яка відіграє в даному випадку роль критичного параметру, досягає певного значення, яке залежить від хімічного складу матеріалу, проходить його твердофазове перетворення. Існування високотемпературної чи низькотемпературної модифікацій кристалічної ґратки при критичній температурі має ймовірний характер. Одночасне існування двох кристалічних ґраток спричинює дефектну структуру матеріалу та впливає на його макроскопічні властивості. Такі властивості матеріалу як пластичність та втомна міцність пов’язані, передусім, з дефектами структури, що зароджуються і еволюціонують у кристалічній ґратці, які є наслідком спонтанних змін енергії в мікрооб’ємах де протікають твердофазові переходи. Цю енергію можна оцінювати через приховану теплоту перетворення. В даній роботі оцінюють приховану теплоту перебудови кристалічної ґратки при зміні характеристичних параметрів. Для цього розглянемо процес поліморфного перетворення з врахуванням теорії характеристичних коливань атомів кристалічної ґратки.

Розглянемо поліморфне перетворення як перехід від однієї кристалічної модифікації до іншої при певному критичному значенні температури $T_{кр}$. Приховану теплоту поліморфного перетворення шукаємо у вигляді:

$$Q = T_{кр} \Delta S , \quad (1)$$

де ΔS – величина приросту ентропії, яка зумовлена зміною характеру коливань атомів при поліморфному перетворенні.

Досліджено кристалічну ґратку, утворену N атомами [1]. Тоді коливальний рух ґратки визначаємо як сукупність 3N незалежних ліній гармонійних осциляторів. Вільна енергія, яка відповідає коливальному руху ґратки, має вигляд:

$$F = \frac{\hbar}{2}\sum_{\alpha=1}^{3N}\omega_{\alpha} + kT\sum_{\alpha=1}^{3N}\ln\left(1-\exp\left(-\frac{\hbar\omega_{\alpha}}{kT}\right)\right) \quad (2)$$

Знайдемо коливальну частину ентропії диференціюванням вільної енергії по температурі при постійному об’ємі $S = -(\partial F / \partial T)_V$.При диференціюванні всі величини частот коливань ω_α вважаються постійними, але в загальному випадку вони змінюються з температурою. Зміну ентропії ΔS шукаємо як різницю ентропії високотемпературної модифікації при критичній температурі S^+ і ентропії низькотемпературної модифікації при критичній температурі S^-. Зауважимо, що кожній кристалічній модифікації відповідають різні набори характеристичних частот $\omega_\alpha^+(T_{кр})$ та $\omega_\alpha^-(T_{кр})$. Використовуючи модель Дебая, замінимо частоти ω_α характеристичними температурами Дебая Θ_D^+ високотемпературної та Θ_D^- низькотемпературної модифікації. Обмежимося першим членом розкладу експоненти в ряд, тоді приріст коливальної частини ентропії, що зумовлена поліморфним перетворенням, буде мати вигляд:

$$\Delta S = 3Nk\ln\frac{\Theta_D^-}{\Theta_D^+}. \tag{3}$$

Таким чином, отримано формулу, яка характеризує приріст ентропії, а отже і приховану теплоту твердофазового претворення, як наслідок зміни характеристичних параметрів кристалічної ґратки.

Література:

1. Мельник П.І. Наближена оцінка взаємозв'язку енергії твердофазного перетворення в металах з прихованою теплотою процесу. / П.І. Мельник, І.Я. Петрик, В.М. Крамар, І.Й. Перкатюк. // Фізика і хімія твердого тіла. Т. 8, № 2 – 2007р. – с. 405-407.

Бутенко А.В., Брунеткин А.И., Демиденко В.Э.

(ОНПУ, г. Одесса)

МЕТОД ОБЕЗРАЗМЕРИВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

E-mail: butik-tks@ukr.net

Связь между единицами размерности и выражение единиц измерения классов через комбинации единиц других классов определяется структурой ММ и правилом размерности Фурье. Это является обобщением понятия размерности.

В физических законах, независимых от выбора системы единиц измерения, соотношения между масштабами размерных величин при изменении единиц измерения имеют вид: $\mu_i = \prod_j \mu_j^{\alpha_{ij}}, \quad i, j \in J_u$, где α_{ij} – соответствующий показатель степени; u – число размерных величин. Выполнив соответствующие преобразования, получим выражение для каждого обезразмеренного комплекса: $\pi_h = \prod_{q=1}^{q=u} p_q^{\alpha_{nq}}$, а ММ будет приведена к обезразмеренному виду, решение которой, если оно существует, может быть записано следующим образом: $\bar{\bar{y}} = f(\bar{\bar{s}}, \vec{\pi})$. Предлагается преобразование, позволяющее сократить мерность пространства, в котором решается задача. Выразим $p_q = \mu_q \cdot p_q^*, \quad \forall q \in J_u$. Здесь p, p^* - размерная и обезразмеренная величины ММ соответственно, q – количество переменных в ММ. При этом первые номера натурального ряда отводятся элементам кортежа $\bar{y}$ - всех размерных величин, входящих в ММ, последующие - $\bar{s}$ - величинам, определяющим координаты геометрического пространства и время и остальным размерным величинам ММ. В конечном итоге получим: $\prod_{q=1}^{q=u} \mu_q^{\alpha_{hq}} = 1, \quad \forall h \in J_t$. Логарифмирование выражения для «р» позволяет получить систему линейных однородных алгебраических уравнений $A_1 \cdot \vec{M} = 0$,

где $A_1 = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \cdots & \alpha_{1u} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha_{t1} & \alpha_{t2} & \cdots & \alpha_{tu} \end{bmatrix}$ - матрица показателей степеней α_{nq},