



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ДОНСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
КАФЕДРА «МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МЕТАЛЛОВ»

ТЕРМОДИНАМИКА НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ

Сборник методических указаний
к лабораторному практикуму

Ростов–на–Дону 2022

СОДЕРЖАНИЕ

ОБЩИЕ МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К ВЫПОЛНЕНИЮ ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА И ОФОРМЛЕНИЮ ОТЧЕТОВ	3
Лабораторная работа №1 РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ, ПОСТРОЕНИЕ И АНАЛИЗ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ЦИКЛА	6
Лабораторная работа №2 ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИРАЩЕНИЯ ЭНТРОПИИ ПРИ НАГРЕВАНИИ И ПЛАВЛЕНИИ ОЛОВА	10
Лабораторная работа №3 ПОСТРОЕНИЕ ДИАГРАММЫ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ СВИНЕЦ-ОЛОВО МЕТОДОМ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО РАСЧЕТА	14
Лабораторная работа №4 ПОСТРОЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ВОЗДУХА МЕТОДОМ ИЗМЕРЕНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТОКОВ	20
Лабораторная работа №5 ДВИЖЕНИЕ ТЕЛА В ДИССИПАТИВНОЙ СРЕДЕ	22
Лабораторная работа №6 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИССИПАТИВНОЙ СТРУКТУРЫ ЖИДКОСТИ ПРИ КОНВЕКТИВНОМ ТЕПЛООБМЕНЕ	27
Лабораторная работа №7 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ДИССИПАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ В АВТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ САМООРГАНИЗУЮЩИХСЯ ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ	31
Лабораторная работа №8 ИЗУЧЕНИЕ ЯВЛЕНИЙ СТРУКТУРНОЙ САМООРГАНИЗАЦИИ ПРИ ЗАКАЛКЕ И ОБЛУЧЕНИИ МЕТАЛЛОВ	37
Лабораторная работа №9 КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО СТРУКТУРО-ОБРАЗОВАНИЯ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ	45

ОБЩИЕ МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К ВЫПОЛНЕНИЮ ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА И ОФОРМЛЕНИЮ ОТЧЕТОВ

Курс «Термодинамика неравновесных процессов» нацелен на формирование научного, творческого подхода к решению практических задач, связанных с нестационарными, неравновесными потоками вещества, энергии и заряда в открытых физико-химических системах.

Основное назначение курса - получение знаний о современных методологических научных подходах, реализуемых в неравновесной термодинамике и применимых к описанию большого количества физико-химических процессов и явлений в природе, технике и промышленности; изучение основных законов и уравнений неравновесной термодинамики, их обоснования и методов использования при решении фундаментальных физических и прикладных технических задач.

Лабораторный практикум по курсу «Термодинамика неравновесных процессов» предполагает демонстрацию и закрепление на практике основных положений теории, а также приобретение студентами практических навыков по применению основных соотношений термодинамики необратимых процессов в теории неравновесных фазовых превращений и неравновесного структурообразования металлических сплавов; а также приобретение навыков по использованию полученных знаний для установления однозначной связи между потоками физических величин (массы, энергии, заряда и т.д.) и внешними силами, действующими на систему, и применению этих навыков для решения прикладных задач материаловедения и технологии материалов

Собранные в настоящем издании работы раскрывают роль термодинамических подходов и расчетов в изучении фундаментальных физических явлений: цикличности работы тепловых двигателей (№1); плавления и кристаллизации сплавов (№2,3); построении фазовых диаграмм состояния двухкомпонентных систем (№3). Способствуют приобретению навыков по выделению и измерению термодинамических потоков и сил (№4), по изучению явлений диссипации и формирования диссипативных структур (№5,6), по исследованию самоорганизующихся физико-химических систем (№7,8), по моделированию неравновесных процессов и структур в металлических сплавах (№9).

Лабораторный практикум выполняется на приборах и оборудовании лабораторий кафедры «Физическое и прикладное материаловедение» (ауд. 167, 220, 265, 267). Для полноценного выполнения лабораторного практикума необходима соответствующая теоретическая подготовка, которая наиболее полно дается в лекционном курсе, а в работах лабораторного практикума приводится в сжатом виде. С содержанием теоретического раздела, а также с методической частью работы студенту необходимо ознакомиться заранее. Объем лабораторно-практической части работы не позволяет преподавателю подробно останавливаться на других её разделах, поэтому к выполнению практикума могут быть допущены только подготовленные студенты. С методическим руководством к каждой лабораторной работе можно ознакомиться в читальном зале университета или на

кафедре. В работах лабораторного практикума приведены контрольные вопросы, позволяющие студенту проверить свою готовность к выполняемой работе.

При выполнении практикума студент должен соблюдать правила техники безопасности. Инструктаж по технике безопасности проводится преподавателем перед началом курса лабораторных работ.

Отчет по практикуму необходимо выполнять в отдельной тетради, на титульном листе которой пишется:

«Термодинамика неравновесных процессов»

Лабораторный практикум

Студента группы /наименование группы/ .

/Фамилия, имя, отчество/ .

Допускается оформление отчета на отдельных листах (двойные тетрадные листы в клетку или писчая бумага формата А4). В этом случае первая страница отчета является титульной, она должна иметь следующую форму:

ДГТУ

Кафедра «Физическое и прикладное материаловедение»

Лабораторная работа № ____

по дисциплине «Термодинамика неравновесных процессов»

/Название лабораторной работы/ .

Выполнил студент группы /наименование группы/ .

/Фамилия, имя, отчество студента/ .

Проверил /Фамилия, имя, отчество преподавателя/ .

Ростов-на-Дону, /год/ .

Отчет по лабораторной работе является документом учебного процесса и должен сохраняться в надлежащем виде до окончания изучения дисциплины (до конца экзаменационной сессии).

Объем отчета по одной работе обычно не превышает 3-4 страниц. Отчет должен соответствовать рекомендуемому содержанию, быть понятным, логичным, лаконичным, информативным, написанным без произвольных сокращений. Текст, иллюстративный и табличный материалы отчета должны соответствовать известным требованиям оформления отчетов о НИР (см., например, ГОСТ 2.105-95 ЕСКД или СТП ДГТУ 01-2001). В случае статистической обработки результатов эксперимента должны быть указаны доверительные интервалы экспериментально полученных значений и приведены графики полученных аппроксимирующих функций. Если аппроксимация экспериментальных зависимостей не проводится, экспериментально полученные значения должны быть соединены прямыми линиями. Отчет должен содержать заключение или выводы по работе.

Результатом выполнения ряда лабораторных работ являются экспериментальные данные. Для достоверности их определения необходимо получить массив измерений, не менее 5, и статистически его обработать, определив

среднее значение измеряемой величины \bar{X} , среднеквадратичное отклонение σ_X и доверительный интервал ΔX полученного значения X по формулам:

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n X_i ;$$

$$\sigma_X = \sqrt{\frac{1}{(n-1)} \cdot \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2} ;$$

$$\Delta X = \frac{t(P; n-1) \cdot \sigma_X}{\sqrt{n-1}} ,$$

где X_i – i -тое значение измеряемой величины X ;

P – заданный уровень надежности (доверительная вероятность);

$t(P, n-1)$ – квантиль распределения Стьюдента – нормированное отклонение, зависящее от доверительной вероятности и массива измерений n .

При решении научно-технических задач обычно используют $P=0,95$ или $0,99$. Значения для t -распределения Стьюдента приведены в таблице:

$n-1$	P		$n-1$	P	
	0,95	0,99		0,95	0,99
2	4,303	9,925	18	2,101	2,878
3	3,182	5,841	20	2,086	2,845
4	2,776	4,604	25	2,060	2,787
5	2,571	4,032	30	2,042	2,750
6	2,447	3,707	35	2,090	2,724
7	2,365	3,499	40	2,021	2,704
8	2,306	3,355	45	2,014	2,689
9	2,262	3,250	50	2,009	2,678
10	2,228	3,169	60	2,000	2,660
11	2,201	3,106	70	1,994	2,648
12	2,179	3,055	80	1,990	2,639
13	2,160	3,012	90	1,987	2,632
14	2,145	2,977	100	1,984	2,626
15	2,131	2,947	∞	1,960	2,576
16	2,120	2,921			

Примечания: 1. Интерполяция допустима только по аргументу $n-1$.

2. Для значений $(n-1) > 100$ значения $t(P, n-1)$ с точностью до 0,001 можно вычислить по формулам:

$$t(0,95; n-1) = 1,960 + 2,4 / (n-1) ;$$

$$t(0,99; n-1) = 2,576 + 5,0 / (n-1) .$$

Лабораторная работа №1
РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ, ПОСТРОЕНИЕ И АНАЛИЗ
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ЦИКЛА

ЦЕЛЬ РАБОТЫ: исследование адиабатно-изохорно-изотермического цикла и измерение отношения изобарной и изохорной теплоемкостей воздуха.

ОБОРУДОВАНИЕ: стеклянный баллон с пробкой и двумя кранами, жидкостный манометр, ручной насос, резиновые трубки.

1. ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Цикл, исследуемый в работе, имеет практическое значение для работы малых холодильных установок (в частности, в охладителях электронных блоков).

1. Теплоемкость. По первому началу термодинамики, сообщенное системе количество теплоты расходуется на увеличение внутренней энергии системы и совершение системой работы.

$$dQ = dU + dA$$

При изохорном нагревании газа работа газа $dA = pdV$ равна нулю, так как $dV = 0$, поэтому теплоемкость dQ/dT в этом случае составляет (в расчете на 1 моль):

$$C_V = \frac{dU}{dT} = \frac{d}{dT} \left(\frac{i}{2} RT \right),$$

где $U = \frac{i}{2} RT$ - внутренняя энергия одного моля идеального газа, i - число степеней свободы молекулы газа.

Следовательно, молярная изохорная теплоемкость:

$$C_V = \frac{i}{2} R \quad (1)$$

При изобарном нагревании ($p = \text{const}$) 1 моль расширяющегося газа совершает работу $P \cdot dV = R \cdot dT$. Теперь $dQ = C_V \cdot dT + R \cdot dT$, поэтому изобарная молярная теплоемкость:

$$C_p = \frac{dQ}{dT} = C_V + R = \left(\frac{i}{2} + 1 \right) R. \quad (2)$$

Отношение теплоемкостей

$$\gamma = \frac{i+2}{i} > 1 \quad (3)$$

Для двухатомной молекулы $i = 5$.

2. Энтропия. Внутренняя энергия U системы не может быть целиком превращена в работу. Если система находится в тепловом равновесии со средой, имеющей

температуру T_0 , из энергии U системы в виде работы отдается, не более чем $U - T_0 \cdot S$. Величину S называют энтропией, а $T_0 \cdot S$ - связанной энергией. Связанная энергия может быть передана только теплообменом.

Так как связанная энергия пропорциональна энтропии, энтропия характеризует обесцененность энергии системы: S возрастает во всех процессах, уменьшающих способность системы производить работу. В квазистатическом процессе при сообщении системе с температурой T теплоты ΔQ увеличение энтропии составляет:

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{T} \quad (4)$$

Отнятие от системы теплоты (а с ней и энтропии) с передачей среде с той же (или более высокой) температурой, требует затраты работы извне. (По второму началу термодинамики, самопроизвольно могут протекать лишь процессы, происходящие с увеличением энтропии, например, передача теплоты от более нагретого тела к более холодному).

3. Холодильный коэффициент. Холодильным коэффициентом называют отношение ε количества теплоты, отнятой газом у охлаждаемого тела, к результирующей работе. Для SVT -цикла $\varepsilon = Q_{23} / (A_{31} - A_{12})$. Или, поскольку $Q_{23} = A_{12}$, то

$$\varepsilon = \frac{A_{12}}{A_{31} - A_{12}}. \quad (5)$$

Цикл, проводимый в обратном направлении, осуществляет преобразование теплоты в работу. Коэффициент полезного действия такого цикла

$$\eta = 1 - \frac{A_{12}}{A_{31}} \quad (6)$$

4. Экспериментальное значение γ . Оно может быть найдено как отношение угловых коэффициентов адиабаты и изотермы, поскольку из уравнений S - и T -процессов ($PV^\gamma = \text{const}$ и $PV = \text{const}$) следует

$$\left(\frac{dp}{dV} \right)_S = -\gamma \frac{p}{V}, \left(\frac{dp}{dV} \right)_T = -\frac{p}{V}.$$

Равенство $\left(\frac{dp}{dV} \right)_S = \gamma \left(\frac{dp}{dV} \right)_T$ выполняется для dp/dV при любом заданном V , значит, оно выполняется и для средних значений, которые на интервале $\Delta V = V_2 - V_1$ (см. рисунок 1) равны соответственно $\Delta p_1 / \Delta V$ и $(\Delta p_1 - \Delta p_3) / \Delta V$, где Δp_1 и Δp_3 - давления, избыточные над атмосферным p_2 . Отсюда:

$$\gamma = \frac{\Delta p_1}{\Delta p_1 - \Delta p_3} \quad (7)$$

Обозначим разность уровней жидкости в манометре через h_1 и h_3 соответственно, тогда

$$\gamma = \frac{\rho \cdot g h_1}{\rho \cdot g h_1 - \rho \cdot g h_3} = \frac{h_1}{h_1 - h_3} \quad (8)$$

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Прибор, применяемый в этой работе, представляет собой стеклянный баллон объемом V_2 , заполненный воздухом и плотно закрытый пробкой (рисунок 2). Баллон соединен с атмосферой с помощью крана K и жидкостным манометром. В баллон, первоначально открытый на атмосферу, насосом накачивают воздух, поддерживая температуру газа в баллоне равной температуре окружающей среды (изотермическое сжатие). В результате воздух внутри баллона сжат добавочно нагнетанным воздухом до давления $p_1 = p_2 + \Delta p_1$ (состояние 1 на рисунке 1). Работа, затраченная на сжатие газа, превращается в теплоту, которая отводится через стенки баллона в атмосферу.

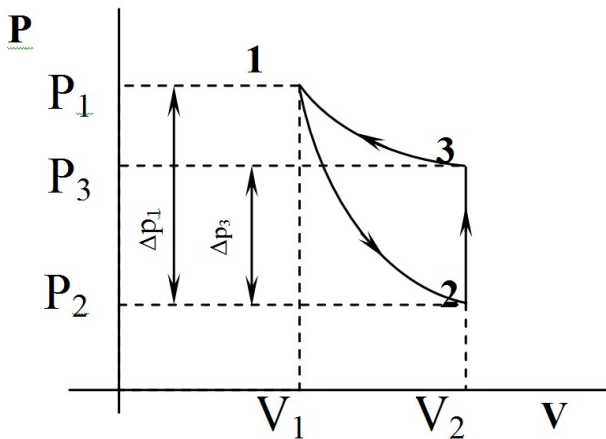


Рисунок 1 - Диаграмма цикла

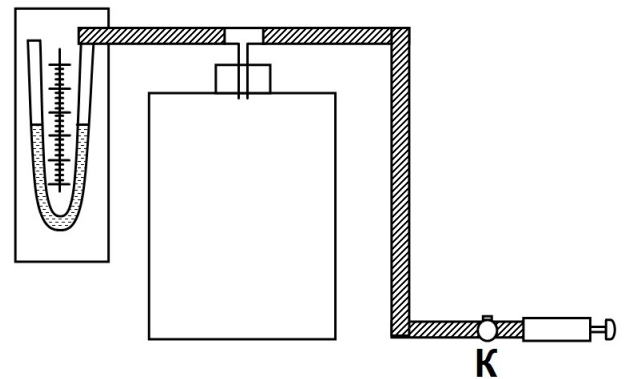


Рисунок 2 - Экспериментальная установка

Переключают кран на атмосферу, чтобы произошло расширение газа до давления p_2 (состояние 2 на рисунке 1). Процесс должен происходить достаточно быстро, чтобы считать его адиабатным. Работа расширения A_{12} совершается за счет убыли внутренней энергии газа

$$\Delta U = \frac{i}{2} R(T_2 - T_1) = C_v(T_2 - T_1)$$

и газ охлаждается.

Закрыв кран, отключают баллон от атмосферы. При этом газ изохорно нагревается вследствие теплообмена с окружающей средой через стенки баллона. Давление достигнет некоторого значения $p_2 + \Delta p_3$ (состояние 3 на рисунке 1). Работа в этом процессе не совершается, внутренняя энергия газа увеличивается за счет сообщаемой ему теплоты $Q_{23} = C_v \cdot (T_1 - T_2)$, это количество теплоты газ отнимает у внешней среды (атмосферы или какого-либо охлаждаемого тела).

Воздух, совершающий переходы между указанными состояниями, занимает в состояниях 2 и 3 весь предоставленный объем баллона V_2 . В состоянии 1 этот воздух сжат до меньшего объема V_1 дополнительно накачанным воздухом.

3. ПРОВЕДЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

1. Насосом накачайте в баллон воздух до давления 0,9 от предельного по шкале манометра и закройте кран. Когда воздух в баллоне охладится до комнатной температуры (перестанет уменьшаться давление в баллоне), запишите установившееся значение избыточного давления Δp_1 (или h_1).
2. Откройте кран на атмосферу. Как только избыточное давление в баллоне упадет до нуля, закройте кран. Когда воздух в баллоне нагреется до комнатной температуры (перестанет увеличиваться давление в баллоне), запишите значение установившегося избыточного давления Δp_3 (или h_3). Повторите эксперимент 10 раз.
3. По барометру и термометру в лаборатории определите атмосферное давление p_2 и температуру воздуха T_1 . Объем баллона V_2 указан на приборе.

4. ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ

1. Вычислите по формуле (8) значения y_i для каждой пары значений Δp_1 и Δp_3 (соответственно h_1 и h_3). Найдите среднее значение $\langle y \rangle$ и погрешность $\Delta \langle y \rangle$ с доверительной вероятностью $p=95\%$

$$\langle y \rangle = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} \quad (9)$$

$$\Delta \langle y \rangle = t_{pn} \left(\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \langle y \rangle)^2}{n(n-1)} \right)^{1/2} \quad (10)$$

где t_{pn} - коэффициент Стьюдента, n - число измерений. Для $n=10$ и $p=95\%$ коэффициент Стьюдента $t_{pn}=2,262$

2. Результаты эксперимента и расчеты погрешностей занесите в таблицу результатов измерений и вычислений

№ п/п	h_1 , см	h_3 , см	$y_i = \frac{h_{1i}}{h_{1i} - h_{3i}}$	$\langle y \rangle$	$(y_i - \langle y \rangle)$	$(y_i - \langle y \rangle)^2$	$\Delta \langle y \rangle$	
1								
...								

10								
----	--	--	--	--	--	--	--	--

5. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Какой процесс называется адиабатным? Выведите уравнение Пуассона.
2. Как и почему меняется температура газа в баллоне при проведении эксперимента?
3. Какая из теплоемкостей больше и почему? Выведите уравнение Майера.
4. Что такое число степеней свободы? Как оно связано с γ ? Зная γ (из опыта), рассчитайте число степеней свободы молекул воздуха.
5. Нарисуйте на P - V диаграмме последовательно все процессы, происходящие с газом.

Лабораторная работа №2

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИРАЩЕНИЯ ЭНТРОПИИ ПРИ НАГРЕВАНИИ И ПЛАВЛЕНИИ ОЛОВА

ЦЕЛЬ РАБОТЫ: получение диаграммы нагревания и охлаждения олова, определение температуры плавления и приращение энтропии олова.

ОБОРУДОВАНИЕ: кварцевый тигель с оловом, термopара, вольтметр, стабилизированный источник тока, градуировочная кривая термopары, секундомер.

1. ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Переход кристаллического твёрдого тела в жидкое (плавление) и обратно (кристаллизация) относятся к фазовым превращениям первого рода, при которых скачком изменяется плотность, внутренняя энергия, энтропия тела. При этом поглощается (при плавлении) или выделяется (при кристаллизации) энергия, называемая теплотой плавления (кристаллизации). Если давление не меняется, то температура тела во время фазового перехода остаётся постоянной. *Энтропией* системы называется однозначная функция состояния, приращение которой равно количеству тепла, обратимо подводимому к системе, делённому на абсолютную температуру, при которой это тепло подводится $dS = \frac{dQ}{T}$. Энтропия характеризует степень беспорядочности теплового движения частиц в системе.

Олово, как металл, имеет кристаллическую структуру, то есть характеризуется упорядоченным пространственным расположением атомов, в расположении которых реализуется дальний порядок. Идеализированная кривая нагрева и плавления олова имеет вид, изображенный на рисунке 1 слева.

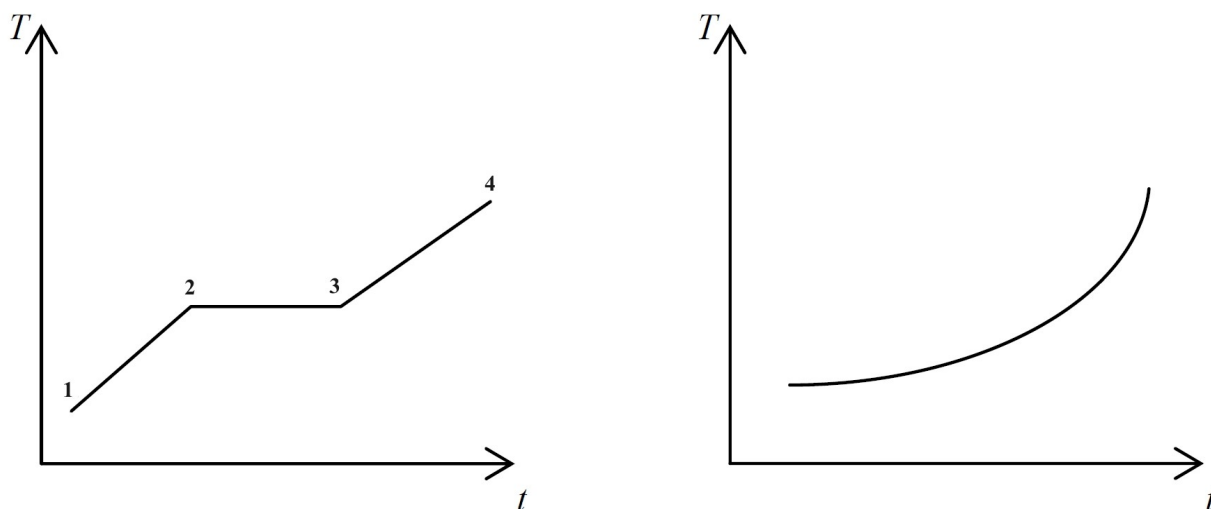


Рисунок 1 - Кривые нагрева кристаллического (слева) и аморфного (справа) тел

Участок 1–2 графика соответствует нагреву олова до температуры плавления $T_{\text{пл}}$. С повышением температуры увеличивается интенсивность теплового хаотического движения атомов и амплитуда их колебаний. При дальнейшем нагреве начинается процесс плавления, в течение которого температура олова остаётся неизменной (участок 2–3). При $T = T_{\text{пл}}$, амплитуда колебаний атомов становится настолько большой, что начинается диссоциация (разрушение) кристаллической решётки, на что расходуется вся подводимая извне теплота. Увеличивается хаотичность в расположении атомов, исчезает дальний порядок, энтропия системы резко возрастает. Изменение энтропии ΔS при нагреве и плавлении олова складывается из изменения энтропии ΔS_1 при нагревании от начальной температуры $T_{\text{н}}$ до температуры плавления $T_{\text{пл}}$ и изменения энтропии ΔS_2 при плавлении олова:

$$\Delta S = \Delta S_1 + \Delta S_2 ,$$

где

$$\Delta S_1 = \int_{T_{\text{н}}}^{T_{\text{пл}}} \frac{dQ}{T} = \int_{T_{\text{н}}}^{T_{\text{пл}}} \frac{cm dT}{T} = cm \ln \frac{T_{\text{пл}}}{T_{\text{н}}} ; \Delta S_2 = \int_2^3 \frac{dQ}{T} = \frac{\lambda m}{T_{\text{пл}}}$$

Окончательно получаем:

$$\Delta S = cm \ln \frac{T_{\text{пл}}}{T_{\text{н}}} + \frac{\lambda m}{T_{\text{пл}}} \quad (1)$$

где m – масса олова; c – удельная теплоёмкость олова; λ – удельная теплота плавления олова.

В аморфных телах, к которым относятся стекло, парафин, воск, полистирол и др., реализуется ближний порядок во взаимном расположении атомов. Это означает, что упорядоченное расположение частиц по отношению к любой выбранной частице наблюдается только в пределах малого объёма. Кривая нагрева, например полистирола (рисунок 1 справа), отличается от кривой нагревания олова: для аморфных тел нет определённой температуры перехода в жидкое состояние, можно

указать лишь интервал температур, в пределах которого происходит размягчение тела.

Для измерения температуры олова в данной работе используется термопара (тип которой определяется во время проведения занятия). Действие термопары основано на том, что в спаяе двух разнородных проводников возникает контактная термоэлектродвижущая сила, примерно пропорциональная температуре спая. Так называемый «горячий» спай приводят в контакт с испытуемым телом, а роль «холодных» спаев выполняют контакты термопары с клеммами вольтметра, которые имеют комнатную температуру ($\sim 25^\circ\text{C}$). Градуировка термопары обычно приводится в виде графика (вид которого определяется типом термопары).

2. ОПИСАНИЕ УСТАНОВКИ

Схема установки приведена на рисунке 2. В кварцевом тигле 1 находится олово. Нагрев спирали 2 осуществляется от стабилизированного источника тока. Скорость нагрева зависит от напряжения U источника. Внутри исследуемого вещества (олова) помещён «горячий» спай термопары 3. Для измерения величины термо-ЭДС используется комбинированный цифровой прибор (вольтметр – на схеме mV).

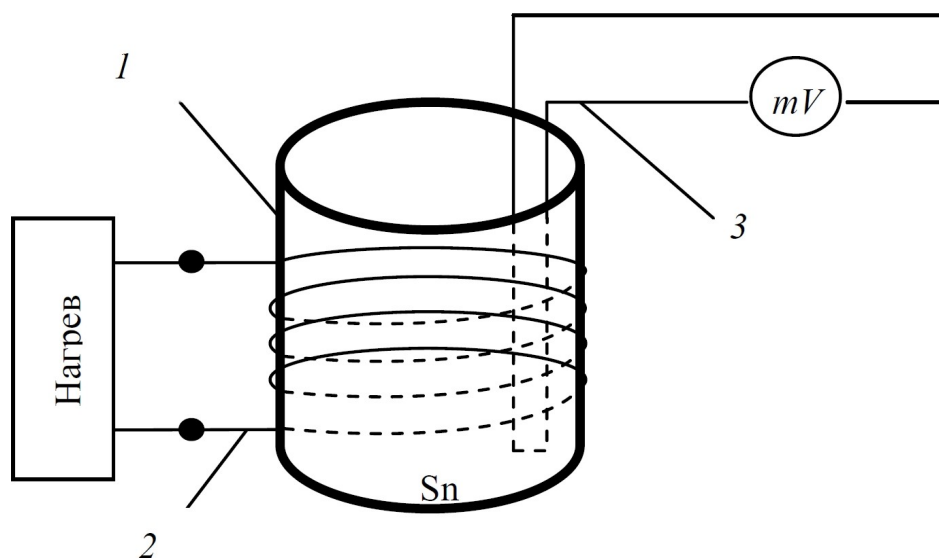


Рисунок 2 - Схема установки

3. ХОД РАБОТЫ

1. Ознакомьтесь с установкой.
2. Включите стабилизированный источник тока (предварительно отсоединив от его клемм нагревательный элемент). По указанию преподавателя или лаборанта установите необходимую величину выходного напряжения, определяющую нужную скорость нагрева. Выключите прибор, присоедините нагревательный элемент.

3. Включите цифровой прибор (вольтметр). Поставьте переключатель прибора в положение измерения напряжения (U). Запишите начальное значение измеряемого напряжения.
4. Пустите секундомер и одновременно включите нагрев (стабилизированный источник тока). Через каждые 30 с записывайте значения измеряемого напряжения в «Таблицу экспериментальных данных»:

№ измерения	Значение напряжения U_i , мВ	Значение температуры T_i , °C
1		
2		
3		
...		

5. Когда напряжение достигнет определённой величины, задаваемой преподавателем или лаборантом ($\sim 9,2$ мВ), выключите нагрев и снова через каждые 30 с записывайте показания прибора в таблицу. Продолжать измерения следует в течение ~ 10 мин.
6. Выключите цифровой прибор (вольтметр).

4. ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ

1. Для каждого значения измеренного напряжения найдите соответствующее значение температуры, пользуясь градуировочным графиком, и запишите в «Таблицу экспериментальных данных».
2. Постройте графики зависимости температуры t °C от времени при нагреве и охлаждении олова. Их примерный вид показан на рисунке 3. Пользуясь графиками, найдите температуру плавления олова по выражению:

$$t_{\text{пл}}^{\circ} = \frac{t_{\text{пл}}^{\circ(1)} + t_{\text{пл}}^{\circ(2)}}{2}$$

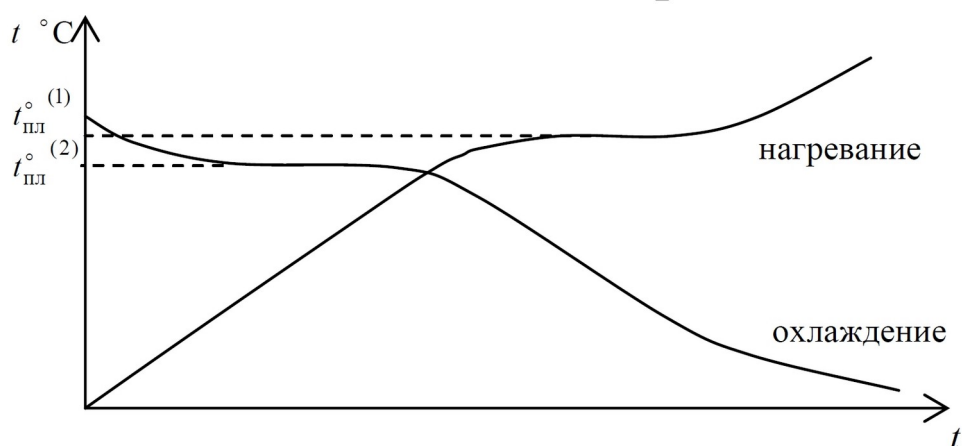


Рисунок 3 -
Примерный вид
экспериментал
ьных кривых
нагрева и
охлаждения
олова

3. Вычислите приращение энтропии ΔS при нагревании олова от 50°C до температуры плавления ($T_{\text{пл}}$, К) и его при плавлении по формуле (1), приняв следующие значения величин:

$$T_{\text{пл}} = t_{\text{пл}}^{\circ} + 273; \quad T_{\text{н}} = 323 \text{ К}; \quad m^* = 20 \text{ г}; \quad c = 230 \text{ Дж}/(\text{кг}\cdot\text{К}); \quad \lambda = 5,86 \cdot 10^4 \text{ Дж/кг}$$

* - при проведении эксперимента значение m может отличаться от указанного.

5. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Определение энтропии и её свойства, статистический смысл.
2. Второе начало термодинамики.
3. Понятие фазового перехода.
4. Кривая нагрева и плавления олова, кривая нагрева аморфного вещества.
5. Принцип действия термопары.

Лабораторная работа №3

ПОСТРОЕНИЕ ДИАГРАММЫ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ СВИНЕЦ-ОЛОВО МЕТОДОМ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО РАСЧЕТА

ЦЕЛЬ РАБОТЫ: приобретение практических навыков в области геометрической термодинамики для построения диаграмм состояния двухкомпонентных систем.

1. ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

Диаграммы состояния представляют собой теоретическую основу для изучения реальных машиностроительных сплавов. Построение диаграмм возможно экспериментальным (методом термического анализа) и теоретическим (методом термодинамических расчетов) путями. Для повышения надежности результатов построения наиболее целесообразно использовать оба метода, взаимодополняющих друг друга.

В основе равновесной термодинамики лежит принцип, согласно которому любая термодинамическая система выбирает из всех возможных состояний такое, которое обладает минимальным значением термодинамического потенциала G . Состояние системы с $G=G_{\min.}$ называется равновесным. Оно не изменяется со временем.

Такая термодинамическая система, как двухкомпонентный сплав, состоит из двух типов частиц - атомов компонентов А и В. В состоянии равновесия энергия системы (G) должна быть равномерно распределена между различными частями (фазами) системы. Если этой равномерности нет, то в системе начинается движение атомов А и (или) В в направлении выравнивания энергии фаз. Для характеристики однородности G в системе используется понятие химического потенциала компонентов μ_A и μ_B , которые представляют собой парциальные доли G в расчете на атом каждого сорта А и В: $\mu_A = \partial G / \partial N_A$, $\mu_B = \partial G / \partial N_B$, где N_A и N_B - количество в системе атомов компонентов А и В соответственно.

Поэтому для многокомпонентных и многофазных систем к термодинамическому условию равновесия системы, характеризующемуся значением $G_{\min.}$, необходимо добавить химическое (концентрационное) условие равновесия, то есть равенство химических потенциалов компонентов во всех фазах.

Например, для двухкомпонентной системы А-В, состоящей из кристаллических фаз α и β : $\mu_A^\alpha = \mu_B^\alpha$; $\mu_A^\beta = \mu_B^\beta$

Геометрической интерпретацией химического потенциала компонентов, например, в фазе α при их взаимной концентрации x является касательная к фазовой кривой G^α в заданной точке x , а значениями μ_A и μ_B являются точки пересечения этой касательной с соответствующими осями чистых компонентов А и В ($x=0$ и $x=1$).

Диаграммы состояния двухкомпонентных систем строятся в координатах: температура T - концентрация компонентов x ($0 < x < 1$). Такой внешний термодинамический фактор как давление считается постоянным, равным 1 атм, и в качестве параметра системы не рассматривается. Эти диаграммы являются равновесными, то есть на них показывается фазовое состояние системы, обладающее при заданных T и x минимальным значением G .

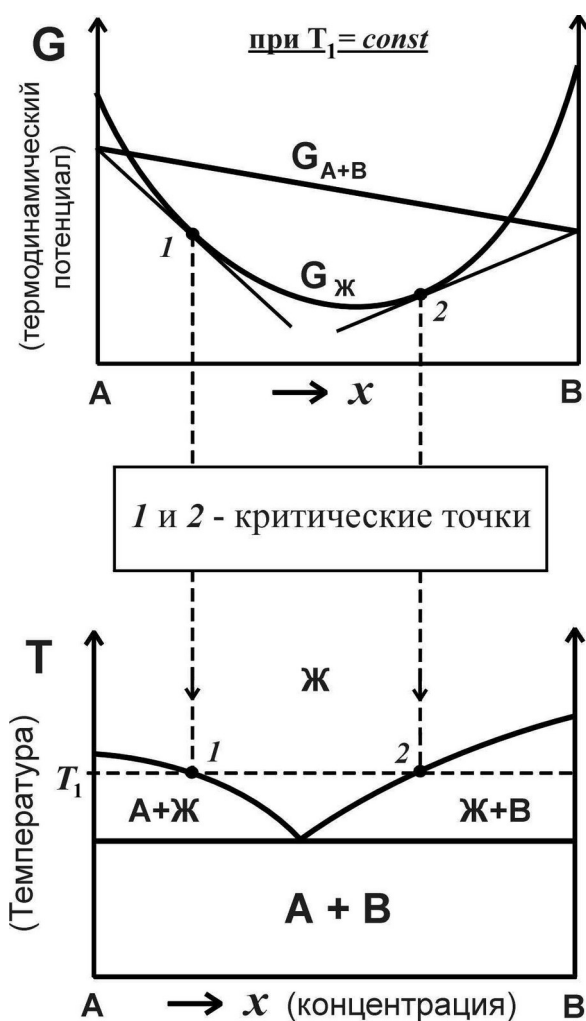


Рисунок 1 – Принцип построения диаграмм состояния на основе геометрической термодинамики

При построении диаграмм состояния методом термодинамического расчета задача заключается в том, чтобы определить: какая из возможных фаз системы при заданных условиях T и x является равновесной. То есть необходимо определить области в системе координат T - x , где выполняются оба условия равновесия. Для этого обычно в качестве фиксированного параметра принимается температура T и для выбранных значений T строятся термодинамические диаграммы в координатах G - x (рисунок 1). На этих диаграммах показываются зависимости $G(x)$, рассчитанные для всех возможных фаз системы, и определяются критические точки, разделяющие концентрационные интервалы существования различных фаз системы.

Для двухфазных областей системы на диаграммах G - x отмечается условие химического (концентрационного) равновесия в виде единой касательной к фазовым кривым $G(x)$ в тех смежных областях, где соседствующие фазы обладают G_{\min} . Подоб-

ные диаграммы G - x строятся для определенного набора значений T , а затем полученные критические точки концентраций для каждого T переносятся на диаграмму состояния T - x . Схема реализации описанного термодинамического метода построения диаграмм показана на рисунке 1.

2. МЕТОДИКА ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

Задачей лабораторного практикума является построение диаграммы состояния двухкомпонентной системы Pb-Sn по термодинамическим данным.

2.1. Условия построения диаграммы состояния Pb-Sn.

Система Pb-Sn имеет диаграмму состояния с простой эвтектикой. Будем считать, что компоненты Pb и Sn в жидком состоянии неограниченно растворимы и образуют химически и физически однородный жидкий раствор, а в твердом состоянии взаимно

нерастворимы. Также примем, что Pb и Sn не имеют полиморфных превращений и не образуют между собой промежуточных соединений.

2.2. Исходные термодинамические данные индивидуальных компонентов:

Элемент	Равновесная температура кристаллизации T_K , К	Значение энтальпии (внутренней энергии) H_0 при 0К, Дж / моль
Температурные зависимости приведенного термодинамического потенциала Φ_T^0 для кристаллического Φ_{TS}^0 (верхняя строка) и жидкого Φ_{TL}^0 (нижняя строка) состояний элемента, Дж / (моль · К)		
Sn	505	301308
$142.6494 + 34.297 \ln(T \cdot 10^{-4}) - 0.0012305(T \cdot 10^{-4})^{-2} + 0.38453(T \cdot 10^{-4})^{-1} - 149.785(T \cdot 10^{-4}) + 846.567(T \cdot 10^{-4})^2$ $131.1917 + 25.184 \ln(T \cdot 10^{-4}) + 0.004094(T \cdot 10^{-4})^{-2} - 0.816(T \cdot 10^{-4})^{-1} + 10.525(T \cdot 10^{-4}) - 2.717(T \cdot 10^{-4})^2$		
Pb	600	195873
$123.4107 + 24.489 \ln(T \cdot 10^{-4}) - 0.000226(T \cdot 10^{-4})^{-2} + 0.098097(T \cdot 10^{-4})^{-1} + 44.77(T \cdot 10^{-4})$ $163.2712 + 36.287 \ln(T \cdot 10^{-4}) - 0.001579(T \cdot 10^{-4})^{-2} + 0.05193(T \cdot 10^{-4})^{-1} - 51.4(T \cdot 10^{-4}) + 68.55(T \cdot 10^{-4})^2 - 36.25(T \cdot 10^{-4})^3$		

2.3. Для чистых компонентов в условиях постоянного давления значения $G(T)$ рассчитываются по следующим выражениям:

$$G_S(T) = H_0 - \Phi_{TS}^0 \cdot T \quad [\text{Дж / моль}] \quad \text{для кристаллического;}$$

$$G_L(T) = H_0 - \Phi_{TL}^0 \cdot T \quad [\text{Дж / моль}] \quad \text{для жидкого состояния.}$$

Во всех расчетах температура берется в градусах Кельвина.

2.4. Принять в качестве переменной x концентрацию свинца Pb так, чтобы $x=0$ при 0% Pb и $x=1$ при 100% Pb.

2.5. Для заданной температуры T_R рассчитать зависимость $G_S(x)$ для кристаллического состояния системы несмешивающихся компонентов Sn и Pb по формуле:

$$G_S(x) = (1-x) \cdot G_S^{\text{Sn}} + x \cdot G_S^{\text{Pb}}$$

2.6. Поскольку последняя зависимость представляет собой прямую, то достаточно вычислить две ее точки (например, при $x=0$ и $x=1$) и через них провести график $G_S(x)$ на термодинамической диаграмме в координатах $G-x$, соответствующей фиксированной температуре T_R .

2.7. При образовании однородного неограниченного раствора компонентов в жидком состоянии зависимость $G_L(x)$ является нелинейной за счет свободной энергии смешения $\Delta G(x)$, которая складывается из энергии активации диффузии атомов E_D и энтропии смешения ΔS :

$$E_D(T) = Z \cdot T_K \cdot [\exp(T_K / T) - \exp(T / T_K)] \quad \text{в Дж / моль;}$$

$$\Delta S(x) = k \cdot A \cdot \ln(A) \cdot [1 - (1-x) \cdot (1 + \ln(1-x)) - x \cdot (1 + \ln(x))];$$

$$\Delta G(x) = (1-x) \cdot E_D^{Sn} + x \cdot E_D^{Pb} - T \cdot \Delta S \quad \text{в Дж / моль};$$

где $Z = 261$ Дж/(моль · К) - координационная константа системы Sn–Pb;

$k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж / К - постоянная Больцмана;

$A = 6,022 \cdot 10^{23}$ - число Авогадро;

ΔS измеряется в Дж / (моль · К).

Для облегчения процессов вычислений и построения графиков величину W в квадратных скобках в формуле для $\Delta S(x)$ можно приближенно принимать равной:

x : 0.....0,2.....0,3.....0,5.....0,7.....0,8.....1,0

$W(x)$: 0.....0,5.....0,611.....0,693.....0,611.....0,5.....0

2.8 Для заданной температуры T_R рассчитать зависимость $G_L(x)$ для жидкого состояния системы Sn–Pb по формуле:

$$G_L(x) = (1-x) \cdot G_L^{Sn} + x \cdot G_L^{Pb} + \Delta G(x)$$

2.9. По результатам расчетов построить график $G_L(x)$ на термодинамической диаграмме в координатах G – x , соответствующей фиксированной температуре T_R .

2.10. Если полученные графики $G_S(x)$ и $G_L(x)$ пересекаются, то необходимо с помощью условия химического (концентрационного) равновесия определить концентрационные интервалы существования двухфазных областей. Для этого необходимо построить касательные к графику $G_L(x)$, как показано на рисунке1, и найти критические точки концентрации компонентов x для заданной температуры T_R .

2.11. Построить термодинамические диаграммы (в координатах G – x) для полного набора фиксированных температур $T_R(K)$. Состав набора определяется преподавателем и должен включать не менее 5 значений, например: 600, 550, 505, 480, 456. Для каждой фиксированной температуры на соответствующей термодинамической диаграмме определяются критические точки, которые переносятся на диаграмму состояния (в координатах T – x), как показано на рисунке1.

2.12. По полученным критическим точкам строится диаграмма состояния системы Sn–Pb с простой эвтектикой, состоящей из чистых компонентов (см. нижнюю диаграмму на рисунке 1).

3. ПОРЯДОК ОФОРМЛЕНИЯ ОТЧЕТА

3.1. Цель работы.

3.2. Краткая сущность метода построения диаграмм состояния по термодинамическим данным.

3.3. Исходные термодинамические данные индивидуальных компонентов (Pb и Sn).

3.4. Расчетные формулы, используемые в работе.

3.5. Результаты расчетов в виде таблицы 1:

Таблица 1 - Расчетные термодинамические данные (в кДж / моль) для заданной температуры T_R

T_R, K	G_S^{Sn}	G_S^{Pb}	G_L^{Sn}	G_L^{Pb}	E_D^{Sn}	E_D^{Pb}	$\Delta G(x)$ при значениях x				
							0,2	0,3	0,5	0,7	0,8

					-	-	$G_L(x)$ при тех же значениях x				

3.6. Термодинамическая диаграмма (в координатах $G-x$) для заданного значения T_R , построенная по данным таблицы 1.

3.7. Критические точки на диаграмме $G-x$ для температуры T_R .

3.8. Критические точки для всего набора значений T_R , заданного преподавателем, представленные в виде таблицы 2.

Таблица 2 - Критические точки диаграммы состояния системы Sn–Pb, полученные по данным термодинамических расчетов

Набор заданных значений температур T _R , K	Критические концентрации x (верхняя строка) и фазовые области слева и справа от критической точки (нижняя строка)			
T ₁ =600				
T ₂ =550				
T ₃ =505				
T ₄ =480				
T ₅ =456				

3.9. Диаграмма состояния системы Sn–Pb, построенная по полученным критическим точкам путем их параллельно-последовательного переноса на координатную систему $T-x$ (схематически процесс графического построения диаграммы состояния показан на рисунке 2).

3.10. Выводы по результатам работы.

4. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

4.1. Какова основная термодинамическая характеристика (функция) термодинамической системы и от каких параметров она зависит?

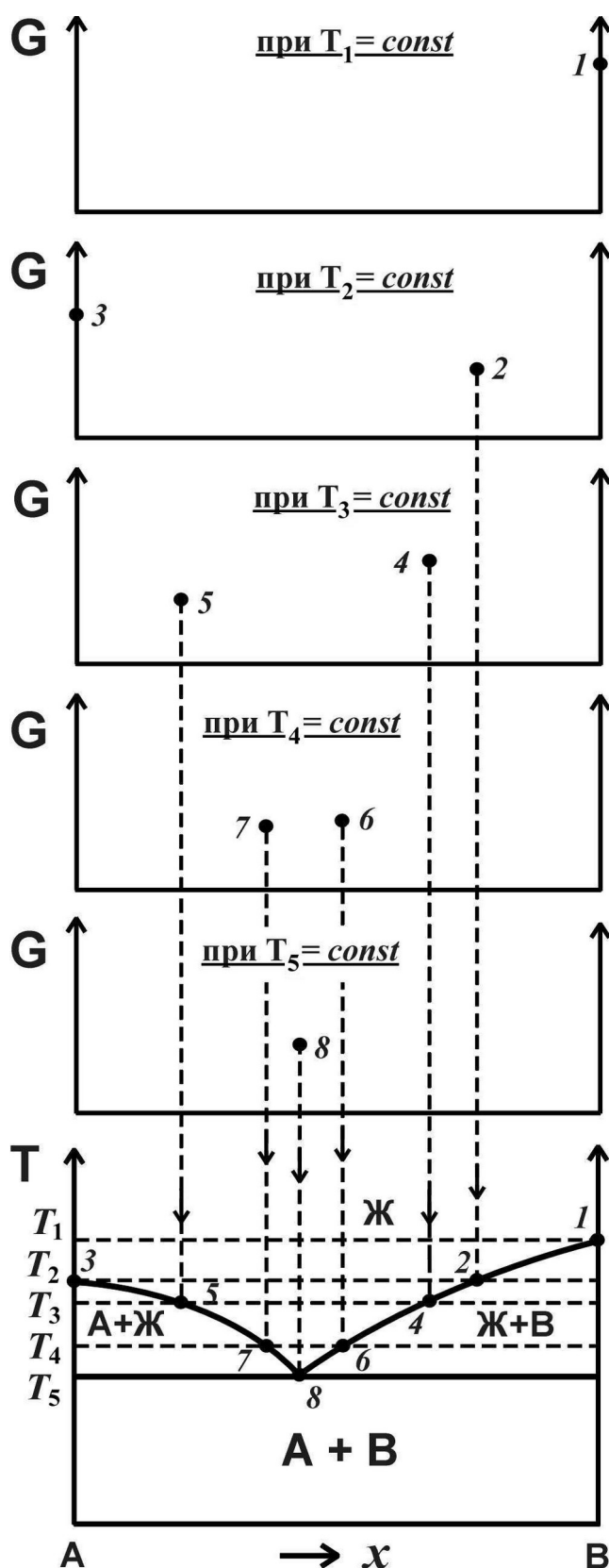


Рисунок 2 – Порядок построения диаграммы состояния сплава Sn-Pb

4.2. В чем заключается понятие химического потенциала компонентов системы и для описания какой характеристики системы оно используется?

4.3. Каково основное термодинамическое условие (принцип) равновесного состояния системы?

4.4. В чем заключается дополнительное условие термодинамического равновесия для многокомпонентных и многофазных систем?

4.5. Почему термодинамический метод построения диаграммы состояния, используемый в данной лабораторной работе, называют геометрической термодинамикой?

4.6. Какова геометрическая интерпретация понятия химического потенциала компонентов?

4.7. Какие системы координат используются для построения диаграммы состояния и термодинамической диаграммы?

4.8. Что понимается под критическими точками диаграммы состояния системы компонентов?

4.9. Как получают значения критических точек на термодинамической диаграмме?

4.10. К какому типу относится диаграмма состояния системы Sn-Pb?

4.11. Какой вид имеет график термодинамического потенциала системы G при нерастворимых в кристаллических решетках друг друга компонентах?

4.12. Как выглядит график термодинамического потенциала системы G при смешивании компонентов в жидком состоянии?

4.13. Какая термодинамическая характеристика придает нелинейный вид зависимости $G(x)$ для жидкой фазы системы Sn-Pb и от каких параметров она зависит?

5. РЕКОМЕНДУЕМЫЙ БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Кудряков О.В., Пустовойт В.Н. Анализ фазовых равновесий в двухкомпонентных системах: Учеб. пособие. / Ростов н/Д: Издательский центр ДГТУ, 2002. – 66 с.
2. Захаров А.М. Диаграммы состояния двойных и тройных систем. М: Металлургия, 1990. - 240 с.
3. Глазов В.М., Павлов Л.М. Химическая термодинамика и фазовые равновесия. М: Металлургия, 1988. - 559 с.
4. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание в 4-х томах. М: Наука, 1978-1982.
5. Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник в 3-х томах. / Под ред. Лякишева Н.П. - М: Машиностроение, 1995-2000.
6. Жуков А.А. Геометрическая термодинамика сплавов железа. М: Металлургия, 1978. - 295 с.

Лабораторная работа №4

ПОСТРОЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ВОЗДУХА МЕТОДОМ ИЗМЕРЕНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТОКОВ

ЦЕЛЬ РАБОТЫ: получение практических навыков измерения и расчета термодинамических потоков, использование этих навыков для экспериментального определения теплопроводности воздуха.

1. ОПИСАНИЕ МЕТОДА ИЗМЕРЕНИЯ

Для определения коэффициента теплопроводности газа в данной работе используется *метод нагретой нити*. Исследуемый газ – воздух – заполняет цилиндрическую стеклянную трубку 2, по оси которой натянута металлическая нить 1, как показано на рисунке 1. Трубка с нагретой нитью снаружи охлаждается водой 3.

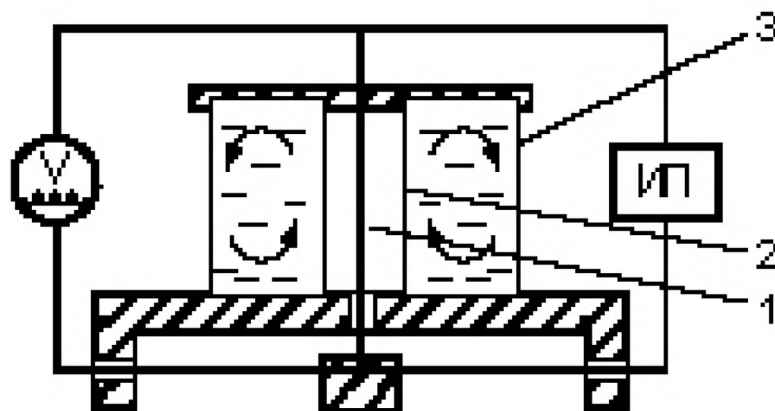


Рисунок 1 - Схема экспериментальной установки

При пропускании тока в нити выделяется джоулево тепло. Если пренебречь потерями энергии через концы нити в окружающую среду, можно считать, что тепловой поток распространяется радиально от нити. Поэтому каждая изотермическая поверхность представляет собой как бы стенки цилиндра радиусом r , ось которого совпадает с осью стеклянного цилиндра.

Тепловой поток через изотермическую поверхность по определению равен:

$$J_w = \frac{\partial Q}{S \cdot dt} = \frac{N}{S} = \frac{I \cdot U}{2\pi \cdot r \cdot L} \quad (1)$$

где L – длина нити; N , I и U – соответственно мощность, ток и напряжение на нити.

В то же время, согласно формуле Фурье, тепловой поток равен:

$$J_w = -\gamma \cdot \frac{dT}{dr} \quad (2)$$

Приравняем выражения (1) и (2) для потока:

$$-\gamma \cdot \frac{dT}{dr} = \frac{I \cdot U}{2\pi \cdot r \cdot L} \quad (3)$$

Разделим переменные и, проинтегрировав, получим:

$$\gamma \cdot (T_1 - T_2) = \frac{I \cdot U}{2\pi \cdot L} \cdot \ln \frac{r_2}{r_1} \quad (4)$$

Откуда получаем величину коэффициента теплопроводности:

$$\gamma = \frac{I \cdot U}{2\pi \cdot L \cdot (T_1 - T_2)} \cdot \ln \frac{r_2}{r_1} \quad (5)$$

здесь r_1 и r_2 - соответственно радиусы нити и трубки; T_1 и T_2 - температура слоёв газа, примыкающих к поверхности нити и стенке трубки.

Нить в данной установке используется не только в качестве нагревателя, но и как *термометр* сопротивления для измерения её температуры. Сопротивление проводника равно ... и в то же время $R = R^* \cdot (1 + \alpha \cdot (T_1 - T_2))$, где α – температурный коэффициент сопротивления проводника; R^* - сопротивление нити при комнатной температуре, т.е. в отсутствие тока в нити.

Если разность температур определить по формуле (5), то для сопротивления нити получим выражение:

$$R = R^* + R^* \alpha \cdot \frac{P}{2\pi \cdot L \cdot \gamma} \cdot \ln \frac{r_2}{r_1} \quad (6)$$

где $P = I \cdot U$ - мощность тока.

Следовательно, сопротивление нити линейно зависит от мощности тока в ней. Прямая, соответствующая зависимости $R(P)$, имеет угловой коэффициент, равный множителю при величине P в формуле (6). Обозначим его буквой m . Тогда выражение (6) примет вид: $R = R^* + m \cdot P$.

Величина R^* есть отсечка на оси R при экстраполяции (продлении) прямой $R(P)$, а значение m позволяет вычислить коэффициент теплопроводности газа:

$$\gamma = \frac{R^* \alpha}{2\pi \cdot L \cdot m} \cdot \ln \frac{r_2}{r_1} \quad (7)$$

2. ИЗМЕРЕНИЯ И ОБРАБОТКА ИХ РЕЗУЛЬТАТОВ

1. Измерьте с помощью настенного термометра комнатную температуру.
2. Задавая на источнике питания различные значения тока I , измеряйте напряжение на нити.

3. Вычислите P и R (мощность и сопротивление нити) и постройте график зависимости этих величин.
4. Найдите линейную часть этой кривой, продлите её до оси R и определите значение R^* .
5. Вычислите угловой коэффициент m линейного участка $R(P)$; если наблюдается разброс экспериментальных точек относительно прямой, выполните многократные вычисления, пользуясь методом парных точек; рассчитайте среднее значение m и его погрешность многократных измерений σ_m .
6. Вычислите значение γ .
7. Определите погрешность измерения γ по формуле:

$$\gamma = \sqrt{\left(\frac{\partial \gamma}{\partial P}\right)^2 \cdot (\Delta P)^2 + \left(\frac{\partial \gamma}{\partial R}\right)^2 \cdot (\Delta R)^2 + \left(\frac{\partial \gamma}{\partial m}\right)^2 \cdot (\Delta m)^2} \quad (8)$$

Абсолютную погрешность ΔR^* найдите по графику зависимости $R(P)$; величина

$$\Delta \left(\ln \frac{r_2}{r_1} \right) \approx \delta r_1 = \frac{\Delta r_1}{r_1}, \text{ так как } \delta r_1 \gg \delta r_2.$$

Лабораторная работа №5

ДВИЖЕНИЕ ТЕЛА В ДИССИПАТИВНОЙ СРЕДЕ

ЦЕЛЬ РАБОТЫ: определение диссипативных сил, действующих на тело в вязкой среде (жидкости); описание движения тела в однородном силовом поле в среде, измерение коэффициента вязкости жидкости методом Стокса.

ОБОРУДОВАНИЕ: сосуд с исследуемой жидкостью (глицерин, трансформаторное или авиационное масло), шарики одинаковой плотности, секундомер, масштабная линейка, термометр, микрометр, штангенциркуль.

1. ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

В любой среде, даже идеальной, невязкой, на тело действует тормозящая сила, пропорциональная ускорению тела. Для шара массой m плотностью ρ_m и жидкости плотностью ρ_c её действие эквивалентно присоединению к шару массы

$$\Delta m = m \cdot \frac{\rho_c}{2\rho_m}, \text{ равной половине массы вытесненной им жидкости. В вязкой среде}$$

существуют ещё силы сопротивления $F(V)$, зависящие от скорости тела V . При малых скоростях доминирует сила Стокса, обусловленная вязким трением между слоями среды:

$$F_c(V) = -\mu \cdot V,$$

Коэффициент сопротивления μ зависит от размеров и формы тела и от вязкости η среды (и не зависит от шероховатости поверхности тела, так как тело движется вместе с «прилипшим» к нему слоем среды).

Для шара радиуса r коэффициент сопротивления равен:

$$\mu = 6\pi \cdot r \cdot \eta$$

Вследствие вязкости среды в области, прилегающей к поверхности тела, образуется пограничный слой частиц, движущихся с меньшими скоростями. В результате тормозящего действия этого слоя возникает вращение частиц, и движение жидкости в пограничном слое становится вихревым. Если тело не имеет обтекаемой формы, то пограничный слой жидкости отрывается от поверхности тела. За телом возникает течение жидкости, направленное противоположно набегающему потоку оторвавшийся пограничный слой, следуя за этим течением, образует вихри, вращающиеся в противоположные стороны.

При больших скоростях тела происходит, как установил Ньютон, передача импульса в основной среде, оказывающейся непосредственно на пути тела. Увеличение за 1 с объёма, «заметаемого» телом, составляет $c \cdot S \cdot V$, где c - числовой коэффициент зависящий от формы и (слабо) от скорости тела; S - площадь проекции тела на плоскость, перпендикулярную скорости (для шара $S = \pi \cdot r^2$). Переданный телами среде за 1 с импульс составляет $(c \cdot S \cdot V) \cdot \rho_c \cdot V = c \cdot \rho_c \cdot S \cdot V^2$ и определяет силу любого сопротивления:

$$F_n = -f \cdot V^2, \quad f = c \cdot \rho_c \cdot S$$

Известно, что сила внутреннего трения F пропорциональна площади трущихся поверхностей соприкасающихся слоёв жидкости и градиенту скорости $\frac{V_2 - V_1}{\Delta X}$, то есть по формуле Ньютона:

$$F = \eta \cdot S \cdot \frac{V_2 - V_1}{\Delta X}$$

где V_1 и V_2 - скорости трущихся слоёв жидкости, между этими слоями, η - коэффициент вязкости.

ΔX - расстояние

Коэффициент вязкости η численно равен силе трения, возникающей на единице площади поверхности трущихся слоёв жидкости, при градиенте скорости, равном 1.

За единицу вязкости принимается $1 \text{ Н} \cdot \text{с} / \text{м}^2 = 1 \text{ Па} \cdot \text{с}$. Коэффициент вязкости равен $1 \text{ Н} \cdot \text{сек} / \text{м}^2$, если при градиенте скорости $\frac{1 \text{ м} / \text{с}}{\text{м}}$ один слой жидкости воздействует на другой слой площадью 1 м^2 с силой в 1 Н .

В данной работе численное значение коэффициента вязкости определяется по скорости равномерного падения шарика в вязкой жидкости, скорость шарика в вязкой жидкости тем меньше, чем больше её вязкость.

Падающий в жидкости шарик находится под действием трёх сил: силы тяжести P , выталкивающей силы f_1 и силы сопротивления среды f_2 . Сила сопротивления среды f_2 растёт с увеличением скорости. Возрастание скорости падения и силы сопротивления среды будет происходить до тех пор, пока сила сопротивления среды и выталкивающая сила не будут уравниваться силой тяжести шарика, т.е.

$$P = f_1 + f_2 \tag{1}$$

С этого момента движение шарика становится равномерным и называется установившимся.

При движении шарика в жидкости возникает трение одних слоёв жидкости о другие; ближайšie к поверхности шарика молекулы жидкости прилипают к его поверхности и движутся со скоростью шарика, остальные по мере удаления от шарика - со всё уменьшающейся скоростью сила сопротивления среды падению шарика согласно закону Стокса равна

$$f_2 = 6\pi \cdot \eta \cdot r \cdot V,$$

где η - коэффициент вязкости жидкости, r - радиус шарика.

Вес шарика P можно выразить через ускорение свободного падения g , плотность ρ и его объём $\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3$, т.е.

$$P = \rho \cdot g \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3,$$

а выталкивающую силу (согласно закона Архимеда) - через вес жидкости в объёме шарика, т.е.

$$f_1 = \rho_1 \cdot g \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3,$$

где ρ_1 - плотность жидкости.

Подставив значения η , f_1 , f_2 в уравнение (1) и решив его относительно коэффициента вязкости, получим:

$$\eta = \frac{2 \cdot g \cdot (\rho - \rho_1) \cdot r^2}{9 \cdot V} \quad (2)$$

Эта формула справедлива для безграничной среды. На движение шарика в жидкости, находящейся в каком-либо сосуде, заметно будут влиять стенки этого сосуда. Если шарик падает вдоль оси цилиндрического сосуда с радиусом R , учёт наличия стенок приводит к следующему выражению для коэффициента вязкости:

$$\eta = \frac{2 \cdot g \cdot (\rho - \rho_1) \cdot r^2 \cdot t}{9 \cdot \left(1 + 2,4 \cdot \frac{r}{R} \right)} \quad (3)$$

Здесь скорость V заменена через частное ℓ / t , где ℓ - путь, а t - время равномерного падения шарика. Величины r , ℓ , t и R , входящие в эту формулу, определяются из эксперимента, а остальные берутся из таблиц.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Прибор для определения коэффициента вязкости методом падающего шарика показан на рисунке 1. Он состоит из стеклянного цилиндра, наполненного исследуемой жидкостью и имеющего две горизонтальные метки (проволочки на цилиндре m и n , расположенные на расстоянии ℓ). Верхняя метка m помещена несколько ниже (на 5...8 см) верхнего уровня жидкости, в том месте, где движение шарика становится равномерным.

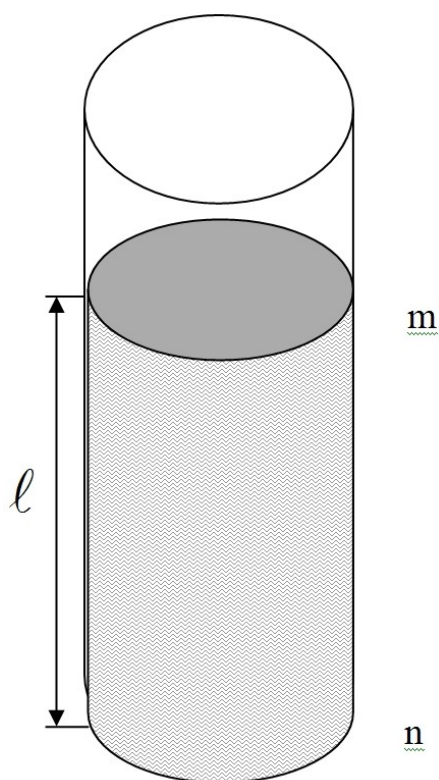


Рисунок 1 – Экспериментальная установка

На дно цилиндра опущена сетка S с держателем, при помощи которой извлекаются шарики, упавшие на дно. Сам цилиндр укрепляется на подставке.

Размеры шариков определяются с помощью микрометра. Микрометр состоит из двух основных частей: скобы и микрометрического винта (стержень, который снабжен точной винтовой нарезкой). На микрометрическом винте (рисунок 2) закреплён полый цилиндр или барабан C с делениями по окружности. При вращении микрометрического винта барабан перемещается по линейной шкале, которая нанесена на стебле D измерительного устройства.

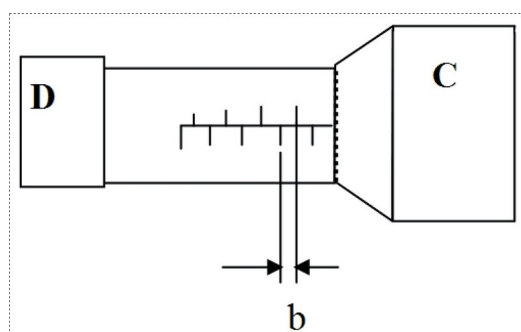


Рисунок 2 – Микрометрический винт

На практике применяют микрометр у которого цена деления линейной шкалы стебля $b = 0,5$ мм. Верхние и нижние риски шкалы сдвинуты относительно друг друга на полмиллиметра, а цифры проставлены только для делений нижней шкалы, т.е. нижняя шкала представляет собой обычную миллиметровую шкалу.

Для того, чтобы микрометрический винт передвинулся на 1 мм, нужно сделать два оборота барабана C , а шаг микрометрического винта равен 0,5 мм. У такого микрометра на барабане C имеется шкала, которая содержит 50 делений. Значит, точность микрометра будет: $b/m = 0,5/50 = 0,01$ мм.

Для измерения предмет помещают между упором и микрометрическим винтом. При этом винт вращают за головку прибора до тех пор, пока измеряемый предмет не будет зажат между упором и винтом. Вращение винта необходимо производить только за головку, иначе можно сбить совпадение нулей шкалы стебля *D* и барабана *C*. Числовое значение измеряемого предмета может быть определено по формуле:

$$L = K \cdot b + n \cdot \frac{b}{m},$$

где *K* - число наименьших делений шкалы;

b - цена наименьших делений шкалы;

m - число всех делений на шкале барабана;

n - номер того деления барабана, который в момент отсчёта совпадает с осью шкалы стебля.

3. МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

1. Измерить с помощью микрометра диаметры шариков.
2. Опустить шарик в цилиндр с жидкостью как можно ближе к его оси и в момент прохождения его через метку пустить вход секундомер. Затем аналогичным образом поместить глаз против нижней метки *n* и в момент прохождения шарика мимо этой метки остановить секундомер. Извлечь шарик сеткой. Повторить тоже с другими шариками. Расстояние между указательными метками измерить линейкой пять раз.
3. Измерить штангенциркулем внутренний диаметр цилиндра *R*, причём каждый раз в новом месте.
4. Замерить температуру исследуемой жидкости во время опыта. Плотность шарика и жидкости при температуре опыта взять из таблиц.
5. Результаты измерений записать в таблицу.

Таблица результатов измерений и вычислений

№ измерения	<i>r</i> , м	<i>R</i> , м	<i>ℓ</i> , м	<i>t</i> , с	$V = \ell / t$, м/с	η_i , Па·с	$\langle \eta \rangle$
1							
2							
3							
4							
5							

4. ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ

1. Определить коэффициент вязкости по формуле (3), подставив в неё значения измеряемых величин.
2. Определить среднее значение вязкости.
3. Определить относительную и абсолютную погрешности.

Абсолютную погрешность находим по формуле:

$$\Delta\langle\eta\rangle = t_{pn} \cdot \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^5 (\langle\eta\rangle - \eta_i)^2}{20}}$$

где $\langle\eta\rangle = \frac{\sum_{i=1}^5 \eta_i}{5}$ - среднее значение вязкости, t_{pn} - коэффициент Стьюдента.

Относительная погрешность равна отношению абсолютной погрешности к среднему значению измеряемой величины:

$$\varepsilon\langle\eta\rangle = \frac{\Delta\langle\eta\rangle}{\langle\eta\rangle}$$

5. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Что называется коэффициентом вязкости и каковы его единицы измерения?
2. Какие силы действуют на шарик, падающий в жидкости?
3. В чём заключается метод Стокса?
4. Какой коэффициент вязкости более точно можно определить этим методом - воды или глицерина?
5. При каком условии сопротивление движению пропорционально скорости?
6. Какую величину в работе нужно измерять с наибольшей точностью?

Лабораторная работа №6

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИССИПАТИВНОЙ СТРУКТУРЫ ЖИДКОСТИ ПРИ КОНВЕКТИВНОМ ТЕПЛООБМЕНЕ

ЦЕЛЬ РАБОТЫ: экспериментальное наблюдение процесса самоорганизации неравновесной системы (жидкости) - формирование диссипативной структуры «ячейки Бенара»; изучение физического механизма формирования такой структуры; исследование геометрических параметров ячеек и их взаимосвязи с управляющими термодинамическими параметрами системы.

1. ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Если слой жидкости подогревать снизу, то при малой разности температур верхней и нижней её поверхностей, ΔT , тепловая энергия переносится снизу вверх с

помощью механизма теплопроводности, т.е. за счёт столкновения молекул при их хаотическом движении.

При достижении ΔT критического значения (рисунок 1) этот механизм уже не справляется с переносом большого количества тепла, начинается конвекция жидкости: более нагретые нижние слои жидкости расширяются, становятся легче

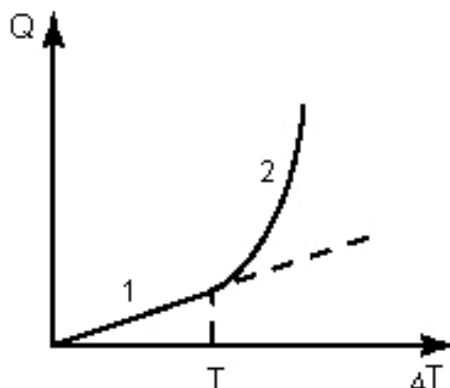


Рисунок 1 - Бифуркационное изменение условий теплообмена 1 и 2 в жидкости при формировании ячеек Бенара

холодных верхних, всплывают наверх, там охлаждаются и снова опускаются и т.д. В жидкости возникают ячейки, аналогичные пчелиным сотам: вертикально расположенные вплотную друг к другу шестигранники – конвективные ячейки Бенара, показанные на рисунке 2. Движение жидкости стабилизируется её вязкостью, т.к. силы трения направлены против него. Жидкость поднимается внутри ячейки вдоль её оси, растекается по верхнему основанию, опускается по боковым граням и собирается по нижнему основанию к его середине и снова вверх. Возникает динамическая упорядоченная структура.

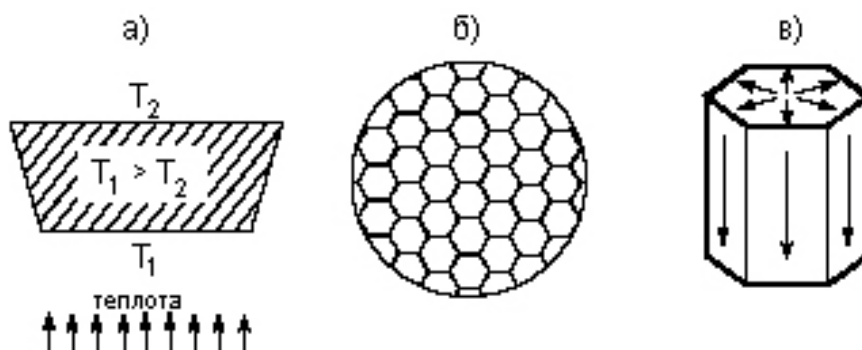


Рисунок 2 – Самоорганизация жидкости в неравновесных условиях: а) термическая схема процесса; б) общий вид конвективных ячеек Бенара – диссипативной структуры жидкости в неравновесных условиях; в) схема распределения конвективных потоков в пределах одной ячейки

Такой механизм позволяет переносить большое количество тепловой энергии, т.к. обеспечивает большую скорость молекулам жидкости благодаря строгой регулировке встречных потоков. По сравнению с неподвижной жидкостью со слабонеоднородным распределением параметров ячейки являются более высокоорганизованной структурой, возникающей в результате коллективного

движения молекул в жидкости. Поскольку система обменивается со средой теплом и в стационарных условиях получает (при температуре T_1) такое же количество тепла, сколько и отдаёт (при $T_2 < T_1$), то оказывается, что она выбрасывает в среду количество энтропии, равное $\Delta S = \frac{Q}{T_1} - \frac{Q}{T_2} < 0$. Иными словами, внутренняя структура, самоорганизация, поддерживается за счёт поглощения отрицательной энтропии (негэнтропии).

Ячейки Бенара как бы в миниатюре воспроизводят условия, необходимые для существования жизни на Земле. Жизнь – это упорядоченная структура. Она стала возможной лишь благодаря негэнтропии солнечного излучения, которой она питается. Энергия солнечного излучения поступает на Землю из высокотемпературного источника (на поверхности Солнца $T_1 \approx 6000\text{K}$), а уходит в космическое пространство при низкой температуре (на поверхности Земли $T_2 \approx 300\text{K}$). Если предположить, что энергия на Земле не накапливается, а почти вся отражается, то поток энтропии от Солнца на Землю меньше потока энтропии от Земли в космическое пространство. Наблюдается полная аналогия с тепловым балансом в ячейках Бенара.

Таким образом, Земля получает высококачественную энергию от Солнца (так называют энергию, полученную при малом потоке энтропии) перерабатывает её, что сопровождается ростом энтропии, и выбрасывает в окружающее пространство вместе с наработанной энтропией. Именно это обстоятельство обеспечивает жизнедеятельность на Земле.

Постоянство негэнтропийного рациона Земли в обозримые интервалы времени, по-видимому, лежит в основе открытого В.И.Вернадским закона сохранения биомассы на Земле.

Грандиозная структура подобных ячеек образуется на Солнце. Она составляет конвективную зону в виде сферического слоя толщиной $\sim 10^5$ км, который позволяет выносить энергию, высвобождающуюся при термоядерных реакциях в недрах Солнца, к его поверхности.

2. МЕТОДИКА ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. В низкий толстостенный металлический сосуд с плоским круглым дном диаметром около 20 см (подойдет обыкновенная кухонная сковорода) налить слой прозрачного минерального масла толщиной примерно 0,5 см.
2. Для создания контрастности изображения и лучшей видимости конвективных потоков в жидкости в процессе эксперимента, в масло добавить мелкие алюминиевые опилки.
3. Посуду (сковороду) с находящимся в ней маслом подогреть снизу горячей водой.
4. Когда градиент температуры достигнет критического значения, в масле должны образоваться ячейки, как показано на рисунке 2б. В центре каждой из них конвективный поток движется вверх, а по краям – вниз (см. рисунок 2в).

5. Измерьте размеры ячеек и соответствующий им температурный градиент в слое масла, используя схему на рисунке 2а.
6. Перемешайте раствор, не изменяя положения сосуда. Убедитесь, что при сохранении термодинамических условий происходит восстановление ячеистой структуры жидкости.
7. Поварьируйте значение температурного градиента путем изменения температуры подогрева воды или толщины слоя масла (например, наклоняя сосуд). Проследите за изменениями в состоянии масла.
8. Опишите наблюдаемые изменения с точки зрения термодинамики неравновесных процессов и теории диссипативных структур. Найдите критические значения температурного градиента, при которых возникает и исчезает ячеистая структура масла.

Примечания:

- 1) использование видеокамеры в эксперименте позволяет передавать изображение на компьютер, записывать его и проводить необходимые измерения геометрических параметров диссипативной структуры по картинке остановленного видеоизображения на экране монитора или проектора;
- 2) вместо масла с алюминиевыми опилками может быть использован расплавленный парафин с алюминиевой или медной пудрой; сосуд с таким раствором может подогреваться не горячей водой, а непосредственно на электрической или газовой плите.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМЫ НА УСТОЙЧИВОСТЬ

Выполним ещё один самостоятельный эксперимент с десятком иголок, не связанный с предыдущим и показывающий, как неустойчивость приводит к образованию определенной структуры. Прделаем опыт по следующей методике:

1. Намагнитить иголки в одинаковом направлении, скажем, прикладывая ушко к северному полюсу подковообразного магнита, а острие – к южному (при отсутствии подковообразного магнита можно воспользоваться самодельным электромагнитом: изолированный провод намотать в несколько слоев на бумажную трубку и, подключив концы этой катушки к батарее, поместить внутрь иголки).

2. Иголки воткнуть в небольшие кусочки пробки или пенопласта, покрытые парафином, – получатся магнитные поплавки.

3. Опустить поплавки в стакан с водой.

Поскольку одноименные полюса магнитов отталкиваются, а иголки ориентированы одинаково, поплавки расплывутся в разные стороны, стремясь максимально удалиться друг от друга – в этом случае энергия всей системы будет наименьшей. Поплавки образуют правильные фигуры: три поплавка – равносторонний треугольник, четыре – квадрат, пять – пятиугольник. Если поплавков много, устойчивыми будут несколько конфигураций – один поплавок находится в

центре, остальные рассредоточены по краю стакана. Понятно, что такой рисунок не могут образовать два или три поплавка.

Цель эксперимента - установить опытным путем, при каком *наименьшем числе* поплавков структура системы с поплавком в центре будет устойчивой?

Опишите результаты выполненных экспериментов с точки зрения термодинамики неравновесных процессов и представьте в виде выводов по работе.

4. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Что называется негэнтропией?
2. Что такое бифуркация? В каких условиях это явление наблюдается?
3. При каком состоянии системы в ней можно ожидать формирование диссипативной структуры?
4. Что понимается под диссипативной структурой?
5. Является ли система ячеек Бинара диссипативной структурой? Каков её физический механизм диссипации энергии?
6. Какие физические процессы участвуют в формировании ячеек Бинара?
7. Назовите управляющие параметры динамической системы жидкости, самоорганизующейся в виде ячеек Бинара.
8. Опишите эволюцию структуры жидкости в неравновесных условиях.

Лабораторная работа №7

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ДИССИПАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ В АВТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ САМООРГАНИЗУЮЩИХСЯ ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

ЦЕЛЬ РАБОТЫ: экспериментальное наблюдение автокаталитического процесса самоорганизации неравновесной химической системы в виде периодических автоколебательных процессов изменения окраски раствора бромата калия в присутствии катализатора.

ОБОРУДОВАНИЕ И РЕАКТИВЫ: магнитная мешалка с функцией нагрева, химические весы для взвешивания сыпучих реактивов, химическая посуда (мерные стаканы, чашки Петри, стеклянная воронка, стеклянные палочки), секундомер; пищевая лимонная кислота или малоновая кислота $\text{HOOC-CH}_2\text{-COOH}$, два кремня для зажигалок, концентрированная серная кислота H_2SO_4 , бромат калия KBrO_3 , перманганат калия KMnO_4 , пероксид водорода (перекись водорода) H_2O_2 , йодноватая кислота HIO_3 , сульфат марганца (марганцевый купорос) MnSO_4 , крахмал, дистиллированная вода.

1. ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Разномасштабные самоорганизующиеся системы независимо от того, к какому разделу науки они относятся, имеют единый алгоритм перехода от менее сложных и менее упорядоченных к более сложным и более упорядоченным состояниям.

Разработкой теории самоорганизации занимаются несколько научных дисциплин: термодинамика неравновесных (открытых) систем, синергетика, теория катастроф.

Как определить - каком направлении будет развиваться процесс превращения системы? Почему пирамида Хеопса разрушается, а не восстанавливается? Для этого в физике вводится понятие энтропии, как меры беспорядка в системе. Произвольно идущие процессы протекают в направлении увеличения энтропии, т.е. беспорядка в системе (точнее говорить о вероятности направления протекания процесса).

Например, кристаллы - упорядоченные равновесные структуры, а атмосфера Земли – неупорядоченная открытая неравновесная система.

Солнце передает энергию земной атмосфере в виде теплового излучения. Атмосфера находится в состоянии постоянной общей циркуляции, под которой понимаются *замкнутые течения* воздушных масс в масштабах полушария или всего земного шара, приводящие к широтному и меридиональному переносу вещества и энергии в атмосфере. Главной причиной возникновения воздушных течений в атмосфере служит неравномерное распределение солнечного тепла на поверхности Земли, что приводит к неодинаковому нагреванию почвы и воздуха в различных поясах земного шара. Таким образом, солнечная энергия является первопричиной всех движений в воздушной оболочке Земли. Циркуляционные потоки в атмосфере и океанах Земли: это пример самоорганизация на Земле.

Другим примером самоорганизующейся временной структуры является эволюция численности животных – хищников и жертв. Когда на изолированном пространстве (например, на острове) становится слишком много хищников, жертвы интенсивно уничтожаются. Это вызывает нехватку пищи для хищников, снижается их численность. Тогда увеличивается популяция жертв. Устойчивым оказывается режим колебаний с определённым периодом. Подобную модель (модель «хищник – жертва») часто называют *процессом Лотки–Вольтерры*. Это универсальная модель, представляющая собой систему дифференциальных уравнений, которая может быть представлена в параметрическом виде и выражена в форме отображений. Модель описывает не только колебания популяций, но и, в частности, незатухающие колебания концентраций реагентов в химических системах (реакции Белоусова–Жаботинского или Бриггса–Раушера, называемые ещё «химическими часами»).

Подобные реакции относятся к химическим окислительным реакциям колебательного типа. В процессе реакции окисления выделяется *ингибитор*, тормозящий её на некоторое время, когда использована лишь небольшая доля реагентов (окислителя или восстановителя). Роль маятника играет вещество переменной валентности – изначально (в реакции, открытой Б.П.Белоусовым в 1951 году) это был *церий*. Он оказывается то в окисленной, то в восстановленной форме.

В хорошо перемешиваемой среде в некоторой области начальных концентраций реагентов наблюдаются *незатухающие колебания* – периодические *изменения окраски* раствора от красной или бесцветной (избыток трёхвалентного церия) до синей или желтой (преобладание его четырёхвалентной формы) в зависимости от концентраций исходных реактивов – лимонной и серной кислот, бромата калия и ионов церия. Эффект ещё более заметен в присутствии индикатора pH ферроина. Наиболее эффектно выглядит колба, если вместо лимонной кислоты использовать малоновую, а вместо ионов церия ионы железа Fe^{2+} . Тогда раствор в колбе может часами со строгой как часы периодичностью изменять цвет во всем видимом диапазоне от рубиново-красного до небесно-голубого.

Период колебаний цвета зависит от концентраций реагентов, его возможные значения - от 2 до 100 секунд. Продолжаются они около часа: так как система замкнута, колебания со временем прекращаются. При одних и тех же условиях колебания полностью воспроизводятся по амплитуде, форме, частоте.

Колебательные химические реакции входят в класс автоволновых процессов. Механизм таких реакций (в т.ч. и реакции, открытой Б.П.Белоусовым) в 1960-х годах был объяснен А.М.Жаботинским, который в 1969 году обнаружил, что если реагирующую смесь «разлить» тонким плоским слоем, то в нём возникают волны изменения концентрации, которые видны невооружённым глазом в присутствии индикаторов – поверхностные химические спиральные волны (см. рисунок 1).

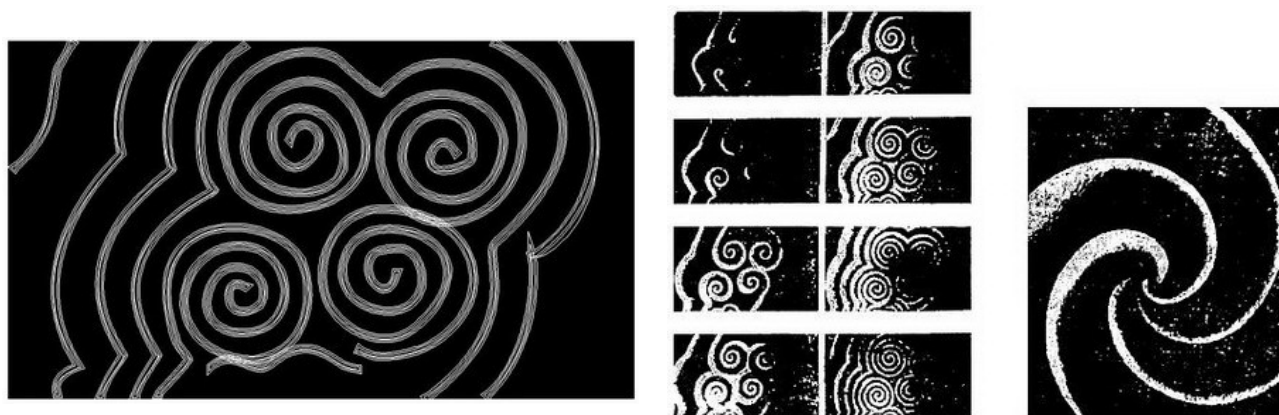


Рисунок 1 – Поверхностные химические спиральные волны, наблюдаемые в тонком слое раствора при реакции Белоусова-Жаботинского

«Во всех случаях временные, пространственные и пространственно-временные структуры возникают, а не накладываются на структуру извне. Процессы, приводящие к такому возникновению структур,— пишет один из основателей синергетики, Герман Хакен,— мы будем называть самоорганизацией».

Самоорганизация не связана с особым классом веществ, но она существует лишь в специальных системах, удовлетворяющих условиям:

- 1) открытые системы, т.е. открытые для притока энергии (вещества) извне;
- 2) макроскопические системы, т.е. системы описываются нелинейными уравнениями.

Неравновесные процессы происходят с возникновением в системах упорядоченных структур - диссипативных структур. Диссипативные структуры являются устойчивыми образованиями, и их устойчивость определяется устойчивостью внешнего источника энергии. В реакции Белоусова-Жаботинского работа «химических часов» постепенно затухает из-за отсутствия внешнего источника. «Часы» работают пока хватает «топлива» в виде автокаталитического взаимопревращения ионов церия (или брома) из окисленной формы в восстановленную и наоборот, т.е. периодического перехода этих ионов из исходных реагентов в продукты реакции и наоборот.

Устойчивость и неустойчивость. Критические состояния. Бифуркации. Неравновесная термодинамика связывает пороговый характер процессов с неустойчивостью, показав, что новая структура всегда является результатом раскрытия неустойчивости в результате *флуктуаций*. Можно говорить о «порядке через флуктуации». С математической точки зрения, неустойчивость и пороговый характер самоорганизации связаны с нелинейностью. Таким образом, пороговый характер самоорганизации связан с переходом из одного стационарного состояния в другое.

Потеря системой устойчивости называется *катастрофой*. Точнее, катастрофа - это скачкообразное изменение, возникающее при плавном изменении внешних условий. Математическая теория, анализирующая поведение нелинейных динамических систем при изменении их параметров, называется *теорией катастроф*. Теория катастроф определяет область существования различных структур, границы их устойчивости. Для изучения же динамики систем необходимо знать, каким именно образом новые решения уравнений «ответвляются» от известного решения. Ответ на такие вопросы дает *теория бифуркаций* (разветвлений), то есть возникновения нового решения при критическом значении параметра. Момент перехода (катастрофический скачок) зависит от свойств системы и уровня флуктуаций.

Возникновение нового качества происходит на основании усиления малых случайных движений элементов - флуктуаций. Это в частности объясняет тот факт, что в момент бифуркации состояния системы возможно не одно, а множество вариантов структурного преобразования и дальнейшего развития объекта. Таким образом, сама природа ограничивает наши возможности точного прогнозирования развития, оставляя, тем не менее, возможности важных качественных заключений. В сложных системах параметр (характеристика или свойство системы) X может изменяться под действием управляющего (или возмущающего) параметра λ . Рассмотрим диаграмму на рисунке 2. Оказывается, что при малых λ существует одно решение, характеризующее термодинамически устойчивое состояние, а при больших λ - существует два устойчивых состояния с разными значениями X . Переход к новому состоянию при $\lambda_{кр}$ под действием флуктуации называется явлением *бифуркации*. Это проиллюстрировано на рисунке 3, где точка «плывет» строго по середине русла и на развилке – в точке бифуркации $\lambda_{кр}$ – она проплывет через правый или левый рукав в зависимости от случайного действия около точки

«волнореза». А на рисунке 4 показаны механические аналоги устойчивых и неустойчивых положений (точки X_0).

Значение элементарной теории катастроф состоит в том, что она сводит огромное многообразие ситуаций, встречающихся на практике, к небольшому числу стандартных схем, которые можно детально исследовать раз и навсегда (аналогично типичным ситуациям на рисунке 4). Сейчас теория катастроф широко применяется в механике конструкций, метеорологии, аэродинамике, оптике, теории кооперативных явлений, квантовой динамике. Но главное заключается в том, что эта теория подводит эффективную стандартную базу под описание качественных изменений в нелинейных уравнениях, моделирующих системы, далекие от равновесия. Она является основой анализа в теории бифуркаций, в теории переходов термодинамических систем в новые структурные состояния.

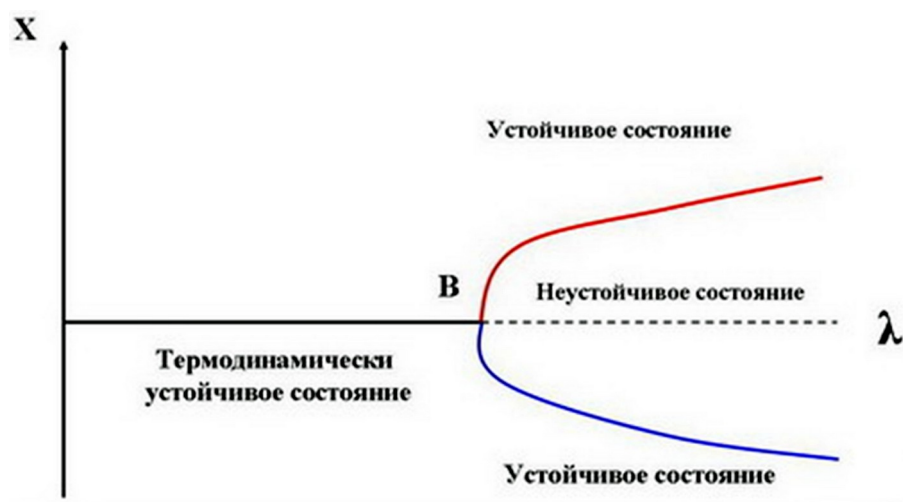


Рисунок 2 -
Бифуркационная
диаграмма процесса
самоорганизации

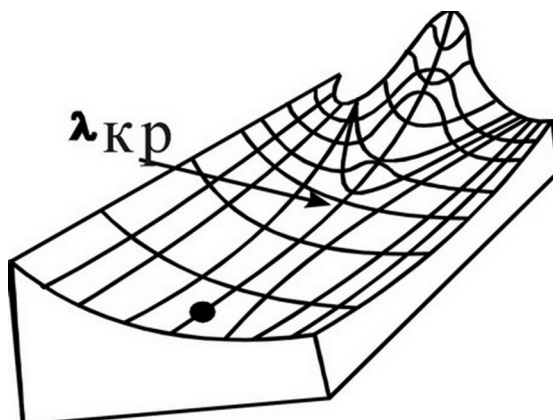


Рисунок 3 – Гидравлический
аналог точки бифуркации В с
рисунка 2

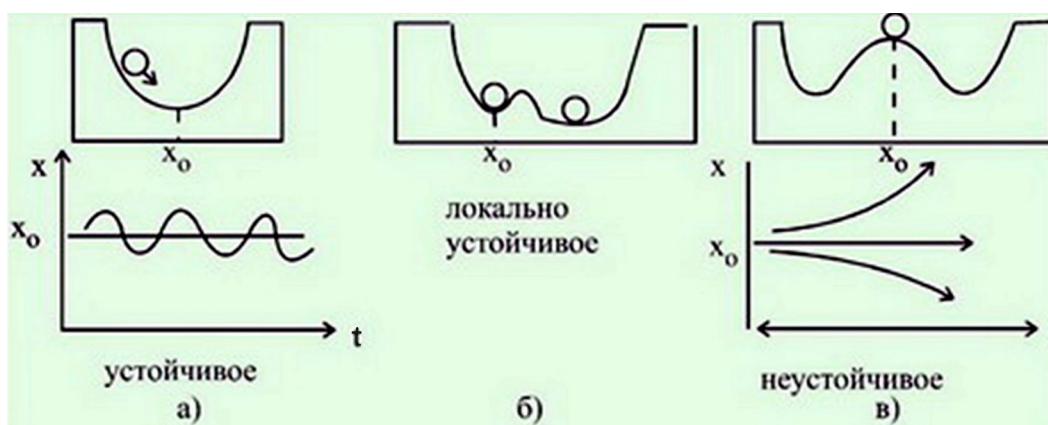


Рисунок 4 –
Механические
аналоги
устойчивых и
неустойчивых
положений
(t – время)

Значение флуктуаций в неравновесных процессах характеризуют слова нобелевского лауреата Ильи Пригожина, основоположника термодинамики необратимых процессов: «В принципе бифуркации есть не что иное, как возникновение при некотором критическом значении параметра нового решения уравнений... Любое описание системы, претерпевающей бифуркации, включает и детерминистский, и вероятностный элементы... Между двумя точками бифуркации в системе выполняются детерминистические законы, например, законы химической кинетики, но в окрестностях точек бифуркации существенную роль играют флуктуации, и именно они «выбирают» ветвь, которой будет следовать система».

2. МЕТОДИКА ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. Приготовьте раствор №1: растворите два кремня от зажигалок в 12 мл раствора серной кислоты (1:2): 1 часть конц. H_2SO_4 + 2 таких же части дистиллированной воды.
2. Приготовьте раствор №2: в 10 мл горячей воды растворите 4 г пищевой лимонной кислоты и туда же высыпьте 1,7 г бромата калия KBrO_3 .
3. Для полного растворения веществ оба раствора следует слегка подогреть (на магнитной мешалке, имеющей функцию подогрева).
4. Разместите один из приготовленных растворов на включенной магнитной мешалке.
5. Быстро слейте вместе оба приготовленных раствора. При недостаточно интенсивном перемешивании дополнительно перемешайте смесь стеклянной палочкой, не допуская переливания раствора через край сосуда.
6. Пронаблюдайте и опишите происходящее в сосуде, отмечая с помощью секундомера моменты смены цветовых состояний.
7. Приготовьте новый раствор из практически тех же ингредиентов: 2 г лимонной кислоты растворить в 6 мл дистиллированной воды, туда же добавьте 0,2 г бромата калия KBrO_3 и 0,7 мл концентрированной H_2SO_4 . К смеси добавьте воду до объема 10 мл, после чего в нее внесите 0,04 г перманганата калия KMnO_4 и тщательно перемешайте до полного растворения соли.
8. Быстро отлейте небольшую часть раствора в установленную строго горизонтально чашку Петри так, чтобы дно чашки было покрыто тонким слоем.

Пронаблюдайте за развитием волнового процесса изменения концентрации раствора.

9. Большую часть приготовленного раствора оставьте в сосуде и наблюдайте за происходящей в нем периодической сменяемостью цвета раствора, фиксируя секундомером различные этапы протекания реакций. Сравните результаты своих наблюдений по п.6 и 9.

10. Результаты наблюдений оформить в виде временной последовательности цветовых состояний системы и её описания. Объясните полученные результаты с точки зрения термодинамики неравновесных процессов и теории самоорганизации.

3. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Что понимается под самоорганизацией термодинамической системы?
2. При каких условиях в системе можно ожидать проявление самоорганизации?
3. При каких условиях неравновесная система самоорганизуется в виде диссипативной структуры?
4. Что понимается под флуктуациями, какова их роль в процессе самоорганизации?
5. Поясните явление возникновения бифуркаций в динамических системах. Какова связь бифуркаций и флуктуаций?
6. Что изучает теория катастроф?
7. Объясните понятия устойчивости и неустойчивости термодинамической системы. Приведите примеры таких состояний реальных систем.
8. Опишите механизм работы «химических часов».
9. В чем заключается физико-химическая сущность реакции Белоусова-Жаботинского, чем вызвана осцилляция системы?
10. Почему реакция Белоусова-Жаботинского относится к классу автоволновых периодических самоорганизующихся химических систем?
11. Почему реакция Белоусова-Жаботинского затухает во времени?
12. Какова природа поверхностных химических спиральных волн, наблюдаемых при реакции Белоусова-Жаботинского?

4. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Хакен Г. Синергетика: принципы и основы. Перспективы и приложения. В 2-х частях. Пер. с англ. – М.: УРСС: ЛЕНАНД, 2015. – 448 с. (часть 1); 432 с. (часть 2)¹.
2. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. – М.: Мир, 2002.
3. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. – М.: Мир, 1979.
4. Жаботинский А.М. Часы в стакане // Химия и Жизнь, 1973, №7.
5. Ссылки в Интернете по запросу: «химические часы», «реакция Белоусова-Жаботинского», «реакция Бриггса-Раушера», «самоорганизация», «синергетика».

¹ - для «продвинутых» студентов с высоким уровнем математической подготовки

Лабораторная работа №8

ИЗУЧЕНИЕ ЯВЛЕНИЙ СТРУКТУРНОЙ САМООРГАНИЗАЦИИ ПРИ ЗАКАЛКЕ И ОБЛУЧЕНИИ МЕТАЛЛОВ

ЦЕЛЬ РАБОТЫ: знакомство с методами обработки металлических сплавов, приводящими к неравновесному структурообразованию; изучение закономерностей самоорганизации структуры и особенностей неравновесного структурного состояния металла при воздействии концентрированных потоков энергии.

1. ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Наиболее глубоко изученными с точки зрения структурообразования являются промышленные металлы и металлические сплавы. Изучение процесса формирования их структуры долгие годы проходило в условиях, близких к равновесным. К таковым, например, относятся процессы кристаллизации металлов в металлургическом и литейном производстве или превращения, происходящие при термической обработке сталей и других сплавов. Управляющим параметром, который определяет равновесные/неравновесные условия и устойчивые/неустойчивые процессы в этих технологиях является температурный градиент - $grad\ T$. Он тождественен параметру λ , рассмотренному в предыдущей лабораторной работе №7 (см. рисунки 2 и 3). Достижение критического значения этого параметра $\lambda_{кр}$ при влиянии флуктуаций в точке бифуркации приводит к самоорганизации структуры - к появлению нетривиальных, метастабильных, особых структур с уникальными свойствами.

При поверхностной обработке материалов (лазерная, плазменная, электронная, ионная и т.п.) $grad\ T \equiv \lambda$ в поверхностном слое однозначно определяется плотностью мощности энергии на поверхности материала W и его теплопроводностью. Поэтому из всех источников энергии, используемых для поверхностной обработки, принято выделять группу источников, обеспечивающих «концентрированные потоки энергии» (КПЭ), для которых $W \geq 100\text{ МВт/м}^2$ (10 кВт/см^2). Некоторые примеры тепловых источников и достигаемые при их использования значения плотности мощности W (в МВт/м^2) приведены ниже:

Солнце на поверхности Земли	5,0
Электрический разряд высокого давления	30
Гелий-неоновый лазер	$4 \cdot 10^2$
CO ₂ -лазер	$4 \cdot 10^5$
Аргоновый лазер	$4 \cdot 10^6$
Рубиновый лазер	$5 \cdot 10^{11}$
Неодимовый лазер на Y-Al-гранате	$4 \cdot 10^{13}$
Электронный пучок	$5 \cdot 10^2$
Электрическая дуга	10^2
Водородно-кислородная горелка	30
Кислородно-ацетиленовая горелка	10

Наиболее мощным источником КПЭ из приведенных выше является импульсные лазеры, в которых используется излучение оптического квантового генератора с твердотельным активным элементом в виде цилиндра (стержня) из граната или стекла с неодимом К источникам такого типа относятся отечественные лазерные установки «Квант-16», «Квант-18», ГОС-30, ГОР-300. Они позволяют генерировать импульсы с энергией излучения $E = 5 \dots 90$ Дж и длительностью от $\tau = 3 \dots 10$ мс. При этом радиус пятна облучения целесообразно ограничивать интервалом $r = 1,5 \dots 3,5$ мм, так как при больших значениях r плотность мощности W сильно падает (ниже уровня КПЭ), а при меньших – наоборот чересчур возрастает и приводит к проплавлению и даже испарению металла. Лазеры такого типа способны создавать на поверхности металла очень высокую плотность мощности, а, следовательно, могут обеспечивать закритические значения термического управляющего параметра $grad\ T \equiv \lambda > \lambda_{кр}$ и, тем самым, приводить к самоорганизации структуры материала в существенно неравновесных условиях обработки. Импульсная лазерная обработка формирует в поверхностном слое облучаемого металла $grad\ T = 5 \cdot (10^6 \dots 10^7)$ °С/м. При этом вся энергия облучения аккумулируется в поверхностном слое очень малой толщины $h = 40 \dots 200$ мкм, который нагревается (за счет энергии лазерного излучения) и охлаждается (за счет высокой теплопроводности металла) со сверхвысокими скоростями - более 10^4 °С/с. Часто в прикладных исследованиях в качестве управляющего параметра используется именно скорость охлаждения $V_{охл}$ - параметр, эквивалентный $grad\ T$.

Благодаря таким «экстремальным» условиям обработки, металл (или металлический сплав) при лазерной обработке переводится в неравновесное структурное состояние, которое фиксируется за счет высокой $V_{охл}$. То есть высокая скорость охлаждения не позволяет металлу релаксировать – вернуться в равновесное структурное состояние (с минимальным для данных условий значением свободной энергии). В результате при лазерной обработке в металлических сплавах формируются метастабильные структуры с целым рядом специфических особенностей: «белые слои»; аморфизованные, нанокристаллические и фрагментированные структуры; ячеистые дислокационные субструктуры; трансформируется строение высокоугловых границ...

Все эти типы структур, строго говоря, не могут быть отнесены к разряду *диссипативных*, поскольку описанная система (металл или металлический сплав) при обработке КПЭ не является открытой системой. В открытой системе обмен энергией и веществом с окружающей средой поддерживается во времени на определенном уровне, обеспечивающем существование диссипативной структуры. При лазерной обработке в металлическом сплаве может фиксироваться (замораживаться) метастабильная структура, сформировавшаяся в процессе нагрева, либо структура дополнительно трансформируется при охлаждении за счет протекающих в ней неравновесных фазовых превращений, благодаря чему металлический сплав приобретает ряд упоминавшихся специфических особенностей строения и свойств.

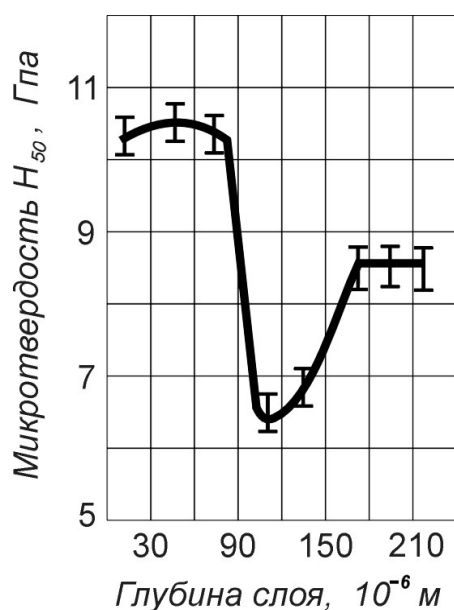


Рисунок 1 – Распределение твердости по глубине зоны лазерной обработки в стали У8А с исходной мартенситной структурой

В качестве интегрального показателя структурных изменений материала при лазерной обработке обычно используется микротвердость. Типичный график изменения микротвердости по глубине лазерно закаленной стали показан на рисунке 1. В центре лазерного пятна на рисунке 1 (на глубине до 80 мкм) наблюдается заметный эффект упрочнения – до 10,5 ГПа по сравнению с исходной мартенситной структурой стали У8А, которая имела уровень твердости – 8,5 ГПа. По периферии лазерного пятна (на глубине 80...170 мкм) имеется зона отпуска с минимумом твердости – 6,5 ГПа (на глубине ~110 мкм).

Эффект упрочнения в зоне лазерного облучения при соответственно подобранных режимах лазерной обработки характерен для всей номенклатуры сталей в любом исходном структурном состоянии. Сравнительные экспериментальные данные по нескольким маркам приведены в таблице 1, где хорошо виден высокий уровень твердости в зоне лазерной закалки. Причем, вне зависимости от марки стали и ее исходной структуры эффект упрочнения оказывается соизмерим (за вычетом влияния карбидных фаз внедрения WC в сталях ХВГ и Р6М5, где этот эффект выше, чем в других марках).

Таблица 1 - Сравнительная микротвердость сталей после объемной и лазерной термообработки

Марка стали	Микротвердость, ГПа		
	Лазерная закалка	Объемная закалка и отпуск по стандартному режиму	Эффект упрочнения, %
38ХНЗМФ	7,5 – 8,5	5,9 – 6,2	21 – 44
У8А	8,9 - 9,5	7,4 - 7,6	17 – 28
У10А	9,2 - 9,7	7,5 - 7,8	18 – 29
У12А	9,0- 9,4	7,6 - 7,8	15 – 24
ШХ15	9,5 – 10,3	7,8 – 8,0	19 – 32

ХВГ	9,8 - 11,5	8,1 - 8,4	17 – 42
X12M	9,5 - 11,0	7,8 - 8,0	19 – 28
P6M5	9,8 - 12,0	7,5 - 7,8	26 - 60

Соизмеримость уровня упрочнения в зонах лазерного облучения различных по составу и исходной структуре сталей является косвенной характеристикой универсальности (единообразия) механизмов формирования метастабильных структур лазерной закалки. При воздействии КПЭ на металл эти механизмы проявляются в основном на субструктурном уровне и характеризуются неравновесным (особым) поведением и взаимодействием дефектов кристаллического строения – преимущественно вакансий и дислокаций. Так, например, в условиях существования высоких температурных градиентов (*grad T*) неизбежно возникают мощные потоки вакансий. Взаимодействуя с ними, полные краевые дислокации, являющиеся стоками для вакансий, нелинейно изменяют конфигурацию своих линий, как это показано на рисунке 2.

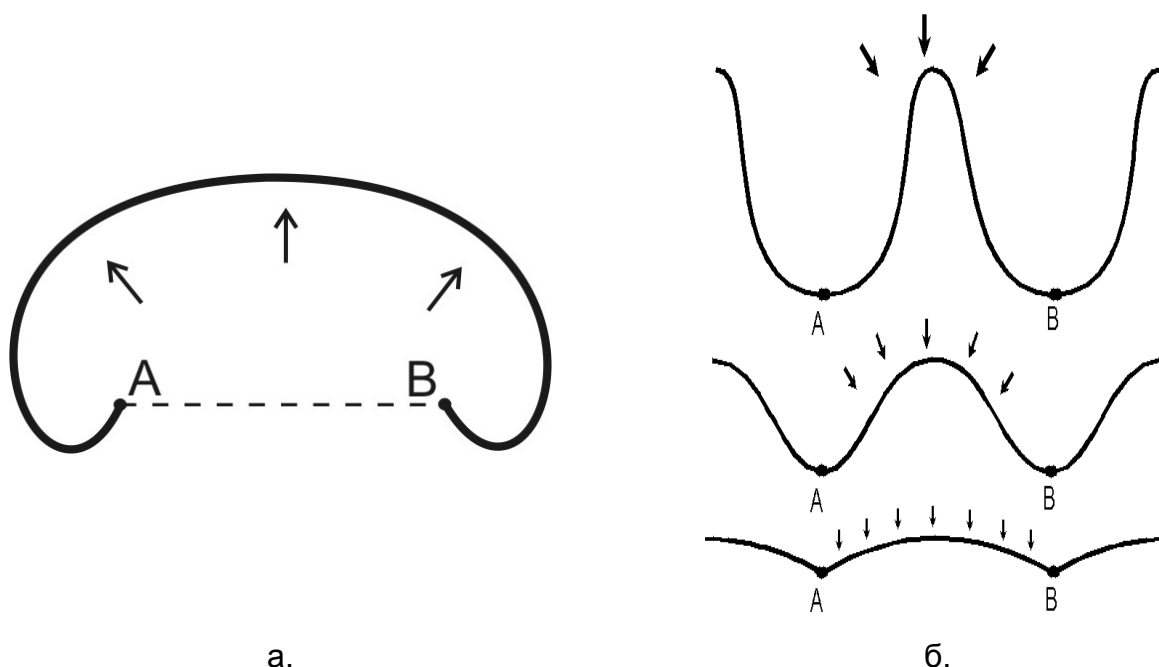


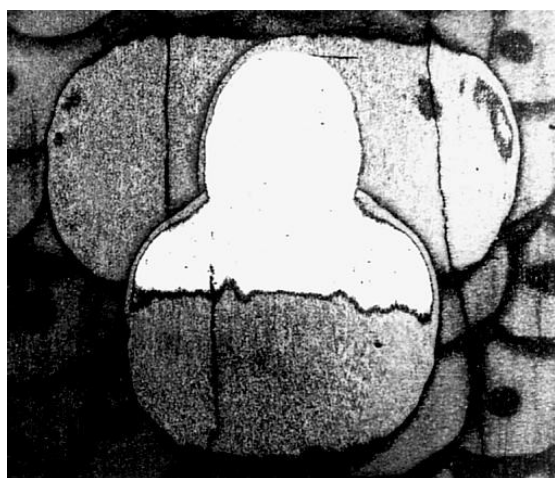
Рисунок 2 – Равновесное (а) и неравновесное (б) изменение конфигурации дислокационной линии при взаимодействии с вакансиями (поток вакансий движется сверху вниз): а – образование дислокационной петли по механизму источника Бардина-Херринга (стрелками показано направление расширения петли); б – эволюция дислокационной линии в мощном потоке вакансий от дугообразной к дипольной (снизу вверх; стрелками показана интенсивность притяжения вакансий к дислокации);

А и В – точки закрепления дислокации

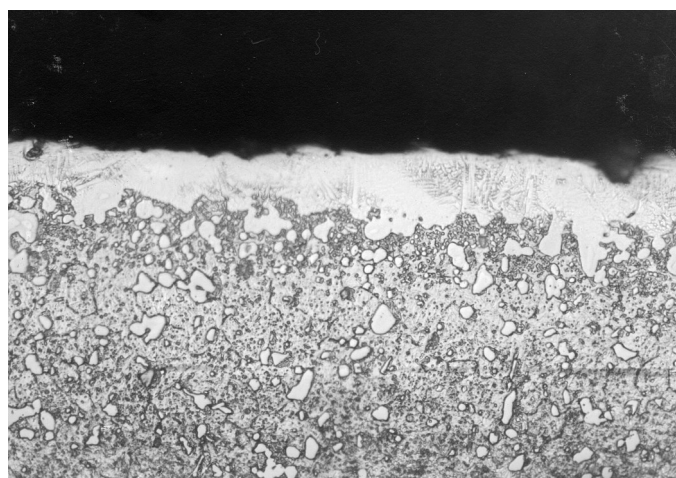
В конфигурации неконсервативно движущегося в потоке вакансий дислокационного фронта появляются (рисунок 2б): полупетля в вершине, дипольный участок (параллельные ветви) и пассивные (малоподвижные) участки у точек

закрепления дислокации А и В. Нелинейное уменьшение радиуса кривизны полупетли приводит к *неустойчивости* дислокационного фронта в вершине. При достижении критического размера радиуса кривизны начинается диссоциация (расщепление) вершины полупетли, которое при соответствующем уровне температур инициирует фазовый переход на дипольном участке дислокации (например, ГЦК → ОЦК в сталях).

Таким образом, фазовый переход на уровне кристаллической решетки в неравновесных условиях по механизму и кинетике отличается от равновесного (диффузионного или сдвигового). Причем, неравновесность (механизм вакансионно-дислокационных взаимодействий) и неустойчивость (дислокационной полупетли с малым радиусом), всегда сопровождающие процесс самоорганизации, проявляются на субструктурном уровне дефектов кристаллического строения, а на микроструктурном уровне это приводит самоорганизации структуры в виде морфологических особенностей существенно неравновесных метастабильных структур (лазерная закалка), отличающихся от структур равновесных или полученных при небольших отклонениях условий от равновесных (объемная закалка). Так, описанный выше неравновесный фазовый переход в сталях приводит к формированию особой структуры «белого слоя», часто формирующейся при лазерной обработке и показанной на рисунке 3.



а.



б.

Рисунок 3 – Структура «белого слоя» в стали X12M после лазерной обработки:
а – поверхность обработанного образца после многократного наложения лазерных пятен ($\times 15$); б – поперечный микрошлиф с частично оплавленным «белым слоем» на поверхности ($\times 500$)

В описанном примере формирования неравновесной метастабильной структуры «белого слоя» характерным образом проявляют себя фундаментальные законы синергетики и неравновесной термодинамики, в соответствии с которыми по мере возрастания степени неравновесности в системе происходят два характерных явления: изменяется иерархия структурных элементов-энергоносителей и

уменьшается масштаб взаимодействия этих элементов. Эти процессы связаны с тем, что системе необходимо с большей интенсивностью осуществлять диссипацию подводимой энергии и для этого она структурируется с привлечением новых собственных ресурсов. Так при обработке поверхности металла с использованием КПЭ в качестве новых структурообразующих элементов выступают неравновесные вакансионно-дислокационные взаимодействия, локализованные в очень малом объеме на субструктурном уровне (см. рисунок 2б).

Теоретические исследования показывают, что описанный механизм неравновесных вакансионно-дислокационных взаимодействий обладает высокими диссипативными возможностями, а его энергоемкости достаточно для расщепления вершины дислокационной полупетли и начала фазового перехода, локализованного в области вершины. Далее, в условиях резко снижающейся температуры металла, фазовый переход автокаталитически распространяется на соседние микрообъемы металла. В результате в той части металла, где сформировались термодинамические условия для реализации механизма неравновесных вакансионно-дислокационных взаимодействий (вытягивание и расщепление дислокационных полупетель), неравновесный фазовый переход приводит к образованию нетривиальной метастабильной структуры «белого слоя».

Так в сталях формирование структуры «белого слоя» наблюдается при импульсной лазерной обработке, ударных или ударно-тепловых нагрузках большой мощности (например, в стволах орудий при выстреле), резком жестком трении без смазки «металл по металлу» (например, при торможении железнодорожных колес) и в других подобных процессах поверхностного воздействия с высокими значениями плотности мощности.

2. ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. Под руководством преподавателя или лаборанта ознакомиться с принципами работы, устройством и основными компонентами технологической лазерной установки импульсного действия, предназначенной для поверхностного упрочнения стали (в работе могут быть использованы установки «Квант-16», ГОС-30, ГОР-300 или их аналоги).

2. Подготовить экспериментальные образцы для лазерной обработки, удовлетворяющие требованиям качества поверхности и параллельности сторон (для образцов желательно использовать углеродистые или легированные инструментальные стали типа У8-У12, Х, Х12, Р6М5 и т.п.). Измерить исходный уровень микротвердости образцов.

3. Под руководством преподавателя или лаборанта выбрать режим лазерной обработки - технологические параметры облучения (напряжение разряда, энергию импульса, диаметр пятна, коэффициент перекрытия и т.д.).

4. Упрочнить поверхность экспериментального образца дискретными импульсами, располагая лазерные пятна на заданной площади внахлест (с учетом выбранного коэффициента перекрытия).

5. Обработанные образцы использовать для изготовления двух микрошлифов (поперечного и поверхностного), пригодных для микроструктурного исследования. Микрошлифы могут располагаться как на одном, так и на разных образцах так, чтобы они давали полное пространственное представление о геометрии и микроструктурных особенностях зоны лазерной обработки.

6. С помощью микротвердомера измерить микротвердость зоны лазерной обработки как на поперечном, так и на поверхностном шлифе. Сопоставить полученные данные с исходным уровнем микротвердости образцов.

7. Оценить глубину зоны лазерной закалки и построить график изменения микротвердости по глубине зоны (аналогично примеру, приведенному на рисунке1).

8. Выполнить микроструктурный анализ обработанной зоны на поперечном и поверхностном микрошлифах, выявляя характерные особенности полученной метастабильной структуры (характер кристаллизации в оплавленной зоне, наличие «белого слоя», области наследования исходной структуры и области рекристаллизации, фрагментация структуры, изменение морфологии высокоугловых границ и т.д.).

9. Сравнить выявленные после лазерной обработки особенности неравновесного структурообразования с особенностями метастабильных структур, представленными в кафедральном атласе микроструктур (выдается преподавателем).

10. Оформить отчет о выполнении работы с изображением и описанием выявленных структурных особенностей неравновесного структурообразования металлических сплавов, формирующихся при обработке КПЭ.

3. СОДЕРЖАНИЕ ОТЧЕТА

1. Цель работы.

2. Краткая характеристика явлений структурной самоорганизации металлических сплавов при поверхностной обработке концентрированными потоками энергии.

3. Результаты измерения микротвердости стальных образцов после импульсной лазерной обработки.

4. Схемы (изображения) метастабильных структур или их особенностей, выявленных после импульсной лазерной обработки.

5. Выводы на основании полученных результатов (изменения микротвердости и особенностей неравновесного структурообразования).

4. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Какие методы поверхностной обработки материалов принято относить к обработке концентрированными потоками энергии (КПЭ)? Назовите критерий.

2. Приведите примеры технологий обработки с использованием КПЭ.

3. Какими параметрами характеризуется степень неравновесности условий при обработке КПЭ?

4. Назовите особенности структуры металлических сплавов, подвергнутых обработке КПЭ.
5. Можно ли ожидать появления диссипативной структуры металла при его обработке КПЭ?
6. Как изменяется твердость инструментальной стали в поверхностном слое после лазерной обработки?
7. Назовите «структурные составляющие» эффекта упрочнения стали при обработке с использованием КПЭ.
8. Приведите пример неравновесного процесса, наблюдаемого на субструктурном уровне при обработке металла КПЭ.
9. Опишите условия формирования и особенности строения структуры «белого слоя». Как Вы думаете – чем объясняется его «белизна»?

5. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Кудряков О.В., Варавка В.Н. Феноменология мартенситного превращения и структуры стали / Ростов-на-Дону: Издательский центр ДГТУ, 2004. - 200 с.
2. Кудряков О.В., Пустовойт В.Н. Феноменология фазовых переходов при образовании «белого слоя» в металлических сплавах // Известия вузов. Сев.-Кавказ. регион. Технические науки. 2000, № 2. С. 32-34.
3. Лазерный нагрев и структура стали: Атлас микроструктур / Садовский В.Д., Счастливцев В.М., Табатчикова Т.И., Яковлева И.Л. - Свердловск: Изд-во УрО АН СССР, 1989. – 101 с.

Лабораторная работа №9

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО СТРУКТУРО- ОБРАЗОВАНИЯ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ

ЦЕЛЬ РАБОТЫ: знакомство с алгоритмом и методикой компьютерного моделирования неравновесных процессов, получение практических навыков в области компьютерного моделирования процесса структурной самоорганизации.

1. ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И МЕТОДИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

В предшествующей лабораторной работе «Изучение явлений структурной самоорганизации при закалке и облучении металлов» были рассмотрены условия для реализации механизма неравновесных вакансионно-дислокационных взаимодействий (ВДВ) с инициацией фазового перехода в вершине дислокационной полупетли и последующим формированием структуры «белого слоя». Такой процесс неравновесной структурной самоорганизации наблюдается, например, во многих сталях при импульсной упрочняющей лазерной обработке. Важной чертой этого процесса является его бифуркационный характер, где роль флуктуаций выполняет совокупность значений начального пересыщения вакансиями x_0 и исходной

плотности дислокаций в стали y_0 . Величина x_0 определяется значением плотности мощности на поверхности (например, при импульсной лазерной обработке), она задает интенсивность потока вакансий. Поскольку дислокации являются стоками для вакансий, то интенсивность этого потока определяет возможность формирования диполя на линии дислокации и последующего расщепления вершины полупетли (см. рисунок 2б в лабораторной работе №8), где локализуется неравновесный фазовый переход. А величина y_0 является структурной характеристикой стали и определяет объем металла, охваченный этим неравновесным фазовым переходом. Результатом неравновесных вакансионно-дислокационных взаимодействий, как описано в предыдущей лабораторной работе, является формирование нетривиальной метастабильной структуры «белого слоя». Однако, если поток вакансий недостаточен или исходная плотность дислокаций слишком мала, то механизм неравновесных вакансионно-дислокационных взаимодействий не реализуется и структура «белого слоя» не образуется. Таким образом, совокупность значений x_0 и y_0 – начальная точка с координатами $(x_0; y_0)$ – определяет конечный результат структурной эволюции в неравновесном процессе. То есть точка $(x_0; y_0)$ выполняет роль флуктуации, подталкивающей систему к формированию той или иной структуры.

С помощью известных методов анализа поведения динамических систем (динамический анализ) вероятный путь структурной эволюции системы может быть смоделирован на компьютере. На кафедре «Физическое и прикладное материаловедение» разработана специальная программа «DynSys» для компьютерного моделирования поведения такой динамической системы как вакансионно-дислокационные взаимодействия в стали при различных условиях поверхностной обработки [Варавка В.Н., Баранов И.В., Кудряков О.В. Исследование и визуализация дискретных динамических систем // Св. о рег. прогр. для ЭВМ №2007612319 от 01.06.2007; заявка №2007611253.], с помощью которой возможно прогнозировать, например, формирование структуры «белого слоя».

Характеристика исследуемой динамической системы

Если пересыщение вакансиями в момент времени t обозначить $x(t)$, а плотность дислокаций в момент t обозначить через $y(t)$, то взаимосвязь их относительных скоростей изменения как раз и составит исследуемую динамическую систему:

$$\begin{cases} \frac{\dot{x}}{x} = \frac{x_{k+1} - x_k}{x_k} = -\alpha - \beta \cdot y \\ \frac{\dot{y}}{y} = \frac{y_{k+1} - y_k}{y_k} = \gamma \cdot x \end{cases} \quad (1)$$

где $\alpha, \beta, \gamma > 0$ - коэффициенты.

Система (1) с компонентами x и y представляет собой выраженную в виде дискретных отображений систему дифференциальных уравнений, описывающих кинетику неравновесных вакансионно-дислокационных взаимодействий.

В системе (1) x в отсутствие y убывает с некоторым постоянным коэффициентом α , что физически означает отжиг вакансий не на дислокациях, а на других стоках (например, высокоугловых границах или свободных поверхностях); а y в отсутствие x остается постоянным. Снижение x пропорционально y , а прирост y пропорционален x . В дискретном виде система (1) запишется как:

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k - \alpha \cdot x_k - \beta \cdot x_k \cdot y_k \\ y_{k+1} = y_k + \gamma \cdot x_k \cdot y_k \end{cases} \quad (2)$$

и введем в систему управляющие параметры:

$h \propto V_{охл}$ – скорость охлаждения; $q \propto \dot{\epsilon}$ – скорость локальной микропластической деформации. Не вдаваясь в математические подробности параметрической дискретизации, проведенной по методу Эйлера, приведем её результат, записанный в наиболее компактной форме:

$$\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} + \frac{h}{2} \begin{pmatrix} f(x_k, y_k) + f(x_k + q \cdot f(x_k, y_k), y_k + q \cdot g(x_k, y_k)) \\ g(x_k, y_k) + g(x_k + q \cdot f(x_k, y_k), y_k + q \cdot g(x_k, y_k)) \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$f(x, y) = -\alpha \cdot x - \beta \cdot x \cdot y$$

$$g(x, y) = \gamma \cdot x \cdot y$$

Полученная система отображений является частным случаем динамической системы Лоттки-Вольтерра, приведенной к двухпараметрической форме. Прежде, чем приступить к анализу этой системы, отметим некоторые её особенности, необходимые для понимания физической природы этой системы, для оценки её возможностей и для проведения количественного анализа процесса структурообразования.

Параметры динамической системы (h и q)

Наиболее адекватно процесс охлаждения металлического сплава при обработке концентрированными потоками энергии (КПЭ) характеризуется экспоненциальным законом (при рассмотрении покрытия целесообразно использовать закон для $grad T$):

$$\frac{T_1}{T_1^0} = e^{-\varphi(t_1 - t_0)} \quad (4)$$

где φ – константа охлаждения, c^{-1} (эта величина представляет собой среднюю характеристическую скорость охлаждения металла в определенном температурном интервале); $t = t_1 - t_0$ – время охлаждения от температуры T_1^0 до температуры T_1 .

Внешний управляющий параметр, характеризующий степень термической неравновесности системы (3), введем как величину $h = m \cdot \varphi^{-1}$ [с], где m – коэффициент пропорциональности, зависящий от условий внешнего воздействия (например, от метода обработки КПЭ). Для практических целей подбор коэффициента m – несложная задача, а для величины φ имеются, например, следующие экспериментальные данные:

- импульсная лазерная обработка..... 460.....1540 c^{-1}

- детонационное упрочнение 90.....170 с⁻¹
- термообработка ТВЧ с концентрацией магнитного потока 6.....11 с⁻¹
- объемная закалка (непрерывное охлаждение) 0,5.....1,2 с⁻¹

Аналогичным образом введем второй управляющий параметр, характеризующий степень механической (деформационной) неравновесности системы: $\dot{\epsilon} = \tilde{n} \cdot \left(\dot{\epsilon} \right)^{-1}$ [с], где \tilde{n} также коэффициент пропорциональности, зависящий от способа поверхностной обработки. интервалы значений величины $\dot{\epsilon}$, приведенны на рисунке 1.

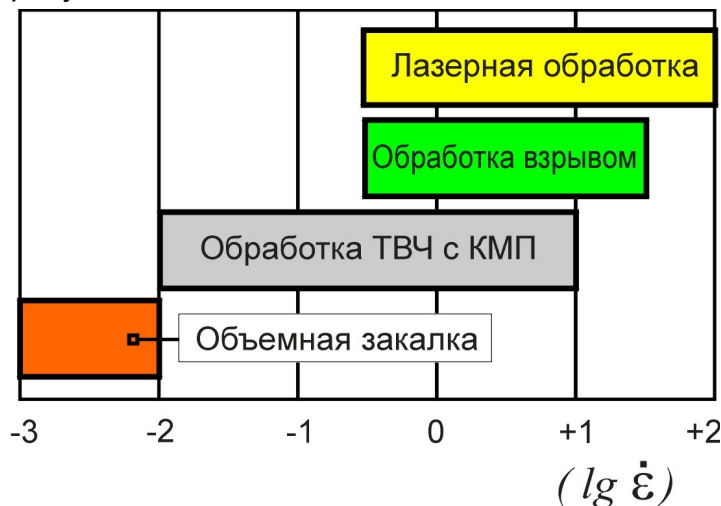


Рисунок 1 - Значения скорости локальной пластической деформации $\dot{\epsilon}$, характерные для различных способов упрочняющей обработки

Коэффициенты динамической системы (α, β, γ)

Первое уравнение системы (1) выражает релаксацию вакансионного пересыщения. По своей физической природе коэффициенты γ_A и γ_X представляют собой относительные скорости изменения вакансионного пересыщения. Этот процесс определяется тем, насколько быстро вакансии достигнут стоков. Поэтому оба коэффициента могут быть выражены через величину Γ_V / k , где Γ_V частота скачков вакансий при миграции в потоке, а \tilde{k} среднее число скачков, которое должна совершить вакансия до достижения стока (предполагается, что k не зависит от температуры):

$$\Gamma_V = \nu \cdot \exp \left(- \frac{E_M^V}{kT} \right) \quad \text{где } E_M^V - \text{энергия активации миграции вакансий;}$$

$$\nu = 10^{13} \text{ с}^{-1} - \text{множитель, определяемый в статистической теории абсолютных скоростей реакций Эйринга.}$$

Величина Γ_V задает скорость перемещения вакансии и может быть выражена через коэффициент диффузии вакансий D_V , межплоскостное расстояние d и коэффициент корреляции ψ :

$$\Gamma_V = \frac{6 \cdot D_V}{d^2 \psi} \quad (5)$$

где $\psi = 0,654$ – для примитивной кубической (ПК) решетки; $0,727$ – для ОЦК; $0,781$ – для ГЦК – использование этого коэффициента показывает существование

определенной корреляции между двумя последовательными скачками вакансий, что характерно для потока вакансий (если $\psi=1$, то движение вакансий некоррелировано).

Коэффициент α характеризует процесс релаксации вакансионного пересыщения в отсутствие дислокаций, что означает отжиг вакансий на других стоках. Основными стоками вакансий в отсутствие дислокаций являются границы зерен или фаз, поэтому выражение для расчета коэффициента α должно включать размерный фактор, характеризующий зерновой состав сплава, т.е. для коэффициента α : $k=\lambda/a$ (λ - размер зерна; a – параметр решетки). Коэффициент β характеризует тот же процесс релаксации, но через дислокационные стоки. Поэтому в выражении для β должна фигурировать величина $k=1/(a\sqrt{\rho_0})$, выражающая расстояние между дислокациями в конфигурации пространственной сетки (ρ_0 - исходная плотность дислокаций, эквивалентная ранее введенному значению y_0).

Тогда для α и β окончательно получаем:

$$\alpha = \frac{6 \cdot D_V \cdot a}{d^2 \cdot \psi \cdot \lambda} \quad \text{и} \quad \beta = \frac{6 \cdot D_V \cdot a \cdot \sqrt{\rho_0}}{d^2 \cdot \psi} \quad (6)$$

Второе уравнение системы (1) выражает относительную скорость прироста плотности дислокаций. Механизм этого прироста описан в предыдущей лабораторной работе (см. рисунок 2б). Он реализуется через неконсервативное движение дислокации при вакансионно-дислокационных взаимодействиях и выражается через скорость переползания дислокации V_n . Для условий «термоудара», что характерно для обработки с использованием КПЭ, рекомендуется значение:

$$V_n \approx \frac{8 \cdot D_S}{b} \quad (7)$$

где D_S – коэффициент самодиффузии атомов; b – краевая компонента вектора Бюргерса.

Коэффициент γ представляет собой усредненное значение скорости переползания закрепленного на концах дислокационного отрезка длиной L в условиях «импульсного термоудара». Перемещение переползающей дислокации будет лимитировано размерами ячейки пространственной дислокационной сетки $L = \rho_0^{-\frac{1}{2}}$. Тогда значение коэффициента γ будет иметь вид:

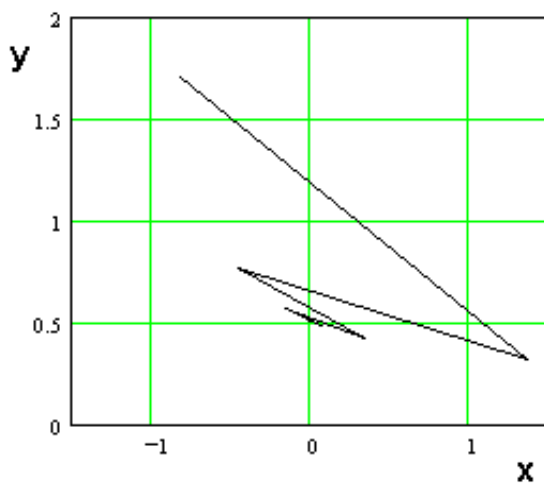
$$\gamma = \frac{8 \cdot D_S}{b \cdot L} \quad (8)$$

Полученные значения коэффициентов (7) и (8) рассчитываются только на базе структурных и кинетических характеристик материала и, в отличие от параметров h и q , не зависят от способа внешнего воздействия на материал.

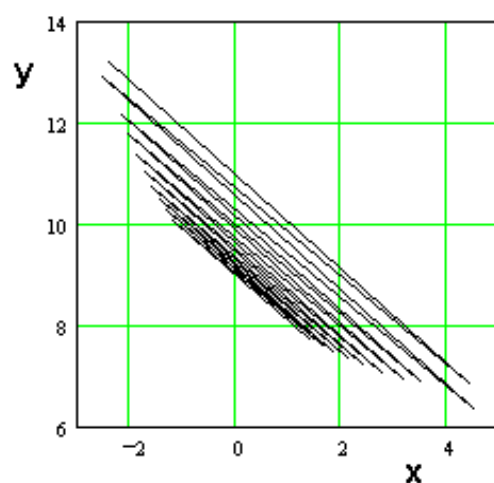
Итерационная система и ее возможности

Для проведения итераций в динамической системе (1)-(3) как раз и разработана программа «DynSys». С её помощью для заданной системы дискретных отображений (3) определяются:

- множество неподвижных точек динамической системы (то есть равновесие системы): для неравновесных ВДВ это выражается в релаксации вакансионного пересыщения, что математически означает $x_k=0$ для любых начальных условий $(x_0; y_0)$, и в формировании определенной дислокационной конфигурации с плотностью ρ , соответствующей конечному значению $y_k \neq 0$;
- устойчивые (притягивающие) и неустойчивые неподвижные точки динамической системы, первые из них в динамике носят название аттракторов; каждый аттрактор имеет свой бассейн притяжения - множество начальных точек $(x_0; y_0)$, траектории которых сходятся к аттрактору; физическим смыслом аттрактора является определенная, устойчивая в данных условиях дислокационная конфигурация, отвечающая специфическому типу метастабильной структуры сплава (в частности, «белому слою»);
- области фазового пространства со сходящимися и расходящимися траекториями начальных точек $(x_0; y_0)$; физическая интерпретация расходящихся траекторий в том, что для таких начальных условий $(x_0; y_0)$ при заданных параметрах h и q ВДВ затруднены или невозможны;
- скорость сходимости траекторий в фазовом пространстве $(x; y)$ в виде количества итераций, за которое начальная точка $(x_0; y_0)$ достигает неподвижной точки $(x_k=0; y_k)$; скорость сходимости траекторий характеризует интенсивность ВДВ: быстрая сходимость является признаком существенной нелинейности ВДВ, происходящих на значительном удалении от равновесия; именно в этом случае ВДВ наиболее значительно влияют на фазовые переходы и процессы структурообразования (примеры быстрой и медленной сходимости траекторий показаны на рисунке 2);



а.



б.

Рисунок 2 - Примеры быстрой (а) и медленной (б) сходимости траекторий в фазовом пространстве $(x; y)$. Число «витков» траектории соответствует количеству итераций. Иллюстрации получены методом сечений Пуанкаре с использованием пакета «MathCAD». Численные данные:

$$\text{а) } h=1,0; q=0,93; x_0=0,9; y_0=0,9; x_k=0; y_k=0,503;$$

$$\text{б) } h=0,2; q=1,0; x_0=6; y_0=6; x_k=0; y_k=9,08.$$

- области фазового пространства, в которых исследуемая динамическая система является диссипативной: математически система (3) диссипативна, если модуль её якобиана меньше единицы; на физическом уровне диссипативность означает, что подводимая энергия остается в системе, перераспределяется в ней и переводит систему на новый структурный уровень; в нашем случае механизмом диссипации являются неравновесные ВДВ, поэтому недиссипативные области фазового пространства нашим задачам не отвечают и могут быть исключены из рассмотрения;
- множество значений параметров h и q для заданной точки (x, y) , при которых система (3) является диссипативной, а траектории этой точки являются сходящимися, то есть программа позволяет моделировать пространство управляющих параметров (h, q) по заданному типу структуры сплава.

Для каждой точки начальных условий программа строит траекторию и подсчитывает количество итераций до достижения точки-аттрактора, расположенной на вертикальной оси. Области точек фазового пространства, имеющих равное количество итераций, программа раскрашивает соответствующими цветами линий уровня. Окно программы приведено на рисунке 3.

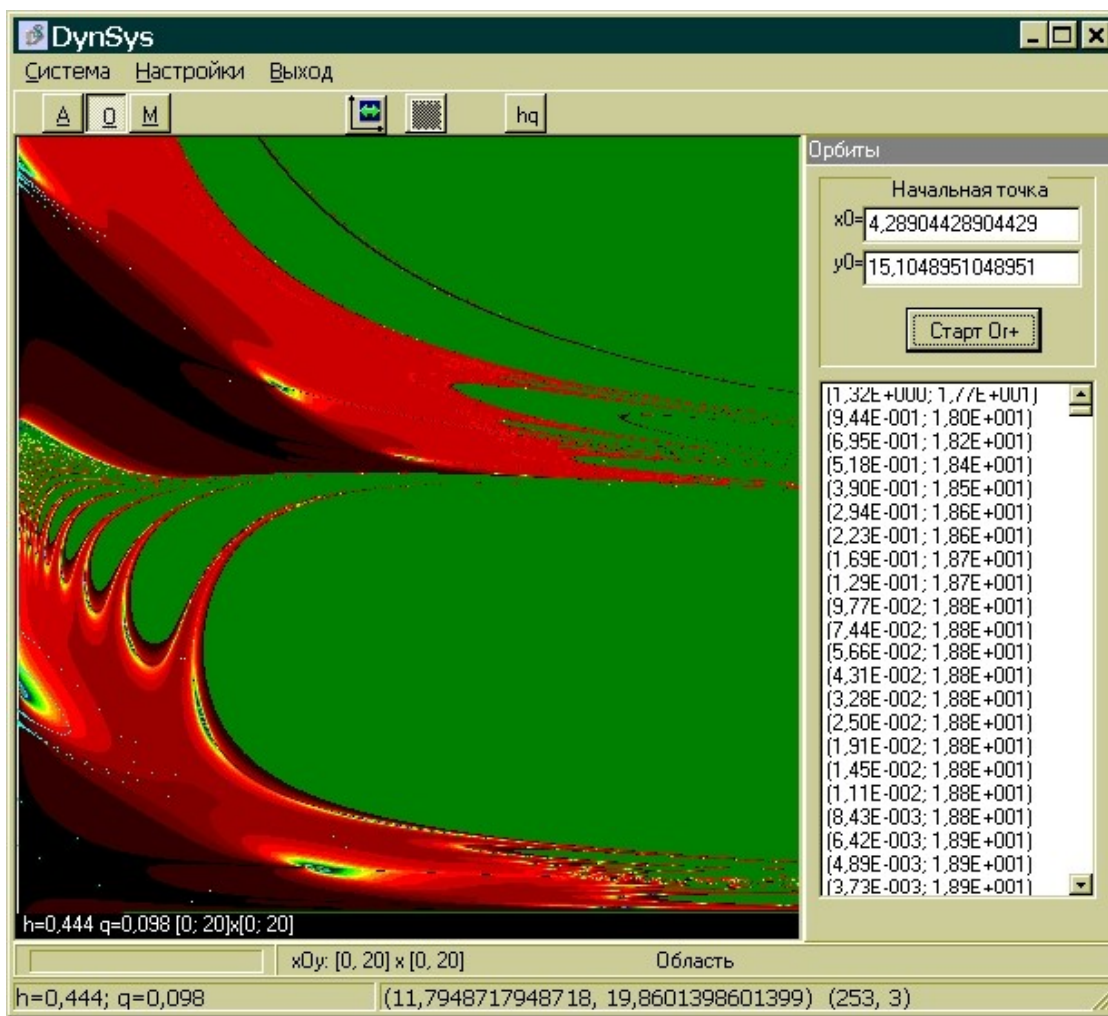


Рисунок 3 - Окно программы «DynSys». Показано фазовое пространство компонент (x;y) в режиме построения траекторий (орбит) на фазовом пространстве

Данные, показанные на рисунке 3, в технологической практике соответствуют импульсной лазерной обработке ($h=0,444$; $q=0,098$) низкоуглеродистой стали ($x_0=4,3$) в состоянии со средней/высокой степенью деформации ($y_0=15,1$). Динамический анализ (рисунок 3) для таких исходных данных предсказывает относительно высокую интенсивность ВДВ («быстрая» сходимость траектории) с возрастанием плотности дислокаций ($x_k=0$; $y_k=18,9$) и образованием структуры «белого слоя».

Таким образом, в разделе рассмотрены теоретические и методические основы применения анализа динамических систем к проблемам изучения неравновесных процессов формирования структуры металлических сплавов при их обработке с использованием КПЭ; а также инструмент (компьютерная программа «DynSys») для моделирования таких процессов, которые не поддаются прямому экспериментальному исследованию. Общий алгоритм подхода к моделированию подобных существенно неравновесных процессов, происходящих в сплошной среде и недоступных для прямого наблюдения, состоит в следующем. Процесс должен быть описан системой дифференциальных уравнений, число которых равно числу

анализируемых компонент. В этом случае исследуемая реальная физическая система становится анализируемой динамической системой. На первом этапе диффуравнения записываются в виде дискретных отображений по типу систем (1) или (2). Затем система отображений с помощью известных методов (Эйлера, Хена и т.д.) переводится в параметрическую форму, аналогичную выражению (3). Количество управляющих параметров зависит от задач анализа и имеющихся экспериментальных данных. Параметрическая форма дискретных отображений визуализируется с использованием подходящей компьютерной программы. Визуализация осуществляется в форме изображений на фазовом пространстве компонент в виде дискретных траекторий или потоков, исходящих из заданной начальной точки с исходными значениями компонент. Для наглядности и естественного восприятия процесса визуализации число компонент, образующих фазовое пространство, должно быть равно двум (фазовая плоскость) или трем (фазовое пространство). Направление траекторий или потоков, построенных компьютером, указывает направление эволюции процесса. Варьируемой величиной при этом являются управляющие параметры, в зависимости от заданных значений которых, на траекториях или потоках компонент могут наблюдаться замкнутые контуры (предельные циклы), притягивающие точки или множества (аттракторы) и другие особенности. Как правило, каждой особенности фазовой траектории анализируемой динамической системы соответствует особое структурное состояние реальной физической системы.

2. ИНТЕРФЕЙС И РАБОТА МОДЕЛИРУЮЩЕЙ КОМПЬЮТЕРНОЙ ПРОГРАММЫ «DynSys»

Верхняя часть окна программы (рисунок 4) содержит Меню программы пункты «Система», «Настройки», «Выход». Пункт «Система» – задание коэффициентов исходной системы отображений γ_{λ} , γ_x и γ_{λ} . Пункт «Настройки» – настройки алгоритма и сохранение настроек программы:

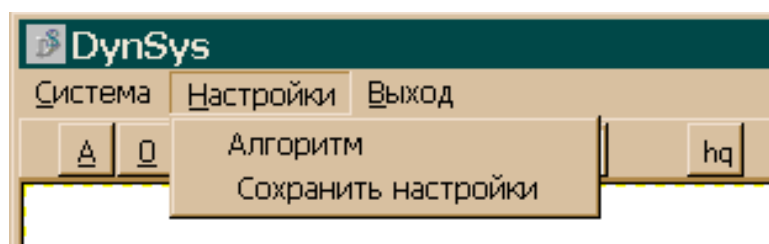


Рисунок 4 – Меню моделирующей компьютерной программы

В пункте «Настройки \ Алгоритм» можно указать: радиус окружности (предельное количество итераций), за которой для траекторий начинается «бесконечность»; число итераций динамической системы при построении орбиты точки и т.п.

Ниже Меню расположена панель с кнопками управления. Кнопка «А» включает панель для построения аттракторов и цветовых линий уровня на плоскости (x,y) .

Кнопка «О» включает панель для построения орбит точек на плоскости (x,y) . Кнопка «М» включает панель для построения квазิมножества Мандельброта – плоскость параметров (в настоящей лабораторной работе эта опция программы не используется). Следующая (слева направо) кнопка задает размер прямоугольника фазовой плоскости (x,y) . Предпоследняя кнопка задаёт размер картинки в пикселях (не более, чем 1000×1000 пикселей). Наконец, последняя правая кнопка « hq » вызывает диалоговое окно для ввода значений управляющих параметров системы h и q .

После введения в систему необходимых новых значений очередной цикл итераций запускается нажатием кнопки «Вычислять», расположенной на панели «Аттракторы». Синим цветом на фазовой плоскости показаны точки, не принадлежащие области диссипативности динамической системы. Условие диссипативности отображения в данной точке состоит в том, что модуль якобиана отображения в данной точке (x,y) меньше 1. Включить/выключить показ области диссипативности можно при помощи флажка «Область диссипативности».

Панель «Орбиты» позволяет построить орбиту начальной точки (x_0, y_0) . Значения начальной точки (x_0, y_0) могут быть заданы автоматически (подведя курсор к нужной точке фазового пространства и щелкнув на ней мышью) или набраны «вручную» в миниокнах справа. После ввода значений (x_0, y_0) построение орбиты осуществляется нажатием кнопки «Старт Or+». Орбита изображается ярко-голубым цветом, а последовательные значения точек (x_k, y_k) последней построенной орбиты отображаются в списке, который расположен справа на панели.

Существенное значение при работе с моделирующей программой имеет цветовая гамма фазового пространства, так как каждый цвет отвечает множеству начальных точек фазовой плоскости, для которых траектории сходятся к притягивающей точке за равное количество итераций. Способ раскраски и цветовая шкала программы выполнены по следующему алгоритму. Цвет задается нормированным параметром $0 \leq t \leq 1$. Цвет точки рисунка вычисляется по формуле $t=k/M$, где k - число итераций, за которое точка оказывается в малой ε - окрестности оси Oy , а M - число, которое вводится в поле на панели «Аттракторы». Например, введено число $M=200$. Точки, притягивающиеся к вертикальной оси за 200 итераций будут раскрашены ярко голубым цветом ($t=1$), а точки, притягивающиеся за $0 \leq k \leq M$ будут окрашены плавными переходами цветов от голубого через синие, зеленые и желтые оттенки к темно-красному по мере убывания значения k от M до 0. Плавные переходы цветов для значений $t > 1$ в программе не гарантируются.

3. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ИТЕРАЦИЙ

Задачей анализа является описание структуры фазового пространства (x,y) в зависимости от значений управляющих параметров динамической системы –

термического параметра h и деформационного q - и на этой основе прогнозирование поведения материала. Каждый метод обработки характеризуется собственными интервалами значений термического и деформационного параметров. Поэтому для каждого метода будет характерна своя картина фазового пространства в окне моделирующей программы.

В самом общем виде структура фазового пространства субструктурных процессов в двухпараметрическом режиме состоит из четырех областей (см. рисунок 3). Две из четырех областей на всех иллюстрациях всегда имеют одинаковую (однотонную) окраску:

1) темно-зеленая область расходящихся траекторий с аттрактором, лежащим в бесконечности (для субструктурных процессов с начальным значением $(x_0; y_0)$ из этой области физический смысл не определен, а их динамика хаотична);

2) темно-синяя область (на рисунке 3 не показана), в которой исходная система отображений не является диссипативной: субструктурные процессы с начальными значениями $(x_0; y_0)$ из этой области не приводят к эволюции дислокационных конфигураций (к этому нет термодинамического стимула в виде диссипации энергии обработки), то есть субструктурные процессы в этом случае не имеют структурообразующей функции.

Две другие области (из четырех) имеют переменную и тонированную окраску в зависимости от значений параметров h и q :

3) верхняя область нелинейных субструктурных процессов: с точки зрения структурообразования это наиболее интересная область, так как все траектории с начальными значениями $(x_0; y_0)$ из этой области сходятся к одному аттрактору y_s , значение которого на оси Y является границей раздела между верхней нелинейной областью и нижней линейной; эта область характеризует турбулентный режим взаимодействия субструктурных элементов, включающий переползание, множественное скольжение, диссоциацию, аннигиляцию и релаксационные перегруппировки дислокаций под действием избыточных термических и деформационных вакансий и под действием микролокальной пластической деформации; эта область (назовем ее «*аттракторной*») характеризует не просто изменение плотности дислокации от y_0 к y_s , а описывает результат эволюции субструктуры к значению y_s ;

4) нижняя область линейных субструктурных процессов: в этой области все траектории носят линейный характер с практически постоянным наклоном к оси X , то есть субструктурные процессы с начальными значениями $(x_0; y_0)$ из этой области (назовем её «*безаттракторной*») не приводят к эволюции дислокационной структуры, а вызывают лишь относительно небольшое повышение плотности дислокаций за счет изменения их длины (выгибание между точками закрепления) при переползании без взаимодействия дислокаций между собой; эта область, таким образом, характеризует ламинарный режим динамики субструктурных элементов.

Две последние области фазового пространства (аттракторная и безаттракторная) по оси Y разделены значением аттрактора y_s . В двухпараметрическом режиме значение y_s полностью определяется величиной деформационного параметра q . По мере уменьшения q величина y_s возрастает, а вместе с y_s увеличивается и вся область субструктурных процессов (аттракторная + безаттракторная) – её вертикальный размер, измеряемый по оси Y от точки $y=0$, составляет примерно $(2...5) \cdot y_s$.

Если начальное значение $(x_0; y_0)$, выбрано в аттракторной области, то все траектории будут сходиться к соответствующему y_s , которое определяется значением q . Таким образом, параметр q управляет дислокационной структурой; определяя её пороговое значение y_s , которое не может быть превышено при ВДВ. Это соответствует физической природе описываемых процессов: субструктура металла формируется прежде всего за счет взаимодействия дислокаций между собой, что возможно только под действием напряжений (которые и задаются деформационным параметром q), поскольку дислокация по определению - механически активируемый дефект сдвиговой природы.

Термический параметр h определяет скорость сходимости траекторий на фазовом пространстве (x, y) , что в программе «DynSys» характеризуется цветовой гаммой аттракторной и безаттракторной областей фазового пространства. Каждый цветовой оттенок фактически выражает количество дискретных частей (итераций) траектории-орбиты, то есть количество шагов в последовательности вычисления между начальной точкой траектории $(x_0; y_0)$ и неподвижной конечной точкой $(x_s; y_s)$. Моделирующая программа показывает количество итераций, соответствующее выбранной (с помощью курсора) цветовой точке фазового пространства. Для этого в программе предусмотрено миниокно в интерфейсе панели «Аттракторы». На физическом уровне число итераций сходящихся траекторий определяет относительное количество элементарных актов взаимодействия дефектов (взаимодействия типа вакансия-дислокация и дислокация-дислокация) между собой в единицу времени. Чем меньше термический параметр h , тем «медленнее» сходимость, а значит – выше интенсивность субструктурных процессов, включая и ВДВ. При уменьшении h (усиление неравновесности) увеличивается соотношение между размерами безаттракторной и аттракторной областей в пользу последней: по мере снижения h аттракторная область монотонно увеличивается по отношению к нижней безаттракторной области от пропорции 1:1 до 1:4 (при измерении по оси Y от значения $y=0$).

4. ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. Внимательно изучите предыдущие три раздела методического руководства. Если Вы не выпускник отделения теоретической физики московского физтеха и

никогда не работали ассистентом у Ильи Пригожина в Брюсселе, а кроме того, пропустили курс лекций по «Термодинамике неравновесных процессов», то после первого прочтения этих разделов Вы не должны были понять ничего. Это – нормально, поэтому, вчитываясь в каждое слово, изучите эти разделы, как минимум, ещё пару раз. Ни в коем случае не пытайтесь всё запомнить. Старайтесь понять общие принципы, логику и последовательность анализа динамических систем. Лабораторно-практическое занятие, которому посвящено это методическое руководство, рассчитано на подготовленного студента. Поэтому для начала следует овладеть терминологией и, в случае необходимости, воспользоваться конспектом лекций. В случае беспросветного необратимого непонимания можно прибегнуть к априорному студенческому праву подсказок преподавателя. В любом случае никогда не сдавайтесь и идите до конца своих возможностей – работа должна быть выполнена!

2. Если Вы добрались до этого пункта методики, то половина дела, можно считать, сделана. Получите у преподавателя индивидуальное задание для выполнения работы. Задание включает: 1) характеристику исходной структуры стали, подвергаемой поверхностной обработке с использованием КПЭ, в соответствии с заданной характеристикой выбирается начальное значение y_0 ; 2) метод и режим поверхностной обработки стали, в соответствии с которым выбираются начальное значение x_0 и значения управляющих параметров h и q . Для работы с программой также необходимо будет ввести значения коэффициентов динамической системы α , β , γ .

3. Коэффициенты динамической системы α , β , γ рассчитываются по формулам (6) и (7). Однако для использования расчетных значений в программе они должны быть подвергнуты нормировке, подробности которой мы опускаем. Для углеродистых и низколегированных сталей все значения нормированных по степенному закону коэффициентов α , β , γ будут заключены в интервале 1,0...3,23; а средние (типичные) нормированные значения коэффициентов составят: $\alpha=1,5$; $\beta=2,3$; $\gamma=1,5$.

4. Для компоненты \tilde{x} вакансионного пересыщения $\tilde{}$ достаточно определять только начальное значение x_0 , поскольку вакансионное пересыщение в процессе охлаждения всегда релаксирует к нулю, либо достигая стоков (дислокаций или границ зерен), либо посредством схлопывания вакансионных дисков с образованием сидячих дислокационных петель Франка. Вакансионное пересыщение при резком охлаждении до температуры T формируется из разности между количеством вакансий C_V^0 , достигнутых к моменту окончания нагрева при температуре T_3 , и количеством равновесных вакансий C_V , которое должно соответствовать температуре T :

$$x_0 = \ln \frac{C_V^0}{C_V} = \ln \left[\frac{\exp\left(-\frac{E_V}{kT_3}\right)}{\exp\left(-\frac{E_V}{kT}\right)} \right] = \frac{E_V \cdot (T_3 - T)}{kT_3 \cdot T} \quad (9)$$

где $E_V = 1,5 \text{ эВ} = 2,4 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ - энергия образования вакансии в сплавах на основе железа; $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$ - постоянная Больцмана.

В рассматриваемых нами условиях обработки КПЭ Fe-C-сплавов разброс значений $T_3 - T$ может составлять от ($T_3 = 900^\circ\text{C}$; $T = 700^\circ\text{C}$) до ($T_3 = 1400^\circ\text{C}$; $T = 500^\circ\text{C}$), что дает интервал возможных значений: $x_0 = 2,65 \dots 11,5$. Начальное значение компоненты x_0 определяются, таким образом, режимом и методом обработки, нагревающим поверхность металла до температуры T_3 . В соответствии с заданным методом и режимом поверхностной обработки стали с использованием КПЭ выберете значение x_0 из указанного интервала.

5. Компонента y определяет структуру обрабатываемого металла через плотность дислокаций ρ :

$$y_0 = \ln(\rho_0/\rho_{\min.}) = \ln(\rho_0 \cdot \lambda^2), \quad (10)$$

где ρ_0 – плотность дислокаций в исходной структуре до начала обработки;

$\rho_{\min.} = \lambda^{-2} [\text{м}^{-2}]$ - минимально возможная плотность дислокаций; она рассматривается как величина, сравнимая с размерами зерна λ ; в этом случае основными стоками для вакансий становятся границы, а ВДВ затухают.

При возможном разбросе значений $\rho_0 = 10^7 \dots 10^{12} \text{ см}^{-2}$ и $\lambda = 10 \dots 200 \text{ мкм}$ величина y_0 будет заключена в интервале: $y_0 = 2,3 \dots 19,8$. В соответствии с заданной характеристикой исходной структуры стали выберете значение y_0 из указанного интервала.

В рассматриваемой математической модели величина плотности дислокаций ρ после обработки КПЭ определяется из моделируемого значения компоненты y :

$$y = y_0 + \ln(\rho/\rho_0) = \ln(\rho \cdot \lambda^2), \text{ откуда } \rho = e^{y - \ln \lambda^2} \text{ или } \rho = \rho_0 \cdot e^{y - y_0}.$$

6. Определение значений управляющих параметров производится в соответствии с заданным методом поверхностной обработки стали. Значения термического φ и деформационного $\dot{\epsilon}$ параметров для различных методов обработки приводились ранее (см. раздел 1). При выполнении итераций в программе «DynSys» в качестве значений управляющих параметров системы h и q необходимо использовать их типичные приведенные значения h' и q' , показанные в таблице 1.

Таблица 1 – Значения термического и деформационного управляющих параметров для различных видов обработки стали

Способ обработки КПЭ	Объемная закалка	ТВЧ с КМП*	Детонационное упрочнение	Импульсное лазерное облучение
Интервал значений $\varphi, \text{с}^{-1}$	0,5-1,2	6-11	90-170	460-1540
Типичное значение $\varphi_{\text{ср.}}, \text{с}^{-1}$	1	10	100	1000
Интервал значений $h=\varphi^1, \text{с}$	0,83-2,0	0,09-0,167	0,06-0,011	$(0,65-2,2) \cdot 10^{-3}$
Типичное значение $h_{\text{ср.}} = \varphi^1, \text{с}$	1	0,1	0,01	0,001
Коэффициент $m, \text{с}^{-1}$	1	5,6	13,0	15,4
Интервал приведенных значений $h' = m / \varphi$	0,93-1,0	0,51-0,93	0,077-0,14	0,01-0,033
Типичное приведенное значение $h'_{\text{ср.}} = m / \varphi_{\text{ср.}}$	1	0,7	0,1	0,02
Интервал значений $\dot{\varepsilon}, \text{с}^{-1}$	0,001-0,01	0,01-10	0,32-32,0	0,32-100
Типичное значение $\dot{\varepsilon}_{\text{ср.}}, \text{с}^{-1}$	0,0032	0,2	3,2	10
Интервал значений $q = \dot{\varepsilon}^{-1}, \text{с}$	100-1000	0,1-100	0,03-3,0	0,01-3,0
Типичные значения $q_{\text{ср.}} = \dot{\varepsilon}^{-1}, \text{с}$	320	10	0,3	0,3
Коэффициент $n, \text{с}^{-1}$	0,0025	0,025	0,25	0,25
Интервал приведенных значений q'	-	0,2-0,3	0,05-0,15	0,05-0,15
Типичные приведенные значения $q'_{\text{ср.}} = n / \dot{\varepsilon}$	0,8	0,25	0,075	0,075

* - нагрев токами высокой частоты с концентрацией магнитного потока

7. После определения всех необходимых для моделирования значений (α , β , γ , x_0 , y_0 , h , q) получите у преподавателя доступ к работе с программой «DynSys» и введите необходимые для итераций данные, руководствуясь инструкциями раздела 2.

8. Выполните процесс итераций для заданной начальной точки фазовой плоскости (x_0 ; y_0).

9. Проведите анализ выполненных итераций, используя данные из раздела 3. Опишите полученные результаты моделирования с точки зрения эволюции структуры стали в процессе обработки с использованием КПЭ. Оформите эти данные (анализ и описание) в виде выводов в отчете.

5. СОДЕРЖАНИЕ ОТЧЕТА

1. Цель работы.

2. Краткая характеристика рассматриваемой в работе динамической системы и её составляющих: компонент, коэффициентов и параметров; краткое изложение физической сущности каждой составляющей.

3. Индивидуальное задание на выполнение работы в виде числовых значений составляющих исследуемой динамической системы (α , β , γ , x_0 , y_0 , h , q).

4. Результаты моделирования в виде распечатки окна программы «DynSys» с выполненным процессом итераций. В распечатке должны быть представлены области фазового пространства компонент (x ; y), траектория заданной начальной точки (x_0 ; y_0), значение аттрактора y_s (если оно было получено) или результирующее значение компоненты y_k (для безаттракторной области).

5. Выводы на основании полученных результатов моделирования в виде анализа выполненных итераций с точки зрения эволюции неравновесной структуры стали в процессе обработки с использованием КПЭ.

6. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Какой физический процесс рассматривается в работе под названием динамическая система?
2. В каком математическом виде должна быть изначально описана динамическая система для выполнения последующего компьютерного моделирования?
3. Назовите последовательность преобразований, которым подвергается динамическая система прежде, чем станет возможным её моделирование.
4. Какие составные части включает динамическая система? Какие из них варьируются, а какие моделируются?
5. Какие составные части динамической системы связаны со структурой материала, а какие – с методом и режимом его обработки?
6. Почему для выполнения работы необходимо рассматривать обработку стали с использованием КПЭ, а обычный печной нагрев и охлаждение для этого не подходят?

7. Назовите примеры обработки металлов и сплавов с применением КПЭ, приводящих к неравновесному структурообразованию.
8. Как развивается процесс структурной эволюции стали на субструктурном уровне при воздействии источника КПЭ?
9. Каков основной алгоритм моделирования субструктурных процессов в стали, реализуемый в программе «DynSys»?
10. Какие области фазовой плоскости (x ; y) обычно наблюдаются при итерационном процессе в программе «DynSys»? Каков их физический смысл (с точки зрения структурообразования)?
11. Как связана траектория точки компонент (x ; y) на фазовой плоскости при моделировании с реальным процессом структурообразования стали?
12. Что означает математический термин «аттрактор» и как он связан с процессом самоорганизации структуры стали при её обработке с использованием КПЭ?
13. Почему компонента y в процессе итераций при моделировании не может принимать нулевые значения?
14. Какие виды структур формируются в стали при в условиях неравновесности обработки? Как изменяется их типология по мере усиления степени неравновесности?

7. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Варавка В.Н. Динамика неравновесных субструктурных процессов в металлах - Ростов-на-Дону: Издательский центр ДГТУ, 2007. - 144 с.
2. Кудряков О.В., Варавка В.Н. Феноменология мартенситного превращения и структуры стали - Ростов-на-Дону: Издательский центр ДГТУ, 2004. - 200 с.