
В ПОРЯДКЕ ОБСУЖДЕНИЯ

УДК 621.74

**В. З. Тыднюк, О. И. Шинский, В. П. Кравченко,
В. С. Дорошенко, И.О. Шинский**

Физико-технологический институт металлов и сплавов НАН Украины, Киев

КВАНТОВЫЕ ОСОБЕННОСТИ ТЕПЛООБМЕНА И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ЖИДКОГО МЕТАЛЛА. Сообщение 1

Предложена физико-математическая модель теплообмена, которая учитывает квантовые особенности (квантовое комбинированное рассеивание тепловых фононов и фотонов, дисперсию в оптической и акустической ветвях теплового потока) теплопередачи в жидком и твердом металле. Рассмотрены особенности кристаллизации и классификация типов поликристаллических структур, основанная на отличиях разных типов теплопередачи. Модель позволяет учитывать влияние формы сечения отливки и формы армирующих элементов на процессы кристаллизации.

Ключевые слова: *фононная компонента, оптическая и акустическая ветви теплоемкости, температурные волны, профили узловых линий, комбинационное рассеивание, ячеистые и дендритные структуры, пространственное влияние материалов.*

Запропонована фізико-математична модель теплообміну, яка враховує квантові особливості (квантове комбіноване розсіювання теплових фононів і фотонів, дисперсію в оптичній та акустичній гілках теплового потоку) теплообміну в рідкому та твердому металі. Розглянуто відмінності кристалізації та класифікація типів полікристалічних структур, яка обумовлена відмінностями різних типів теплопередачі. Модель дозволяє врахувати вплив форми перерізу виливки і форми армуючих елементів на процеси кристалізації.

Ключові слова: *фононна компонента, оптична та акустична гілки теплоємності, температурні хвилі, профілі вузлових ліній, комбінаційне розсіювання, комірчасті та дендритні структури, просторовий вплив матеріалів.*

Proposed physical and mathematical model of heat transfer, which takes into account quantum features (combined quantum scattering of thermal phonons, and photons, and the variance in the optical and acoustic branches of the heat flow) of heat transfer in liquid and solid metal. The features of crystallization and the classification of the types of polycrystalline structures, based on the differences between various types of heat transfer. The model takes into account the influence of the cross section shape of the casting and form of reinforcing elements on the crystallization process.

Keywords: *phonon component, optical and acoustic branches of the specific heat, thermal waves, the profiles of the nodal, raman scattering, cellular and dendritic structure, the spatial impact of materials.*

Энергия теплового движения атомной единицы в узле кристаллической решетки состоит из средней энергии хаотического поступательного движения, энергии колебаний атомной единицы и энергии вращательного движения. Под атомной единицей следует понимать атомное ядро совместно с электронами внутренних орбит или ионов, несколько атомных единиц, часть молекулы либо молекулу в случае молекулярного типа кристаллической или аморфной решетки, которые движутся как одно целое при тепловом движении.

Движение материальной точки складывается из поступательной и вращательной компонент. Поскольку при тепловом процессе движение атомной единицы имеет периодический характер, то каждому из двух типов движений соответствует некоторый собственный спектр колебаний. Поэтому в классических теориях теплопереноса все типы тепловых движений отдельно не рассматриваются и сводятся лишь к колебаниям в кристаллической решетке [1], при этом большую роль играет периодичность элементарных ячеек. Естественно, что для аморфных тел и структурированных жидкостей, к которым следует относить также расплавы металлов и сплавов, особенно при температурах ликвидуса, формулы классической теории колебаний кристаллической решетки малоприменимы.

Квантовые теории теплоемкости, в частности, интерполяционная формула Дебая, учитывают, что тепловое движение атомных единиц будет иметь оптическую и акустическую ветви [1, 2]. В последнем случае движение многих атомных единиц в кристаллической решетке будет согласованным с образованием квазичастиц – фононов. Но в уравнении теплопроводности

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = k \operatorname{div} (\operatorname{grad} u) + F(M, t) \quad (1)$$

(c – удельная теплоемкость, Дж/(кг·град); ρ – плотность, кг/м³; k – коэффициент теплопроводности, Вт/(м·град); $u(M, t)$ – температура; $F(M, t)$ – функция плотности тепловых источников, Вт/м³; M – точка пространства) обмен тепловой энергией между вращательной и поступательной или вращательной и колебательной компонентами не учитывается, так как в потенциальном поле вектора $\operatorname{grad} u(M)$ циркуляция по любому замкнутому контуру равна нулю, $\operatorname{rot} (\operatorname{grad} u) = 0$.

Уравнение (1) не определяет также описание и анализ отдельных вкладов поступательной и вибрационной компонент в тепловые потоки. Как увидим далее, параллельное описание вибрационной, поступательной и вибрационно-фононной компонент (с учетом некоторых квантовых особенностей) значительно модифицирует и дополняет модели теплопередачи, которые можно получить с помощью решений соответствующих краевых задач для уравнения (1). Это существенно во многих практических приложениях: при моделировании процессов кристаллизации и остывании металлических отливок, перекристаллизации определенных зон, использовании армирующих элементов и т. п.

Целью настоящей работы является распределение температурных полей в жидкой и твердой фазах отливки при распространении тепла в виде двух взаимодействующих пакетов теплопередачи: оптического (независимых тепловых колебаний атомных единиц) и фононного (акустического). В этом случае уравнение теплопроводности для ограниченных тел имеет решение в виде температурных волн. Профили распространения таких температурных волн задают направления образования кристаллических и поликристаллических структур в расплаве, а резонансные явления при разных длинах температурных волн определяют плотность упаковки

и, как следствие, соответствующие физико-механические свойства дендритных и ячеистых структур в металлах и сплавах.

Постановка задачи отдельного описания поступательной, колебательной и вибрационно-акустической компонент в процессе теплопередачи

В квантовых теориях теплоемкости [1-3] учитываются следующие физические представления. При тепловых колебаниях акустической ветви будут согласованы трансляционно-колебательные движения многих близкорасположенных атомных единиц относительно других атомных единиц твердого или жидкого тела. Акустической ветви, исключая резонансные эффекты и комбинационное рассеивание фононов, соответствуют звуковые частоты сверхвысокой частоты.

При тепловых колебаниях оптической ветви происходят колебания каждого атома или атомной единицы независимо от колебаний близлежащих атомов. Оптической ветви соответствуют частоты, принадлежащие инфракрасной зоне электромагнитного спектра, и некоторый участок радиотепловой зоны. Поступательное тепловое движение атомных единиц также отображается оптической ветвью, которая отличается от нормальных трансляционных колебаний тем, что при поступательном движении атом настолько сближается с соседней атомной единицей, что происходит значительное рассеивание волнового вектора на атоме-мишени.

Акустические и оптические ветви отличаются дисперсией, то есть характером зависимости частоты колебаний ω от волнового вектора q . Из наличия дисперсии [2] непосредственно следует, что скорости распространения тепловых колебаний волнового пакета, который отвечает оптической ветви, будут отличаться от скорости распространения тепловых колебаний, отвечающих акустической ветви.

Таким образом, при описании этих тепловых потоков можно предположить, что коэффициент теплопроводности k – комплексное число. В такой физической и математической интерпретации коэффициент температуропроводности также будет комплексным. Поэтому, если перейти от выражения (1) к обычной записи уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + F(M, t), \quad (2)$$

где $a^2 = \frac{k}{c\rho}$ – коэффициент температуропроводности, m^2/c , то величина a также комплексная

$$a = d + if, \quad (3)$$

где действительная часть d будет отвечать поступательной и вибрационно-оптической компонентам в процессе изменения температурного поля, а коэффициент f мнимой части – вибрационно-фононной компоненте температуропроводности.

Температурные волны как следствие взаимодействия поступательной, колебательной и фононной компонент тепловых потоков

Фундаментальные решения однородного уравнения теплопроводности (2) при нулевых граничных условиях при такой постановке задачи будут иметь вид суммы затухающих температурных волн, которые излучают источники тепла внутри тела, и температурных волн, отраженных от границы тела (отливки) и неоднородностей внутри тела.

В частности, температурные поля, которые создают, соответственно, оптическая и акустическая компоненты теплового потока, в прямоугольной мембране со сторонами b_1, b_2 будут определяться из следующих формул:

$$\begin{aligned}
u_d(x, y, t) &= \frac{2}{\sqrt{b_1 b_2}} \sum_{m, n=1}^{\infty} C_{mn} e^{-\lambda_{mn}(d^2 - f^2)t} \cos(2df\lambda_{mn}t) \sin \frac{m\pi}{b_1} x \sin \frac{n\pi}{b_2} y; \\
u_f(x, y, t) &= \frac{2}{\sqrt{b_1 b_2}} \sum_{m, n=1}^{\infty} C_{mn} e^{-\lambda_{mn}(d^2 - f^2)t} \cos \left(2df\lambda_{mn}t + \frac{\pi}{2} \right) x \\
&\quad \times \sin \frac{m\pi}{b_1} x \sin \frac{n\pi}{b_2} y.
\end{aligned} \tag{4}$$

Здесь собственные функции определяются двумя целочисленными индексами и будут иметь вид [4]

$$\Psi_{mn}(x, y) = \frac{2}{\sqrt{b_1 b_2}} \sin \frac{m\pi}{b_1} x \sin \frac{n\pi}{b_2} y. \tag{5}$$

Собственные значения λ_{mn} задаются формулой [4]

$$\lambda_{mn} = \left(\frac{m\pi}{b_1} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b_2} \right)^2. \tag{6}$$

C_{mn} в выражении (4) определяются как коэффициенты Фурье разложения функции начальных условий для температуры по собственным функциям (5) для прямоугольной мембраны.

Границы сумм в рядах (4) задаются границами спектра оптической ветви для u_d и границами спектра акустической ветви для u_f , которые определим далее. Частота ω_{mn} , волновой вектор q_{mn} , длина волны l_{mn} и скорость температурных волн v_{mn} , которые создают при интерференции стоячие волны (4), будут определяться формулами

$$\begin{aligned}
\omega_{mn} &= 2df \sqrt{\left(\frac{m\pi}{b_1} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b_2} \right)^2}; \\
q_{mn} &= \sqrt{\left(\frac{m\pi}{b_1} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b_2} \right)^2}; \\
l_{mn} &= \frac{2\pi}{q_{mn}} = \frac{2}{\sqrt{\left(\frac{m}{b_1} \right)^2 + \left(\frac{n}{b_2} \right)^2}}; \\
v_{mn} &= \frac{\omega_{mn}}{q_{mn}} = 2df \sqrt{\left(\frac{m\pi}{b_1} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b_2} \right)^2} = 2df q_{mn}.
\end{aligned} \tag{7}$$

Длина каждой температурной волны укладывается в целое число m на стороне мембраны b_1 (ось x), целое число n – на стороне мембраны b_2 (ось y). Если средний размер элементарной кристаллической ячейки укладывается в целое число раз на длине определенной температурной волны, то наступает явление резонанса, кото-

рое увеличивает вероятность возникновения поликристаллических структур с размерами половины длины этой температурной волны. Средний размер элементарной кристаллической ячейки можно оценить по длине волны максимума поглощения в инфракрасном спектре поглощения материала. Таким образом, размеры и форма сечения отливки могут влиять на процессы кристаллизации.

Источниками температурных волн могут быть различные неоднородности внутри объема тела: тепловые, химические, механические, сосредоточенного внешнего физического воздействия, а также граница отливки или ее сечения.

На узловых линиях стоячих волн типа (4) температура остается стационарной, на линиях пучностей принимает поочередно максимальные и минимальные значения. Так как плотность упаковки в поликристаллах, в первую очередь, зависит от температуры переохлаждения раствора, то при минимальной температуре могут возникать поликристаллы с более плотной упаковкой, при максимальных – с менее плотной. При этом частота температурной волны должна соответствовать времени кристаллизации, поэтому поликристаллы с разной плотностью упаковки могут возникать рядом за счет температурных волн разной (но сравнимой) длины волны.

В сущности, наличие волновых решений при учете некоторых физических особенностей теплопереноса даже в параболическом уравнении теплопроводности ставит вопрос об исключительно волновом характере распространения тепла. Наличие температурных волн значительно дополняет и модифицирует многие физико-математические модели, которые так или иначе используют уравнение теплопроводности. Так, например, О. Н. Шабловским была исследована неравновесность процесса теплопереноса [5] и построена тепловая модель периодической кристаллизации расплава металла в изложнице на основе упрощенного (без учета дисперсии) волнового уравнения теплопроводности.

Профили линий пучностей стоячей температурной волны будут определять наиболее вероятные линии фазовых переходов 1 и 2-го рода при кристаллизации, перекристаллизации, в частности, основные направления дендритного роста поликристаллов. Как уже отмечалось, это объясняется периодическим перегревом и переохлаждением жидкой или твердой фазы, в то время как на узловых линиях температура остается постоянной.

Рассмотрим форму узловых линий в случае квадратной мембраны. Во-первых, это прямые, параллельные осям координат, которые делят сторону квадрата на целое число раз. Линейная комбинация собственных функций при кратных собственных значениях также будет собственной функцией. Ее узловые линии могут иметь более сложную форму. Чтобы обобщить профили узловых линий как квадратной, так и прямоугольной мембраны, рассмотрим основные профили для круглой мембраны.

Учитывая, что цилиндрические функции, которые появляются в решениях для круглой мембраны в полярной системе координат, можно при некоторых условиях разложить по полной системе функций ряда Фурье, приходим к выводу, что основными профилями для узловых и линий пучностей в решениях для круглой мембраны будут следующие: радиальные линии, которые выходят из центра мембраны и делят угол 2π на целое число раз и концентрические круги, которые делят радиус мембраны r_0 на целое число отрезков.

Для квадратной мембраны вторичными будут все профили круглой мембраны, вписанной в квадрат (кроме первичных профилей прямоугольных решеток с равномерным шагом). При этом радиальные профили симметричны относительно поворотов на $\frac{\pi}{2}$, то есть делят каждый сектор квадрата, созданного диагоналями, на целое число раз. Очевидно, что в случае ромба и параллелограмма появляются эллипсоидальные профили и профили в виде косоугольных решеток. Для круглой мембраны вторичными профилями будут также профили квадратной мембраны, вписанной в круг.

Доминантность одних профилей относительно других будет определяться энергетическими характеристиками температурных волн на плоскости или в пространстве. В математическом смысле можно ставить задачу теплопроводности для любой области основной мембраны, которая опять же может иметь вид прямоугольной, круглой, эллипсоидальной зон или в виде параллелограмма. В центре симметрии такой области могут находиться зародыш кристаллизации, армирующий элемент, сосредоточенный внутренний или внешний физический фактор. Тем не менее, профили таких зон должны накладываться на профили основной мембраны, что создает дополнительное резонансное влияние.

На реализацию возможных профилей распространения температурных волн и их амплитуду весьма сильно могут влиять внешние факторы, а именно: интенсивный тепловод, который может также учитывать форму отливки в таких горизонтальных сечениях, вибрации, силовых полях, как магнитное, электромагнитное, электрическое, ультразвук, инфразвук. Все это дает возможность частично управлять процессами остывания, кристаллизации и перекристаллизации отливок металлов и сплавов.

Определение спектров оптической и акустической ветвей температурных волн

Для использования решений (4) в компьютерных моделях и расчетных схемах следует перейти к варианту конечного числа членов в бесконечных рядах (4), а также определить методику вычисления компонент теплопроводности d и f .

Очевидно, что спектр оптической ветви включает в себя верхнюю границу инфракрасной зоны с длиной волны 800 нм, что отвечает независимым волновым колебаниям в узле кристаллической или аморфной решетки водородоподобного атома. Относительно частот, отвечающих частотам электромагнитного спектра ультрафиолетовой и рентгеновской областей, то можно утверждать, что существенно влиять на теплоперенос они могут лишь в высокотемпературной газоплазменной смеси.

Электроны внешних орбит (или оптические электроны) принимают участие в химических реакциях, создают ковалентные и ионные связи в твердой фазе кристаллических или аморфных (с хаотической атомной или молекулярной решеткой) тел, определяют совместно с водородными связями ближний порядок в жидкокристаллических структурах. Оптические электроны создают металлическую связь при обобщении атомарной решеткой многих электронов в металлах и сплавах, а также составляют электронный газ проводимости в металлах и полупроводниках.

Поэтому электроны проводимости также принимают участие в теплопереносе, оптические электроны изменяют конфигурацию и уровни энергии в ответ на изменения спектра тепловых колебаний атомных единиц, и наоборот, то есть верхняя граница оптической ветви температурных волн должна включать в себя зону частот видимого света с длиной волны от 400 до 800 нм.

Далее определим два фактора, которые следует рассмотреть более подробно: дисперсию температурных волн и квантовое комбинационное рассеивание в оптической и акустической ветвях. Явление дисперсии будет приводить к отставанию волн, которые имеют меньшую скорость, в каждом из волновых пакетов. Это, в свою очередь, приводит к возбуждению явления самоподобия в спектральных кривых.

Свойство самоподобия значительно усиливается квантовым комбинационным рассеиванием, которое может быть четырех типов: фотон-фотонное, фотон-фононное, фонон-фононное и фонон-фотонное. Например, при фотон-фононном рассеивании [2] фотон в кристаллической или аморфной решетке может вызвать возникновение фонона, при этом расходует часть собственной энергии, возникает «красный», длинноволновый спутник первичного фотона. Комбинационное рассеивание температурных волн будет пропорционально их интенсивности в той или иной зоне спектра. Комбинационное рассеивание также является следствием того, что

свойство самоподобия спектральных кривых распространяется не только от высоких частот к низшим, но и в обратном направлении. В данном случае свойство самоподобия следует понимать совместно с существованием некоторого среднеквадратичного отклонения и отличать от свойства самоподобия фрактальных кривых.

Явления дисперсии и комбинационного рассеивания позволяют сделать вывод о приближенном самоподобии и автомодельности решений (4) в виде существования зон в спектрах температурных волн, составляющих геометрическую прогрессию. Поскольку оптические электроны непосредственно участвуют в тепловом движении атомных единиц, все химические элементы имеют соответствующие спектральные линии в видимой зоне спектра электромагнитных волн, таким частотам соответствуют частоты температурных волн в верхней части спектра оптической ветви в решениях (4). В результате можно считать, что в оптической ветви температурных волн минимальной зоной подобия будет зона от 400 до 800 нм, что составляет октаву, и коэффициент подобия равен 2. Термин «октава» тут и далее, как и принято в теоретической физике, употребляется для обозначения интервала частот от частоты f до удвоенной частоты $2f$.

В работе [6] приведено обоснование достаточно простого феномена, который состоит в том, что каждый микрообъем ΔW достаточных наноразмеров в жидкой или твердой фазе можно отнести лишь к одной из шести основных фаз теплообмена. Рассмотрим теплообмен: ΔW в доминантном состоянии может быть источником тепла (в состоянии преобладающего поглощения тепла) или пассивного транспорта теплового потока. Таким образом, теплообмен в ΔW состоит из трех основных фаз.

То же самое относится и к массообмену на наноуровне, где основную роль в механизме переноса микромассы играют временные дислокации, временные вакансии, временные связи атомной единицы с элементарной ячейкой кристаллической решетки и т. п. Поэтому массообмен на наноуровне всегда сопутствует теплообмену и служит одной из основных причин не строго регулярного строения кристаллической решетки. Большая часть тепловой энергии при наличии интенсивного массообмена переносится потоком микромассы, поэтому всегда можно решить вопрос: какой процесс доминирует в микрообъеме – массопереноса или теплопереноса.

Любой микрообъем твердого тела или жидкости, как следствие, в фиксированный момент времени может находиться лишь в одном из шести основных состояний теплообмена. Из этого также следует, что любой макрообъем W может иметь лишь шесть основных термодинамических систем, в которые соединяются все микрообъемы наноразмеров, каждый из которых находится в той или иной фазе теплообмена из шести возможных. Очевидно, что каждая такая фаза на уровне нанобъема отличается от другой фазы уровнем средней энергии как нанобъема, так и его точечных осцилляторов. Поэтому каждой фазе и каждой термодинамической системе из шести [6] будет соответствовать своя зона температурных волн в оптической или акустической ветви.

Как уже отмечалось в начале статьи, в оптической ветви температурных волн присутствуют три основные компоненты теплового движения: поступательная, колебательная и вращательная. Энергия каждой компоненты квантуется, причем наименьшую энергию имеют уровни энергии вращательного движения [7].

Исходя из предыдущих рассуждений, можно утверждать, что каждая из трех компонент оптической ветви, а именно – поступательная, колебательная и вращательная, должна иметь шесть зон подобия в спектре температурных волн, каждая из таких зон составляет октаву. Так как уравнение теплопроводности (2) не описывает вращательную компоненту теплового движения, то нижней границей оптической ветви в решениях (4)-(7) будет нижняя граница трансляционно-колебательной области температурных волн.

Поступательной компоненте теплового движения для температурных волн будет тогда соответствовать диапазон от $d_1 = 400$ нм до $d_2 = 4 \cdot 10^2 \cdot 10^{-9} \cdot 2^6 \text{ м} = 2,56 \cdot 10^{-2}$ мм.

Колебательной компоненте теплового движения будет отвечать диапазон волн с длиной волны от d_2 до $d_3 = 2,56 \cdot 10^{-2} \cdot 64 \text{ мм} = 1,6384 \text{ мм}$, что совпадает с основной инфракрасной зоной электромагнитного спектра. Таким образом, оптическая ветвь в решениях (4) будет лежать в диапазоне длин волн $\{d_1, d_3\}$.

Начало диапазона колебательной компоненты температурных волн $d_2 = 2,56 \cdot 10^4 \text{ нм}$ уже, очевидно, превышает по длине волны средний удвоенный период элементарной ячейки большинства кристаллических решеток твердых тел, поэтому колебания длины таких волн относятся не только к инфракрасной области тепловых колебаний, но одновременно приводят и к фоновым возбуждениям кристаллической или аморфной решетки, так как при достаточном сближении атомных единиц между ними значительно усиливается квантовое взаимодействие, то есть можно считать, что акустический диапазон будет начинаться с длины волны $f_1 = d_2 = 2,56 \cdot 10^{-2} \text{ мм}$. Фононному газу в твердых и жидких телах также присущи три основные формы теплового движения: хаотическое поступательное движение, продольные фононные волны и поперечные. Поперечные фононные волны, которые возбуждают, в свою очередь, вращательное тепловое движение уравнением (2), опять же не описываются.

Интерполяцию акустического диапазона $\{f_1 = d_2; f_2\}$ можно провести, учитывая фактор сохранения энергии при комбинационном рассеивании, исходя из формул

$$\frac{f_2 - f_1}{d_3 - d_1} \cong \frac{z}{c}; \quad f_2 = f_1 + \frac{z}{c} (d_3 - d_2), \quad (8)$$

где z – скорость звука в твердой или жидкой фазе; c – скорость света.

Такая интерполяция может быть аргументирована фактом, что тепловые колебания оптической ветви сопровождаются одновременным процессом излучения и поглощения электромагнитных волн инфракрасного диапазона.

Поскольку скорость звука в твердых телах изменяется от 2600 (для серебра) до 5100 м/с (в алюминии и стали), то среднюю скорость звука для твердой фазы можно приблизительно принять $z = 4000 \text{ м/с}$. Тогда, подставляя в формулу (8) числовые значения d_1, d_2, d_3 , получим

$$f_2 \cong 2,56 \cdot 10^{-2} \text{ мм} + \frac{4 \cdot 10^3 \text{ м/с}}{3 \cdot 10^5 \text{ м/с}} (1,64 \text{ мм} - 0,0004 \text{ мм}) \cong 4,75 \cdot 10^{-2} \text{ мм}.$$

Диапазон акустической ветви, образованной поступательным хаотическим движением и колебаниями тепловых фононов, будет ограничен интервалом $\{f_1; f_2\}$ и содержит также шесть зон подобия для каждой компоненты теплового движения, но размер таких зон уже меньше, чем октава.

Ограничения по длине волны позволяют определить ограничения на количество членов в рядах решений типа (4), что существенно для численных вычислений и конкретного определения температурных полей в ограниченных телах. Длина температурной волны каждого члена для квадратной мембраны $[b, b]$ будет определяться собственными числами λ_{mn} по формулам (6), числа m, n будут размещены в интервалах, границы которых соответствуют d_1, d_2, d_3, f_1, f_2

$$l_{mn} = \frac{2}{\sqrt{\left(\frac{m}{b}\right)^2 + \left(\frac{n}{b}\right)^2}}; \quad m^2 + n^2 = \frac{4b^2}{l_{mn}^2}; \quad (9)$$

$$\frac{\sqrt{2} b}{1,64} \cong \frac{b}{\sqrt{2}} \leq m, n \leq \frac{\sqrt{2} b}{0,4 \cdot 10^{-3}} = \frac{b}{\sqrt{2}} 5 \cdot 10^3$$

для оптической ветви температурного поля $u_d(x, y, t)$

$$\text{и} \quad \frac{\sqrt{2} b}{4,75 \cdot 10^{-2}} \cong \frac{b}{\sqrt{2}} 40 \leq m, n \leq \frac{\sqrt{2} b}{2,56 \cdot 10^{-2}} \cong \frac{b}{\sqrt{2}} 80 \quad (10)$$

для акустической ветви температурного поля $u_f(x, y, t)$. Размеры мембраны $[b, b]$ в (9)-(10) определяются в мм. Ограничения (9)-(10) на количество членов в рядах решения (4) и на длину волн фактически решают проблему бесконечной скорости распространения тепла от мгновенного источника тепла [4], которая существует в классической теории теплопереноса.

Для конкретных вычислений по формулам (4) или подобным, которые можно получить из общей известной формулы трехмерного решения [4], следует определить методику вычисления компонент температуропроводности d и f в (3). Приведем наиболее простой способ интерполяции оптической и акустической составляющих температуропроводности по энергии ионизации.

В работе [7] и подобных монографиях приведена энергия ионизации всех химических элементов таблицы Д. И. Менделеева. Диапазон ионизации составляет примерно от $i_1 = 4$ до $i_2 = 25$ эВ. Для произвольного химического элемента с энергией ионизации « i » отношение компонент температуропроводности можно приблизительно определить как

$$\frac{d_i}{f_i} = \frac{i_2 - i}{i_2 - i_1} \frac{c}{z_i}; d_i^2 + f_i^2 = a_i^2, \quad (11)$$

где z_i – скорость звука в твердой или жидкой фазе элемента; c – скорость света; a_i – температуропроводность элемента.

Формулы (11) дают также способ определения оптической и акустических составляющих температуропроводности для материала с примесями или для смеси материалов.

Если сплав s состоит из трех, к примеру, компонентов i, j, k , процентное содержание которых составляет $m\%$, $n\%$ и $p\%$, то к формулам (11) следует добавить еще несколько дополнительных

$$\begin{aligned} i_s &= m\% i_i + n\% i_j + p\% i_k; \\ z_s &= m\% z_i + n\% z_j + p\% z_k; \\ \frac{d_s}{f_s} &= \frac{i_2 - i_s}{i_2 - i_1} \frac{c}{z_s}; \\ a_s &= m\% a_i + n\% a_j + p\% a_k; \\ d_s^2 + f_s^2 &= a_s^2. \end{aligned} \quad (12)$$

Исходя из наличия шести основных термодинамических систем в любом ограниченном теле, можно предположить, что по отличиям в морфологии должно быть не менее шести разных поликристаллических структур. Структура каждого типа отвечает энергетическому спектру одной из шести термодинамических систем. Следует также отличать уровни, на которых мы рассматриваем процессы кристаллизации и поликристаллизации: либо это наноуровни, либо мезо-, либо макроуровень, то есть в последнем случае это уровень размеров, доступных невооруженному глазу или оптическому микроскопу с небольшим увеличением.

Под поликристаллом понимают [8] компактный агрегат из множества мелких монокристаллических зерен (кристаллитов) размерами 10^{-6} - 10^{-2} мм, сцепленных межатомными или межмолекулярными силами и обычно произвольно ориентированных друг к другу. В ряде случаев может возникать преобладающая взаимная ориентация кристаллитов (текстура) [8].

Как видно из значений d_1, d_2, d_3, f_1, f_2 , размеры кристаллитов полностью соответствуют большей части диапазона температурных волн акустической ветви и зоне температурных волн оптической ветви, соответствующей поступательному тепловому движению. Размеры объединений поликристаллов (зерен) уже превышают порядок 10^{-2} мм, а иногда поликристаллы могут иметь размеры, достигающие макроуровней, также как и монокристаллы.

На мезо- и макроуровнях на формирование поликристаллических структур большое влияние оказывают профили русел температурных стоячих волн в ограниченном теле. Поликристаллические структуры разных уровней будут частично похожи между собой вследствие явления самоподобия температурных волн. Морфологию поликристаллических структур можно связать с типами профилей температурных волн, которые определяют двухмерный рост поликристаллов. Простых профилей температурных волн тоже шесть: прямоугольная решетка, косоугольная решетка, круг (эллипс) и радиальные профили, соответствующие прямоугольнику, параллелограмму или кругу (эллипсу).

Существуют различные классификации поликристаллов [8-10] по каким-либо выделенным признакам: по топологии структурных единиц поликристаллов, типам химической связи, коэффициенту упаковки (плотности упаковки), классам химических соединений и т. п. Тем не менее предлагаемая схема классификации использует описание экспериментально уже выделенных типов поликристаллов и такие основные физические параметры, как, например, плотность упаковки.

Для металлов и сплавов существуют четыре характерных размера, которые зависят от индивидуальных свойств материала: размера элементарной ячейки (наноразмер), кристаллита (мезоразмер), характерных дендритных или ячеистых поликристаллов (мезоразмер), среднего размера объединений поликристаллов, зерен (макроразмер).

Ранее уже рассматривали, как на размер зерен могут влиять размеры сечения отливки и армирующих элементов. На образование зерен определенного размера могут влиять также внешние физические воздействия: вибрация, магнитное поле, электрические поля и т. п. Эффекта резонанса при кристаллизации поликристаллов и зерен определенного размера можно достигнуть следующим образом: размеры поликристалла или зерна будут определять половину длины волны воздействия l_{mn} , тогда частота внешнего физического воздействия будет определяться на основании формул (7)

$$\omega_{mn} = \frac{8\pi^2 df}{l_{mn}^2}. \quad (13)$$

Причем, следует также учитывать механизм взаимодействия между внешним физическим воздействием и температурной волной. Формулы (7) позволяют определить верхнюю и нижнюю границы для скорости температурных волн. В случае квадратной мембраны

$$v_{mn} = \frac{2\pi d f}{b} \cdot 10^{-3} \sqrt{m^2 + n^2} \frac{\text{М}}{\text{с}}. \quad (14)$$

Коэффициент $\frac{2\pi d f}{b} 10^{-3}$ имеет размерность $\frac{M}{c}$ в системе СИ. Используя ограничения на целочисленные индексы m, n (9), получим

$$\begin{aligned} \max(d f) &= \frac{a^2}{4}; \\ \frac{2\sqrt{2}\pi d f}{b} 10^{-3} \frac{b}{\sqrt{2}} &\leq v_m = \frac{2\sqrt{2}\pi d f}{b} 10^{-3} m \frac{M}{c} \leq \frac{\sqrt{2}\pi a^2}{2b} 10^{-3} \frac{b}{\sqrt{2}} 5 \cdot 10^3; \\ 2\pi d f 10^{-3} \frac{M}{c} &= 2\pi d f 10^{-1} \frac{CM}{c} \leq v_m \leq 2,5\pi a^2 \frac{M}{c} = 2,5\pi a^2 10^2 \frac{CM}{c}, \end{aligned} \quad (15)$$

где a^2 – коэффициент температуропроводности. Из (15) можно оценить, к примеру, что верхняя граница для скорости температурных волн в железе будет составлять

$$v_m \leq 2,5\pi 0,2 \frac{CM}{c} \cong 2 \frac{CM}{c} = 0,02 \frac{M}{c}.$$

Из выражения (15) следует, что определяющим в скорости температурных волн будет коэффициент температуропроводности материала.



Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. – М.: Наука, 1976. – Ч. 1. – 583 с.
2. Савельев И. В. Курс общей физики. – М.: Наука, 1971. – Т. 3. – 527 с.
3. www.xumuk.ru/encuklopedia. Квантовая теория теплоемкости, 2009.
4. Тихонов Л. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1977. – 735 с.
5. Шабловский О. Н. Тепловая градиентная катастрофа и рост двумерного свободного дендрита в переохлажденном расплаве // Прикладная физика. – 2007. – № 3. – С. 29-36.
6. Информационная модель мониторинга процесса кристаллизации литых металлоизделий с использованием физики пространственных взаимодействий термохимических потенциалов / В. З. Тьднюк, О. И. Шинский, В. П. Кравченко, В. С. Дорошенко // Процессы литья. – 2010. – № 1. – С. 7-19.
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика, нерелятивистская теория. – М.: Физ.-мат. литература, 1963. – 702 с.
8. Солодников С. Ф. Основные термины и понятия кристаллографии и кристаллохимии. – Новосибирск: РАН, Институт неорганической химии им. А. В. Николаева, 2005. – 115 с.
9. Пирсон У. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов. – М.: Мир, 1977. – Ч. 1. – 419 с.
10. Пирсон У. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов. – М.: Мир, 1977. – Ч. 2. – 471 с.

Поступила 29.07.2010