

# Моделирование теплопроводности и скорости распространения колебаний в монокристаллах с учетом анизотропии их свойств

И.Х. Бадамшин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уфимский государственный авиационный технический университет, К.Маркса12, Уфа, Россия, 450000

**Аннотация.** Для новых материалов информация о характеристиках теплопроводности и скорости распространения колебаний, необходимая для расчета напряженно-деформированного состояния элементов конструкции, ограничена. В этих условиях возникает необходимость в теоретических методах расчета теплофизических характеристик. Предлагаемые теоретические методы основаны на расчете сил межатомного взаимодействия. Классические методы, основанные на гипотезе сплошности среды, не позволяют рассчитать теплофизические свойства материала.

## 1. Введение

Для оценки напряженно-деформированного состояния элементов конструкций из монокристаллических материалов необходимо знать их теплофизические характеристики. В частности, значения коэффициента теплопроводности являются исходными данными для расчета теплового состояния элементов конструкций.

Краткий обзор существующих методов показывает, что в настоящее время коэффициент теплопроводности определяется эмпирическими или полуэмпирическими методами. Поэтому актуальным является разработка теоретического метода расчета коэффициента теплопроводности для монокристаллов – составляющих материалов элементов конструкций. Кроме того, для теоретической оценки коэффициента теплопроводности необходимо знать скорость распространения колебаний в монокристаллах.

Данная задача решается на основе перехода в модели поведения материалов от гипотезы сплошности среды к учёту сил межатомного взаимодействия на уровне элементарной атомной ячейки. Такой подход открывает возможность теоретически и полуэмпирически рассчитывать прочностные, упругие и теплофизические характеристики элементов конструкций, являющиеся исходными данными в расчёте напряженно-деформированного состояния элементов конструкций [1].

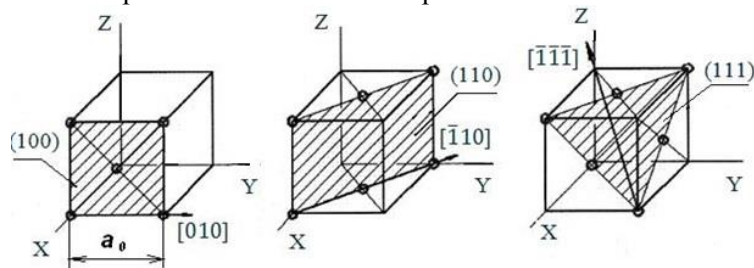
## 2. Модель и расчетные формулы

Допущения:

1. Рассматривается элементарная атомная ячейка бездефектного монокристалла с периодом кристаллической решетки  $a_0$ .

2. Рассматриваются наиболее плотноупакованные плоскости элементарной атомной ячейки монокристалла и кристаллографические направления, соответствующие этим плоскостям. В

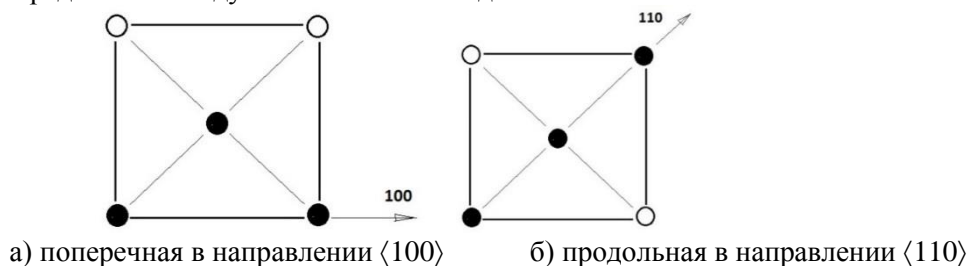
частности, для кубической решётки плоскости и направления показаны на рисунке 1. Таким образом, учитывается анизотропия свойств элементарной атомной ячейки монокристалла.



**Рисунок 1.** Направления и плоскости кристаллической решетки.

3. Коэффициент теплопроводности характеризует передачу тепла. Тепло в кристалле передается за счет кинетической энергии колебаний атомов в кристаллической решетке.

4. Процесс теплопроводности и передачи колебаний атомов моделируется в виде продольных и поперечных плоских волн в наиболее плотноупакованных плоскостях. В частности, в плоскости (100) ГЦК-решётки в направлении  $\langle 100 \rangle$  (рисунок 2,а) формируется поперечная волна, а в направлении  $\langle 110 \rangle$  (рисунок 2,б) формируется продольная волна, так как колебания передаются между ближайшими соседями-атомами.



**Рисунок 2.** Схема распространения плоской волны.

5. Теплоемкость одного атома  $c'_v$  постоянная величина и определяется в соответствии с законом Дюлонга и Пти  $c'_v = 3k = 4,1421 \cdot 10^{-23}$  Дж/К, где  $k$  – постоянная Больцмана.

6. Свойства элементарной атомной ячейки передаются всему объему монокристалла вследствие его симметрии.

*Расчетные формулы*

Скорость распространения колебаний  $v$  рассчитывается по базовой формуле [3], выведенной на основе закона сохранения энергии:

$$v = \frac{e}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r \cdot m}} \quad (1)$$

где  $\varepsilon_0 = 8,8542 \cdot 10^{-12}$  Ф/м- электрическая постоянная,  $e = 1,602 \cdot 10^{-19}$  Кл - элементарный заряд;  $m = M_a \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}$  кг - масса атома;  $M_a$  – атомная масса;  $v$  - скорость распространения колебаний в монокристалле;  $r$  - расстояние между ближайшими соседями-атомами.

Скорость распространения колебаний определяется в кристаллографических направлениях  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  и обозначается соответственно  $v_{100}$ ,  $v_{110}$ ,  $v_{111}$ . Эти значения сравниваются со справочными данными [2] для поликристаллов соответственно:  $v_3$  – поперечная скорость;  $v_l$  – скорость в стержне;  $v_2$  – продольная скорость. Результаты расчёта  $v$  приведены в таблице 1.

Из таблицы 1 видно, что для металлов с гранецентрированной (ГЦК) и объёмно-центрированной (ОЦК) кубическими решётками имеется удовлетворительная сходимость между величинами:  $v_{100}$  и  $v_3$ ,  $v_{110}$  и  $v_l$ ,  $v_{111}$  и  $v_2$ . В частности, для алюминия Al  $v_{110} = 4997$  м/с и  $v_l = 5080$  м/с,  $v_{111} = 6123$  м/с и  $v_2 = 6260$  м/с. Для золота Au  $v_{110} = 2032$  м/с и  $v_l = 2030$  м/с,  $v_{111} = 2490$  м/с и  $v_2 = 3240$  м/с и т.д. Это соответствие определяется п. 4 допущений о формировании поперечной и продольной волн в плоскостях элементарной атомной ячейки.

**Таблица 1.** Скорость распространения колебаний.

Обозначение элемента	Скорость распространения колебаний $v$ , м/с					
	$v_{100}$	$v_3$	$v_{110}$	$v_1$	$v_{111}$	$v_2$
Al	3534	3080	4997	5080	6123	6260
Cu	2681	2260	3792	3710	4646	4700
Ag	1934	1590	2736	2640	3353	3600
Au	1437	1200	2032	2030	2490	3240
V	2280	-	3268	-	3990	-
Nb	1855	-	2649	-	3234	-
Ta	1661	-	2373	3350	2897	-
Cr	2985	-	4263	4200	5205	-
Mo	2337	3510	3337	-	4074	5670
W	2189	2620	3126	4130	3816	5460
Rh	3173	-	4488	-	5498	-
Ir	3264	-	4616	4790	5657	-
Ni	3340	2960	4723	4785	5787	5630
Pd	2180	-	3083	-	3777	-
Pt	1870	1670	2644	2800	3240	3960

Коэффициент теплопроводности монокристаллов  $\lambda$  рассчитывается по базовой формуле [4], выведенной на основе закона Фурье:

$$\lambda = \frac{c_v^1 \cdot v \cdot M_a}{a_0^2} \quad (2)$$

При этом коэффициент теплопроводности определяется в кристаллографических направлениях  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$ . Их значения усредняются  $\lambda_{\text{ср}}$  и сравниваются со справочными данными  $\lambda_{\text{ср}}$  для поликристаллов. Расхождение в процентах обозначается через  $\Delta$ . Результаты расчёта коэффициента теплопроводности металлов с ГЦК и ОЦК решётками приведены в таблице 2.

**Таблица 2.** Коэффициент теплопроводности.

Обозначение элемента	Коэффициент теплопроводности $\lambda$ , Вт/м·К					
	$\lambda_{100}$	$\lambda_{110}$	$\lambda_{111}$	$\lambda_{\text{ср}}$	$\lambda_{\text{ср}}$	$\Delta, \%$
Cu	368.6	488.3	359.3	405.4	401	1.1
Ag	379.8	506.9	353.7	413.5	432	-4.3
Au	279.6	373.1	260.3	304.3	317	-4.0
Al	187.3	250.0	175.7	204.4	207	-1.3
V	18.6	26.2	49.8	31.5	31	1.7
Nb	37.1	52.4	99.3	62.9	54	16.5
Ta	36.1	51.0	96.7	61.3	58	5.6
Cr	54.7	77.3	146.6	92.9	94	-1.2
Mo	88.1	124.6	236.3	150.0	138...162	8.7...0...-7.4
W	117.7	166.4	315.5	199.0	174	14.8
Fe	51.2	72.4	137.3	86.9	80.2	8.4
Rh	114.5	161.9	124.6	133.7	148	-9.6
Ir	132.6	187.5	144.2	154.8	147	4.5
Ni	69.2	97.8	75.2	80.7	88,2...91	-8.7
Pd	63.6	89.9	69.2	74.2	72	3.1
Pt	73.4	104.3	80.2	86.1	72	16

Из таблицы 2 видно, что результаты расчёта удовлетворительно сходятся с экспериментальными значениями из справочной литературы [2] с расхождением от 1 % до 16 %.

### 3. Выводы

1. Приведена модель, которая позволяет рассчитать скорость распространения колебаний и коэффициент теплопроводности в моно- и поликристаллах.

2. Получены результаты расчёта коэффициента теплопроводности монокристаллов с учётом анизотропии при 20<sup>0</sup>С, имеющие удовлетворительную сходимость с экспериментами других авторов (справочные данные).

3. Теоретический расчет коэффициента теплопроводности монокристаллов – составляющих материалов элементов конструкций позволяет сократить объем трудоемких и дорогостоящих экспериментов.

4. Разработанный метод позволяет использовать его для компьютерного моделирования материалов в условиях ограниченного объема экспериментальных данных.

5. Разработанный метод, учитывающий силы межатомного взаимодействия, кроме  $\nu$  и  $\lambda$  позволяет рассчитывать коэффициент теплового расширения, а также упругие и прочностные характеристики моно- и поликристаллов.

6. Разработанный метод позволяет проектировать (моделировать) оптимальную кристаллографическую ориентацию монокристаллов в элементах конструкций, т.е. перейти от выбора материалов к их конструированию [5].

#### 4. Литература

- [1] Бадамшин, И.Х. От четырёх к одному. Силы внутриатомного взаимодействия и прочность материалов: монография – Москва: Издательский дом Академии естествознания, 2016. – 134 с.
- [2] Григорьев, И.С. Физические величины: справочник / И.С. Григорьев, Е.З. Мейлихов – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
- [3] Бадамшин, И.Х. Способ определения скорости звука в моно- и поликристаллах // Пат. 2354940 РФ, МПК<sup>7</sup>, G01 H5/00. Заявлено 09.10.2007; Оpubл. 10.05.2009, Бюл. №13.
- [4] Бадамшин, И.Х. Способ определения коэффициента теплопроводности твердых тел // Пат. 2277235 РФ, МКИ6, G 01 N 25/20. Заявлено 14.02.2005г.; Оpubл. 27.05.2006, Бюл. № 15.
- [5] Белоусов, А.И. Концептуальные подходы к конструированию материалов для лопаток турбин авиационных ГТД / А.И. Белоусов, И.Х. Бадамшин // Изв. вузов. Авиационная техника – Казань, 2015. – № 3. – С. 73-79.

## The thermal conductivity and propagation velocity of oscillations modeling taking in single crystals into account the anisotropy of their properties

I.Kh. Badamshin<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ufa State Aviation Technical University, Karl Marks ave. 12, Ufa, Russia, 450000

**Abstract.** For new materials, information on the thermal conductivity and propagation velocity of oscillations characteristics necessary for calculating the stress-strain state of the design elements is limited. In these conditions, there is a need for theoretical methods for calculating the thermophysical properties. The proposed theoretical methods based on forces of interatomic interaction calculation. The classical methods based on the hypothesis of continuity do not allow calculating the material thermophysical properties.