

УДК 539.3:536.2

Г. Н. Кувыркин, И. Ю. Савельева

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НОВЫХ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

На основе соотношений рациональной термодинамики предложена математическая модель процесса теплопроводности в наноструктурных материалах, построенная с использованием модели среды с внутренними параметрами состояния. Выполнена оценка теплоемкости и теплопроводности наноструктурного материала. Рассмотренная модель позволяет учитывать эффекты, характерные для наноструктурных материалов: более низкую теплопроводность и более высокую теплоемкость.

E-mail: fn2@bmstu.ru

Ключевые слова: наноструктурные материалы, моделирование термомеханических процессов, теплопроводность, теплоемкость.

Введение. Создание наноструктурных конструкционных материалов — важное новое направление современного материаловедения. Такие материалы получают в основном методами порошковой металлургии, кристаллизацией из аморфного состояния и интенсивной пластической деформацией. Особенности структуры наноматериалов (размер зерна, значительная доля границ раздела, пористость и другие дефекты структуры) зависят от методов их получения и оказывают существенное влияние на свойства материала, которые существенно отличаются от свойств аналогов с крупнозернистой или аморфной структурой. Конструкционные наноматериалы обладают высокими эксплуатационными характеристиками: прочностью при достаточно высоких значениях пластических деформаций; твердостью; низкой теплопроводностью и др., что позволяет создавать принципиально новые устройства, конструкции и приборы с параметрами, недостижимыми при использовании традиционных материалов.

Важным этапом в создании новых материалов является построение математических моделей их поведения в широком диапазоне изменения внешних параметров, позволяющих прогнозировать эксплуатационные свойства материалов. Однако методика построения таких моделей еще далека от завершения. Это утверждение относится и к термомеханическим моделям наноструктурных материалов, которые

должны учитывать известную из экспериментов информацию об их более высокой теплоемкости и более низкой теплопроводности по сравнению с соответствующими значениями массивных материалов [1, 2]. В настоящей статье рассмотрена одна из возможных моделей процесса теплопроводности в наноструктурных материалах.

Математическая модель. Для получения термомеханических соотношений поведения наноматериалов воспользуемся моделью среды с внутренними параметрами состояния. Выбор такого подхода объясняется тем, что эта модель позволяет связать макроскопическое поведение тел с рядом микроструктурных процессов, которые протекают на молекулярном и субмолекулярном уровнях [3, 4].

Полагаем, что состояние рассматриваемой сплошной среды в окрестности любой материальной точки определяется четырьмя термодинамическими функциями, являющимися активными переменными: массовыми плотностями свободной энергии A и энтропии h , тензором напряжений с компонентами $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ и вектором плотности теплового потока с компонентами q_i , $i, j = 1, 2, 3$. Аргументами этих функций примем следующие реактивные переменные: тензор малой деформации с компонентами $\varepsilon_{kl} = (\partial u_k / \partial x_l + \partial u_l / \partial x_k) / 2$, где $u_k(x_1, x_2, x_3, t)$ – компоненты вектора перемещения, x_k – декартовы прямоугольные координаты, $k, l = 1, 2, 3$, t – время; абсолютную температуру $T(x_1, x_2, x_3, t)$; градиент температуры, компоненты которого $\vartheta_k = \partial T / \partial x_k$; внутренние параметры состояния – скалярный $\Phi(x_1, x_2, x_3, t)$ и векторный с компонентами $\chi_i(x_1, x_2, x_3, t)$ [3–5]. При этом векторный параметр характеризует процесс распространения теплоты и может быть ассоциирован с решеточным (фононным), электронным и др. физическими процессами теплопроводности, а скалярный – с неравновесным процессом аккумуляции теплоты. В дальнейшем полагаем, что в материале определяющим является фононный процесс теплопроводности, который можно ассоциировать с векторным параметром, имеющим компоненты χ_i .

Для получения системы определяющих уравнений используем первый закон термодинамики в виде

$$\rho \dot{u} = \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + q_V, \quad (1)$$

где ρ , u – плотность вещества и массовая плотность внутренней энергии; q_V – объемная плотность мощности источников тепловыделения; $(\dot{}) = \partial() / \partial t$. Здесь и далее принято соглашение о суммировании по повторяющимся латинским индексам. Из (1) с помощью преобразования Лежандра $u = A + Th$ получаем

$$\left(\rho \frac{\partial A}{\partial \varepsilon_{ij}} - \sigma_{ij}\right) \dot{\varepsilon}_{ij} + \rho \left(\frac{\partial A}{\partial T} + h\right) \dot{T} + \rho \frac{\partial A}{\partial \vartheta_i} \dot{\vartheta}_i + \rho \frac{\partial A}{\partial \Phi} \dot{\Phi} +$$

$$+ \rho \frac{\partial A}{\partial \chi_i} \dot{\chi}_i + \rho T \dot{h} + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} - q_V = 0. \quad (2)$$

Локальная форма второго закона термодинамики (неравенства Клаузиуса–Дюгема) имеет вид

$$\rho T \dot{h} + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} - T^{-1} q_i \frac{\partial T}{\partial x_i} - q_V \geq 0. \quad (3)$$

Вычитая далее из левой части неравенства (3) левую часть равенства (2), получаем

$$-\left(\rho \frac{\partial A}{\partial \varepsilon_{ij}} - \sigma_{ij}\right) \dot{\varepsilon}_{ij} - \rho \left(\frac{\partial A}{\partial T} + h\right) \dot{T} - \rho \frac{\partial A}{\partial \vartheta_i} \dot{\vartheta}_i - \rho \frac{\partial A}{\partial \Phi} \dot{\Phi} -$$

$$- \rho \frac{\partial A}{\partial \chi_i} \dot{\chi}_i - T^{-1} q_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \geq 0. \quad (4)$$

Это неравенство линейно по отношению к скоростям изменения реактивных переменных, которые или не являются определяющими переменными ($\dot{\varepsilon}_{ij}, \dot{T}, \dot{\vartheta}_i$), или заданы соответствующими кинетическими уравнениями. Так как второй закон термодинамики справедлив для произвольных скоростей процессов, достаточным условием справедливости неравенства (4) являются равенства

$$\sigma_{ij} = \rho \frac{\partial A}{\partial \varepsilon_{ij}}, \quad h = -\frac{\partial A}{\partial T}, \quad \frac{\partial A}{\partial \vartheta_i} = 0 \quad (5)$$

и неравенство

$$-\rho \frac{\partial A}{\partial \Phi} \dot{\Phi} - \rho \frac{\partial A}{\partial \chi_i} \dot{\chi}_i - T^{-1} q_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \geq 0. \quad (6)$$

Из неравенства (6) следует, что кинетические уравнения для определяющих внутренних параметров Φ, χ_i не могут быть произвольными, конкретная их форма должна выбираться с учетом неравенства (6).

Если записать закон сохранения энергии (2) с учетом равенств (5), то получим

$$\rho T \frac{\partial^2 A}{\partial T^2} \dot{T} = \rho T \left(-\frac{\partial h}{\partial \varepsilon_{ij}} \dot{\varepsilon}_{ij} - \frac{\partial h}{\partial \Phi} \dot{\Phi} - \frac{\partial h}{\partial \chi_i} \dot{\chi}_i \right) - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + q_V + \delta. \quad (7)$$

Слагаемые, заключенные в скобках в правой части (7), характеризуют термодинамическую связанность процессов теплопроводности и деформирования, а также изменение внутренних параметров состояния.

Кинетические уравнения, описывающие изменение χ_i и Φ во времени, в линейном приближении примем в виде

$$\begin{aligned} \tau_{ij}^{(q)} \dot{\chi}_j + A_{ij} \chi_j + A_{i4} \Phi &= \bar{\chi}_i; \\ \tau_T \dot{\Phi} + A_{4i} \chi_i + A_{44} \Phi &= \bar{\Phi}, \end{aligned} \quad (8)$$

где τ_T – время релаксации внутреннего параметра Φ ; $\tau_{ij}^{(q)} = \tau_q \tau_{ij}^0$; τ_{ij}^0 – компоненты симметричной матрицы $T^{(0)}$, $\|T^{(0)}\| = 1$; τ_q – время релаксации внутреннего параметра χ ; $A_{ij} = A_{ji}$, $A_{4i} = A_{i4}$, $\det A_{ij} > 0$; $\bar{\chi}_i$, $\bar{\Phi}$ – функции, определяющие равновесные значения внутренних параметров состояния. Такие кинетические уравнения позволяют учитывать взаимосвязанность процессов передачи теплоты и запаздывания при аккумуляции теплоты и предполагают, что наноструктурные элементы заполняют объем произвольным образом.

Зададим выражение для объемной плотности свободной энергии в виде

$$\rho A = \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{ij} - C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{ij}^{(T)} - D_{ijkl} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{ij} + \rho B(T) + \rho T B_1(\Phi), \quad (9)$$

где $B(T)$, $B_1(\Phi)$ – функции, определяющие изменение свободной энергии только вследствие изменения абсолютной температуры T и скалярного внутреннего параметра Φ (термодинамической температуры).

Тогда в соответствии с первым и вторым равенствами из (5) имеем

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \left(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^{(T)} \right) - D_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{(\Phi)}; \quad (10)$$

$$\rho c \dot{T} + \rho c_1 \dot{\Phi} = -T C_{ijkl} \dot{\varepsilon}_{kl} \frac{\partial \varepsilon_{ij}^{(T)}}{\partial T} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + q_V, \quad (11)$$

где $c = -T d^2 B / dT^2$ и $c_1 = -T d B_1 / d\Phi$ – удельные массовые теплоемкости, задающие изменение свободной энергии в зависимости от T и Φ соответственно.

Дальнейшая конкретизация уравнения теплопроводности (11) связана с выбором вида функций $\bar{\chi}_i$, $\bar{\Phi}$ и вектора плотности теплового потока. Положим

$$\bar{\chi}_i = -Z_{ij}^{(1)} \partial T / \partial x_j - Z_{ij}^{(2)} \partial \Phi / \partial x_j, \quad \bar{\Phi} = T, \quad q_i = \varphi_{ij} \chi_j, \quad (12)$$

что не противоречит основным принципам рациональной термодинамики [3]. Тогда, решив систему уравнений (8) относительно Φ и χ_i с начальными условиями $t = 0$, $\chi_i = 0$, $\Phi = T_0$, получим выражение для q_i и Φ , а следовательно, и для $\dot{\Phi}$. Так как $\varepsilon_{kl}^{(\Phi)}$ зависит от термодинамической температуры Φ , то от $\partial T / \partial x_j$ и $\partial \Phi / \partial x_j$ зависят и компоненты

тензора напряжений σ_{ij} . Однако этого не должно быть в силу справедливости достаточных условий (5), вытекающих из первого и второго законов термодинамики, и независимости A от этих переменных. Следовательно, для выполнения этих условий необходимо выполнение равенств $A_{j4} = A_{4j} = 0$. Тогда кинетические уравнения (8) можно переписать так:

$$\tau_{ij}^{(q)} \dot{\chi}_i + A_{ij} \chi_j = \bar{\chi}_i, \quad \tau_T \dot{\Phi} + A_{44} \Phi = \bar{\Phi}. \quad (13)$$

Таким образом, термомеханические процессы в наноструктурированном материале описывает система уравнений (10)–(13) с соответствующими краевыми условиями. Эта система уравнений отражает запаздывание процесса аккумуляции теплоты при быстром нагреве или охлаждении. Первый член в правой части уравнения (11) учитывает эффекты связанности полей температуры и деформации.

Отметим, что предложенные соотношения совпадают с рассмотренными ранее в работах [3–5] при $A_{ij} = \delta_{ij}$ (δ_{ij} – символ Кронекера), $A_{4j} = 0$ и $A_{44} = 1$, $\tau_{ij}^0 = \delta_{ij}$. Скорость распространения теплоты D для предложенной модели совпадает с известным значением $D = \sqrt{\lambda^{(T)}/(\rho c \tau_q)}$, где $\lambda^{(T)} = \varphi_{ik} Z_{kj}^{(1)} \delta_{ij}/3$ – теплопроводность изотропного массивного материала.

Оценка теплоемкости. Рассмотрим некоторые частные случаи. Пусть происходит медленный нагрев тела объемом V , ограниченного поверхностью S . Этот случай соответствует стандартным методам измерения теплоемкости материала. Тогда, полагая $\chi_i \equiv 0$ и $q_V \equiv 0$, из (1) и (4) имеем

$$\begin{aligned} \Phi(x_1, x_2, x_3, t) = & \frac{1}{A_{44}} (T(x_1, x_2, x_3, t) (1 - A_{44}) T_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_T/A_{44}}\right) - \\ & - \int_0^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_T/A_{44}}\right) \frac{\partial T(x_1, x_2, x_3, t')}{\partial t'} dt') \end{aligned}$$

и при однородной по объему тела температуре из (3) получим

$$\begin{aligned} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_1 \left((1 - A_{44}) \frac{T_0}{\tau_T} \exp\left(-\frac{t}{\tau_T/A_{44}}\right) \Big|_T + \right. \\ \left. + \frac{1}{A_{44}} \left(\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_{t=0} \exp\left(-\frac{t}{\tau_T/A_{44}}\right) - \right. \right. \\ \left. \left. - \int_0^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_T/A_{44}}\right) \frac{\partial^2 T}{\partial t'^2} dt' \right) \right) = \frac{\tilde{q}(t) S}{V}, \quad (14) \end{aligned}$$

где T_0 — начальная температура; $\tilde{q}(t)$ — плотность подводимого к телу теплового потока.

При $\tau_T \rightarrow 0$ $\rho(c + c_1/A_{44})\dot{T} = \tilde{q}(t)S/V$, т.е. удельная массовая теплоемкость в предложенной модели может отличаться от соответствующей величины для массивных материалов на c_1/A_{44} . Этот эффект в работах [1, 2] объясняют изменением вида и границ фононного спектра, т.е. изменением функции распределения частот колебаний атомов. При этом в случае малых частиц в теплоемкости присутствует вклад, обусловленный их большой поверхностью, и поэтому можно ожидать увеличения теплоемкости в несколько раз.

Если в качестве начальных условий выбрать

$$T|_{t=0} = T_0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{t=0} = 0 \quad (15)$$

и ввести безразмерные параметры и переменные $\bar{t} = t/t_0$; $\theta = (T - T_0)/T^*\tilde{c} = c_1/c$, $D_T^2 = \tau_T/t_0$; $T^* = Bt_0^m S/(\rho c V)$; $q_0(\bar{t}) = M\bar{t}^m \exp(-m\bar{t})$; $M = m^m/(m-1)!$, то уравнение (14) и начальные условия (15) можно переписать в безразмерном виде

$$\left(1 + \frac{\tilde{c}}{A_{44}}\right) \frac{\partial \theta}{\partial \bar{t}} - \frac{\tilde{c}}{A_{44}} \int_0^{\bar{t}} \exp\left(-\frac{\bar{t} - t'}{D_T^2/A_{44}}\right) \frac{\partial^2 \theta}{\partial t'^2} dt' = q_0; \quad (16)$$

$$\theta(0) = 0, \quad \dot{\theta}(0) = 0.$$

Аналитическое решение задачи (16) может быть найдено с помощью преобразования Лапласа по переменной \bar{t} :

$$\theta(\bar{t}) = \int_0^{\bar{t}} q_0(u) \left[\frac{A_{44}}{A_{44} + \tilde{c}} + \frac{\tilde{c}}{A_{44} + \tilde{c}} \exp\left(-\frac{A_{44} + \tilde{c}}{D_T^2}(\bar{t} - u)\right) \right] du. \quad (17)$$

На рис. 1 представлены в сравнении средние значения температуры, вычисленные по формуле (17) для различных значений A_{44} , \tilde{c} , и среднее значение температуры для модели, описываемой параболическим уравнением теплопроводности.

Видно, что с уменьшением значения параметра A_{44} , который мы ассоциируем с размером частицы, уменьшается и значение средней по объему температуры, что может быть свидетельством роста теплоемкости.

С увеличением параметра \tilde{c} , т.е. ростом отношения c_1/c , значение средней температуры также уменьшается.

Оценка теплопроводности. Для оценки теплопроводности наноструктурных материалов положим $Z_{ij}^{(2)} = 0$; $A_{i4} = 0$ и $\tau_q \dot{\chi}_i \approx 0$. Тогда

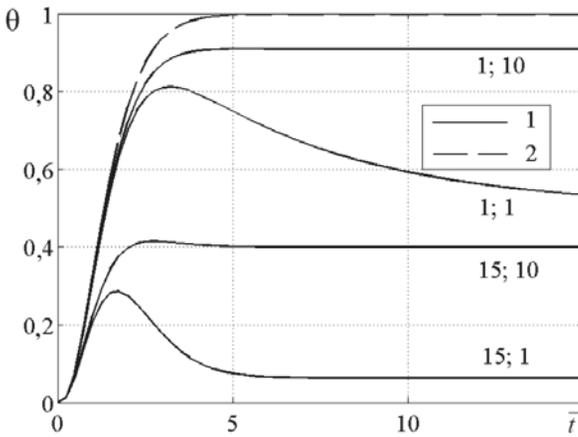


Рис. 1. Зависимость средней по объему температуры θ от времени \bar{t} : сплошные кривые — расчет по формуле (17); штриховая кривая — параболическая теплопроводность; цифры у кривых — соответственно значения \bar{c} и A_{44}

из (8) получим $\chi_j = B_{ji}\bar{\chi}_i$, $B_{ji} = A_{ij}^{-1}$ и в соответствии с (12) имеем

$$q_i = \varphi_{ik} B_{kj} \bar{\chi}_j = -\varphi_{ik} B_{km} Z_{mj}^{(1)} \partial T / \partial x_j = -\Lambda_{ij} \partial T / \partial x_j,$$

где $\Lambda_{ij} = \varphi_{ik} B_{km} Z_{mj}^{(1)}$ — компоненты тензора теплопроводности наноструктурных материалов. Следует отметить, что параметры $B_{ij} = B_{ji}$ позволяют учесть локальную анизотропию теплопроводности наноструктурных материалов при изотропии материалов в макромасштабе. Для массивных материалов $B_{km} = \delta_{km}$ и компоненты тензора теплопроводности $\lambda_{ij} = \varphi_{ik} \delta_{km} Z_{mj}^{(1)} = \varphi_{ik} Z_{kj}^{(1)}$ и $\varphi_{ik} = \varphi_{ki}$, $Z_{kj}^{(1)} = Z_{jk}^{(1)}$ [3–6]. Так как теплопроводность наноструктурных материалов складывается из электронной и решеточной составляющих (для металлов преобладает первая, для полупроводников и диэлектриков — вторая), то снижение теплопроводности нанометаллов обусловлено рассеянием электронов на межзеренных границах, а для диэлектриков и полупроводников — рассеянием фононов на поверхностях раздела элементов наноструктуры [1]. Введение в определяющие уравнения параметров B_{ij} позволяет учесть эти процессы при построении феноменологической модели.

Действительно, для изотропных массивных материалов возможны только два варианта получения выражения для λ . В первом варианте $\varphi_{ik} = \varphi_0 \delta_{ik}$ и $Z_{kj}^{(1)} = Z_0 \delta_{kj}$, тогда $\lambda_{ij} = \varphi_0 Z_0 \delta_{ik} \delta_{kj} = \lambda \delta_{ij}$. Во втором варианте $\varphi_{ik} = \varphi_0 \varphi_{ik}^{(0)}$, $Z_{kj}^{(1)} = Z_0 Z_{kj}^{(0)}$ и $Z_{kj}^{(0)} = (\varphi_{jk}^{(0)})^{-1}$ (или $\varphi_{ik}^{(0)} = (Z_{ki}^{(0)})^{-1}$), тогда $\lambda_{ij} = \varphi_0 Z_0 \varphi_{ik}^{(0)} Z_{kj}^{(0)} = \varphi_0 Z_0 \delta_{ij} = \lambda \delta_{ij}$. Следовательно, для анизотропных на микроуровне массивных материалов во втором варианте также возможна изотропия теплопроводности на

макроуровне. Для наноструктурных материалов анизотропия теплопроводности на наноуровне существует всегда, а именно

$$\Lambda_{ij} = \varphi_{ik} B_{km} Z_{mj}^{(1)} = \varphi_0 Z_0 \delta_{ik} B_{km} \delta_{mj} = \lambda B_{ij}$$

или

$$\Lambda_{ij} = \varphi_0 Z_0 \varphi_{ik}^{(0)} B_{km} (\varphi_{jm}^{(0)})^{-1} = \lambda \Lambda_{ij}^{(0)},$$

где $\Lambda_{ij}^{(0)} = \varphi_{ik}^{(0)} B_{km} (\varphi_{jm}^{(0)})^{-1}$.

Получить значение теплопроводности изотропного на макроуровне наноструктурного материала можно следующим образом [6]. Выделим в наноструктурном материале объем с достаточно большим числом произвольно ориентированных относительно глобальной системы координат элементов структуры. При случайной ориентации любое расположение “наноосей” равновероятно и относительная плотность распределения нанообъемов материала $\eta_0 = 1/(8\pi^2)$ [6]. Тогда операцию осреднения тензоров с компонентами B_{ij} или $\Lambda_{ij}^{(0)}$ можно представить в виде

$$\bar{B}_{ij} \left(\bar{\Lambda}_{ij}^{(0)} \right) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi} \eta_0 B_{ij}(\theta, \psi, \varphi) \sin \theta d\theta,$$

где θ, ψ, φ — угловые координаты Эйлера. Заменяя далее B_{ij} или $\Lambda_{ij}^{(0)}$ их средними значениями $\bar{B}_{ij} = B_0 \delta_{ij}$ или $\bar{\Lambda}_{ij}^{(0)} = \Lambda_0 \delta_{ij}$, получим два варианта выражения для теплопроводности изотропного наноструктурного материала: $\Lambda_{ij} = \lambda B_0 \delta_{ij}$ или $\Lambda_{ij} = \lambda \Lambda_0 \delta_{ij}$. Поскольку теплопроводность наноструктурного материала меньше теплопроводности массивного материала [1], то $0 < B_0 < 1$ или $0 < \Lambda_0 < 1$.

Можно предположить, что параметры B_0 (Λ_0) зависят от характерного размера частицы (зерна). Если положить, что такая зависимость универсальна для всех материалов, то при известной теплопроводности массивного материала будет возможно прогнозирование теплопроводности наноструктурного материала.

Оценка влияния некоторых параметров на распределение температуры. Проанализируем влияние параметров на распространение теплоты в наноструктурном материале на примере задачи поверхностного нагрева, не учитывая взаимосвязи полей температуры и деформации.

Рассмотрим кинетические уравнения следующего вида:

$$\tau_{ij}^{(q)} \dot{\chi}_i + \chi_j = \bar{\chi}_i; \quad \tau_T \dot{\Phi} + \Phi = \bar{\Phi}. \quad (18)$$

В этом случае уравнение теплопроводности запишем как

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\rho c}{\tau_T} \int_0^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_T}\right) \frac{\partial T}{\partial t'} dt' = \sum_{\mu=1,2,3} \left(\varphi_{ij} \frac{\alpha_{j\mu} C_\mu}{\lambda_\mu} Z_{1m} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_m} - \varphi_{ij} \frac{\alpha_{j\mu} C_\mu}{\lambda_\mu} Z_{1m} \int_0^t \exp(-\lambda_\mu(t-t')/\tau_q) \frac{\partial^3 T}{\partial t' \partial x_i \partial x_m} dt' \right), \quad (19)$$

где λ_μ — собственные значения однородной системы, соответствующей (18); $(\alpha_{1\mu} \alpha_{2\mu} \alpha_{3\mu})^T$ — собственные векторы; C_μ — некоторые константы, полностью определяемые компонентами $\tau_{ij}^{(q)}$.

Расчет температурных полей в полном объеме представляет собой сложную задачу. Оценим влияние параметров нагрева на распределение температуры, используя одномерную расчетную схему, предполагая, что температура зависит только от координаты x_1 , направленной вглубь полупространства, и времени t .

В одномерном случае уравнение теплопроводности будет иметь вид

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\rho c}{\tau_T} \int_0^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_T}\right) \frac{\partial T}{\partial t'} dt' = \sum_{\mu=1,2,3} \left(\varphi_{11} Z_{11} \frac{\alpha_{1\mu} C_\mu}{\lambda_\mu} \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} - \varphi_{11} Z_{11} \frac{\alpha_{1\mu} C_\mu}{\lambda_\mu} \int_0^t \exp(-\lambda_\mu(t-t')/\tau_q) \frac{\partial^3 T}{\partial t' \partial x_1^2} dt' \right). \quad (20)$$

Начальные и краевые условия для такой модели поверхностного нагрева запишем в виде

$$\begin{aligned} T(x_1, t)|_{t=0} &= T_0, \quad \left. \frac{\partial T(x_1, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0; \\ x = 0: \quad & -\varphi_{11} Z_{11} \frac{\alpha_{1\mu} C_\mu}{\lambda_\mu} \frac{\partial T}{\partial x_1} + \\ & + \varphi_{11} Z_{11} \frac{\alpha_{1\mu} C_\mu}{\lambda_\mu} \int_0^t \exp(-\lambda_\mu(t-t')/\tau_q) \frac{\partial^2 T}{\partial t' \partial x_1} dt' = q_s; \\ x \rightarrow \infty: \quad & \frac{\partial T(x_1, t)}{\partial x} = 0, \end{aligned} \quad (21)$$

где $q_s = B M t^m \exp(-mt/t_0)$, $m \geq 1$, $m \in \mathbb{N}$.

Если ввести безразмерные параметры и переменные $z = x_1/\sqrt{at_0}$, $\bar{t} = t/t_0$; $\theta = (T - T_0)/T^*$; $D_q^2 = \tau_q/t_0$; $D_T^2 = \tau_T/t_0$; $\tilde{C}_i = \alpha_{1i} C_i/\lambda_i$; $T^* = B t_0^m \sqrt{at_0}/\lambda^{(T)}$; $a = \lambda^{(t)}/(\rho c)$; $q_0(\bar{t}) = M \bar{t}^m \exp(-m\bar{t})$; $M =$

$= m^m / (m - 1)!$ то уравнение (20) и краевые условия (21) можно переписать в безразмерном виде:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \bar{t}} + \frac{1}{D_T^2} \int_0^{\bar{t}} \exp\left(-\frac{\bar{t} - t'}{D_T^2}\right) \frac{\partial \theta}{\partial t'} dt' =$$

$$= \sum_{\mu=1,2,3} \left(\tilde{C}_\mu \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - \tilde{C}_\mu \int_0^{\bar{t}} \exp(-\lambda_\mu(\bar{t} - t')/D_q^2) \frac{\partial^3 \theta}{\partial t' \partial z^2} dt' \right); \quad (22)$$

$$\theta(z, \bar{t})|_{\bar{t}=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \theta(z, \bar{t})}{\partial \bar{t}} \right|_{\bar{t}=0} = 0;$$

$$z = 0: \quad -\left. \frac{\partial \theta(z, \bar{t})}{\partial z} + \int_0^{\bar{t}} \exp\left(-\frac{\bar{t} - t'}{D_q^2}\right) \frac{\partial}{\partial t'} \frac{\partial \theta(z, t')}{\partial z} dt' \right|_{z=0} = q_0; \quad (23)$$

$$z \rightarrow \infty: \quad \frac{\partial \theta(z, \bar{t})}{\partial z} \rightarrow 0.$$

Решение задачи (22), (23) может быть получено с использованием преобразования Лапласа по переменной \bar{t} . Однако в этом случае достаточно сложно выполнить обратные преобразования, поэтому были получены асимптотические решения.

Решение задачи (22), (23) при малых значениях \bar{t} имеет вид

$$\theta(z, \bar{t}) = \int_0^{\bar{t}} [D_q^6 \ddot{q}_0(\bar{t} - u) + D_q^4(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3) \ddot{q}_0(\bar{t} - u) +$$

$$+ D_q^2(\lambda_1 \lambda_2 + \lambda_2 \lambda_3 + \lambda_3 \lambda_1) \dot{q}_0(\bar{t} - u) + (\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 + D_q^6) q_0(\bar{t} - u)] \times$$

$$\times \int_0^u F_1(u - \nu) F_2(\nu) d\nu du, \quad (24)$$

где

$$F_1(x) = \begin{cases} B_1(\exp(-xs_1) - \exp(-xs_2)), & \beta_2^2 - 4\beta_1\beta_3 > 0; \\ \frac{2}{\sqrt{4\beta_1\beta_3 - \beta_2^2}} \exp\left(-x \frac{\beta_2}{2\beta_1}\right) \sin\left(x \frac{\sqrt{4\beta_1\beta_3 - \beta_2^2}}{2\beta_1}\right), & \\ \beta_2^2 - 4\beta_1\beta_3 < 0; \end{cases}$$

$$F_2(x) = \begin{cases} \sqrt{\beta_1} D_q^6 \exp(-x R_3) I_0 \left(\sqrt{|R_4|} \sqrt{x^2 - z^2 \frac{D_q^6}{\beta_1}} \right), & R_4 > 0; \\ \sqrt{\beta_1} D_q^6 \exp(-x R_3) J_0 \left(\sqrt{|R_4|} \sqrt{x^2 - z^2 \frac{D_q^6}{\beta_1}} \right), & R_4 < 0; \end{cases}$$

$$s_1 = \frac{\beta_2 + \sqrt{\beta_2^2 - 4\beta_1\beta_3}}{2\beta_1}; \quad s_2 = \frac{\beta_2 - \sqrt{\beta_2^2 - 4\beta_1\beta_3}}{2\beta_1}; \quad B_1 = \frac{1}{\beta_1(s_1 - s_2)};$$

$$R_3 = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3}{2D_q^2}; \quad R_4 = \frac{(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)^2}{4D_q^4} - \frac{(\lambda_1\lambda_2 + \lambda_1\lambda_3 + \lambda_2\lambda_3)}{D_q^4}.$$

Решение задачи (22), (23) при $\bar{t} \rightarrow +\infty$ имеет вид

$$\begin{aligned} \theta(z, \bar{t}) = & \int_0^{\bar{t}} [D_q^6 \ddot{q}_0(\bar{t} - u) + D_q^4(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3) \dot{q}_0(\bar{t} - u) + \\ & + D_q^2(\lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1) \dot{q}_0(\bar{t} - u) + \lambda_1\lambda_2\lambda_3 q_0(\bar{t} - u)] \times \\ & \times \int_0^u F_1(u - \nu) \frac{1}{\sqrt{R_1}} I_0 \left(\frac{R_2}{2R_1} \sqrt{\nu - z^2 R_1} \right) d\nu du, \quad (25) \end{aligned}$$

где

$$R_1 = \frac{D_q^2(\lambda_1\lambda_2 + \lambda_1\lambda_3 + \lambda_2\lambda_3)}{\beta_3} - \frac{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\beta_2}{\beta_3^2}, \quad R_2 = \frac{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}{\beta_3}.$$

На рис. 2 приведены зависимости безразмерной температуры поверхности $\theta(0, \bar{t})$ от времени \bar{t} , вычисленные при заданных значениях параметров D_q^2 , D_T^2 и тензора $T^{(0)}$, причем

$$\begin{aligned} T_1^{(0)} = & \begin{pmatrix} \sqrt{3}/3 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}/3 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}/3 \end{pmatrix}; \quad T_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{6}/12 & \sqrt{6}/12 \\ \sqrt{6}/12 & 1/2 & \sqrt{6}/12 \\ \sqrt{6}/12 & \sqrt{6}/12 & 1/2 \end{pmatrix}; \\ T_3^{(0)} = & \begin{pmatrix} 2/3 & 1/(2\sqrt{3}) & 1/(2\sqrt{3}) \\ 1/(2\sqrt{3}) & 1/3 & 0 \\ 1/(2\sqrt{3}) & 0 & 1/3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

На рис. 3 изображены распределения безразмерной температуры по глубине полупространства при $D_q^2 = 10$ и $D_T^2 = 10$ для некоторых значений \bar{t} . Отметим, что значения температуры, вычисленные

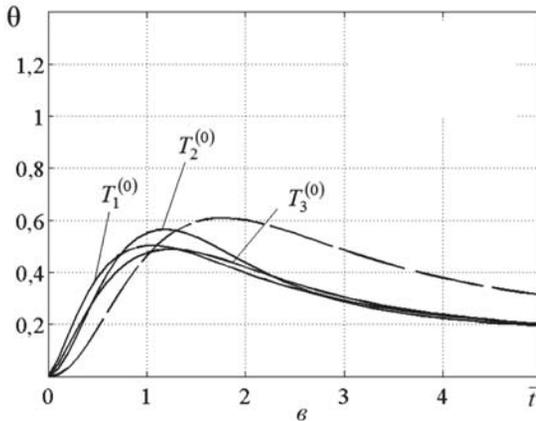
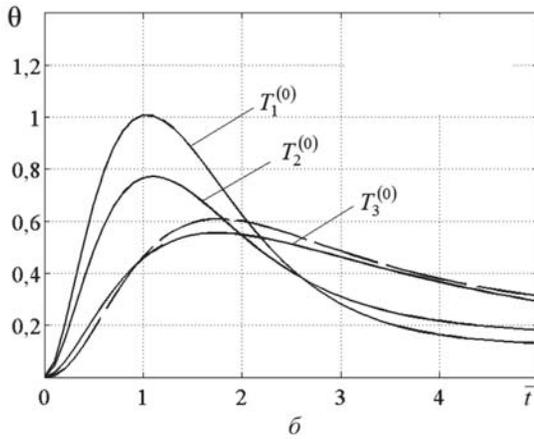
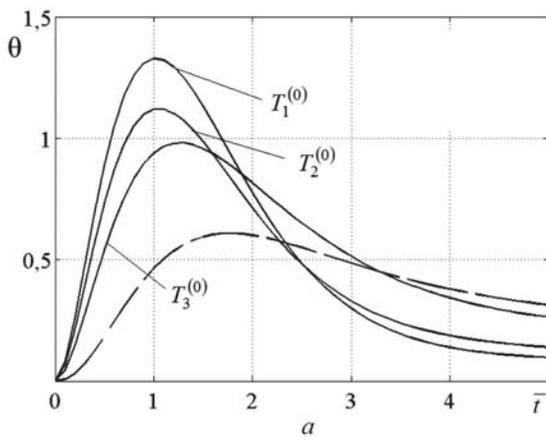


Рис. 2. Изменение температуры поверхности полупространства во времени при $z = 0$, $m = 2$ (сплошные кривые – расчет по формуле (24), штриховые кривые – параболическое уравнение теплопроводности):

$a - D_q^2 = 10, D_T^2 = 10$; $b - D_q^2 = 10, D_T^2 = 1$; $v - D_q^2 = 1, D_T^2 = 10$

по формулам (24), (25), значительно отличаются от температуры, вычисленной исходя из параболического уравнения теплопроводности.

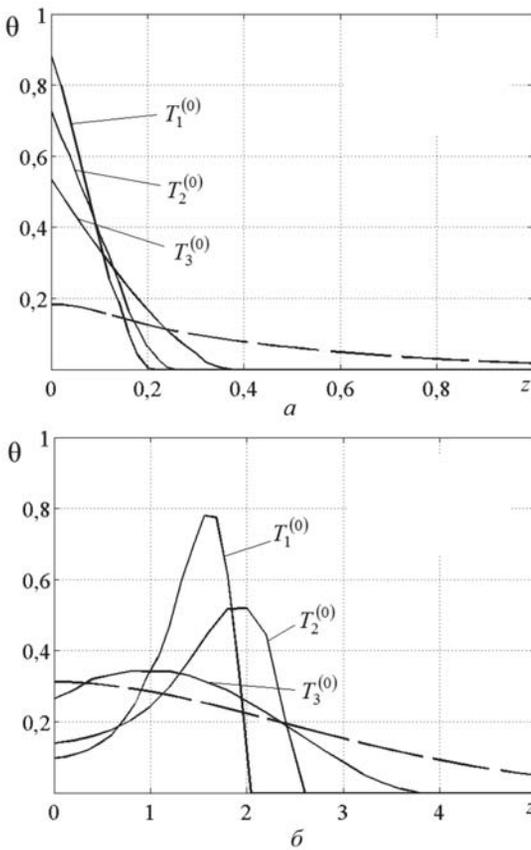


Рис. 3. Распределение температуры по глубине полупространства z при $D_q^2 = 10$, $D_T^2 = 10$ (сплошные кривые – расчет по формуле (24), штриховые кривые – параболическое уравнение теплопроводности):
 $a - \bar{t} = 0,5$; $b - \bar{t} = 5$

Из приведенных рисунков можно сделать вывод, что различия в температурных полях тем больше, чем больше значение параметра D_q^2 , т.е. чем меньше скорость распространения теплоты.

Также очевидно, что температура при $T^{(0)} = T_1^{(0)}$ значительно выше, чем при $T^{(0)} = T_2^{(0)}$ и $T^{(0)} = T_3^{(0)}$. Это можно объяснить тем, что в матрице $T_1^{(0)}$ все недиагональные элементы равны нулю, что, в свою очередь, говорит о меньшем рассеянии энергии. А при $T^{(0)} = T_3^{(0)}$ теплота быстрее проникает вглубь среды, что обусловлено тем, что элемент $(T_3^{(0)})_{11}$ больше остальных диагональных элементов, и $(T_3^{(0)})_{23} = (T_3^{(0)})_{32} = 0$. Таким образом, расположение наноструктурных элементов в объеме влияет на распределение температуры.

Выводы. На основе соотношений рациональной термодинамики предложена математическая модель процесса теплопроводности в

наноструктурных материалах, построенная с использованием модели среды с внутренними параметрами состояния. Выполнена оценка теплоемкости и теплопроводности наноструктурного материала. Рассмотренная модель позволяет учитывать эффекты, характерные для наноструктурных материалов, — более низкую теплопроводность и более высокую теплоемкость.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проекты № 08-08-00615а, 09-08-00699а, гранта государственной поддержки ведущих научных школ НШ-4046.2010.8.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Андреевский Р. А., Рагуля А. В. Наноструктурные материалы: Учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений. – М.: Издательский центр “Академия”, 2005. – 192 с.
2. Гусев А. И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. – М.: Физматлит, 2005. – 416 с.
3. Кувыркин Г. Н. Термомеханика деформируемого твердого тела при высокоинтенсивном нагружении. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 1993. – 142 с.
4. Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2008. – 512 с.
5. Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. Термомеханическая модель релаксирующего твердого тела при нестационарном нагружении // Докл. РАН. – 1995. – Т. 354. – № 2. – С. 193.
6. Зарубин В. С. Прикладные задачи термпрочности элементов конструкций. – М.: Машиностроение, 1985. – 296 с.

Статья поступила в редакцию 21.05.2010

Георгий Николаевич Кувыркин родился в 1946 г., окончил МВТУ им. Н.Э.Баумана в 1970 г. Д-р техн. наук, профессор, зав. кафедрой “Прикладная математика” МГТУ им. Н.Э.Баумана. Лауреат премии Правительства РФ в области науки и техники. Автор более 160 научных работ в области прикладной математики и математического моделирования термомеханических процессов в материалах и элементах конструкций.

G.N. Kuvyrkin (b. 1946) graduated from the Bauman Moscow Higher Technical School in 1970. D. Sc. (Eng.), professor, head of “Applied Mathematics” department of the Bauman Moscow State Technical University. Laureate of RF Government Prize in Science and Technology. Author of more than 160 publications in the field of applied mathematics and mathematical simulation of thermomechanical processes in materials and construction members.

Инга Юрьевна Савельева родилась в 1985 г., окончила в 2008 г. МГТУ им. Н.Э.Баумана. Аспирантка кафедры “Прикладная математика” МГТУ им. Н.Э.Баумана. Автор шести научных работ в области моделирования нестационарной теплопроводности.

I.Y. Savelyeva (b. 1985) graduated from Bauman Moscow State Technical University in 2008. Post-graduate of “Applied mathematics” department of Bauman Moscow State Technical University. Author of 6 publications in the field of mathematical simulation of nonstationary heat conductivity.