

УДК 530.162:548.51

ПРОИЗВОДСТВО ЭНТРОПИИ НА НЕРАВНОВЕСНОМ ФРОНТЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

О.Н. ШАБЛОВСКИЙ

*Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого»,
Республика Беларусь*

Введение. Ряд современных способов получения твердых материалов характеризуется большими скоростями кристаллизации [1]. Это относится, в частности, к металлическим системам при кристаллизации из глубоко переохлажденного расплава, а также к новым способам получения тонких пленок. Математическое моделирование таких процессов требует учета неравновесных явлений теплопереноса на фронте фазовых превращений (ФФП). В работах [2, 3] представлены новые постановки релаксационных тепловых задач направленного затвердевания и указаны условия выбора термодинамически допустимых фазовых границ. Данная работа является продолжением [2, 3] и содержит вывод формулы для производства энтропии на ФФП.

Динамические условия совместности на ФФП.

Исходные уравнения теплопереноса имеют вид:

$$c \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{vq}{x} = 0; \quad q + \gamma \frac{\partial q}{\partial t} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (1)$$

Здесь приняты обозначения: T – температура; q – удельный тепловой поток; λ – коэффициент теплопроводности; $c = \rho c_p$ – объемная теплоемкость; γ – время релаксации теплового потока; t – время; x – декартова либо радиальная координата; L – теплота фазового перехода единицы объема вещества; N – скорость перемещения ФФП; $v = 0, 1, 2$ – параметр, характеризующий тип симметрии (плоский, цилиндрический, сферический).

Условия динамической совместности на ФФП:

$$q_j - q_* = N(u_j - u_*) - Q, \quad Q = L(N + \gamma dN / dt);$$

$$N(q_j - q_*) = V_j - V_*,$$

где

$$u = \int_0^T c(T) dT; \quad V = \int_0^T \frac{\lambda(T)}{\gamma(T)} dT = \int_0^u w^2(u) du; \quad w^2 = \frac{\lambda}{c\gamma}.$$

Индексами * и j отмечены значения функций, соответственно, справа (жидкая либо аморфная фаза) и слева (кристаллическая фаза) от ФФП $x = x_j(t)$. Термодинамически допустимые сильные разрывы теплового поля налагают ограничения на уравнение состояния среды $V = V(u)$. Эти ограничения даны в [2, 3] для знакопостоянной и знакопеременной выпуклостей функции $V(u)$.

В локально-неравновесном случае плотность энтропии $S(u, q)$ подсчитывается по формуле

$$S = S_{eq} - \frac{\gamma q^2}{2\lambda T^2},$$

где S_{eq} – локально-равновесная энтропия, см. обзор [4]. Полагаем далее, что локально-равновесная и локально-неравновесная температуры одинаковые: $T = \theta$. Уравнение энергии в (1) преобразуем, применяя формулы:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial S}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{T} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial t};$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{q}{T} \right) = \frac{1}{T} \frac{\partial q}{\partial x} - \frac{q}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x}.$$

Тогда получаем уравнение, описывающее изменение энтропии:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{q}{T} \right) = \frac{q^2}{\lambda T^2} - \frac{vq}{xT}.$$

Отсюда выводим условие динамической совместности:

$$N(S_j - S_*) = \left(\frac{q}{T} \right)_j - \left(\frac{q}{T} \right)_* + \omega,$$

где ω – производство энтропии на ФФП.

В предельном случае $\gamma \rightarrow 0$ имеем равновесный фазовый переход, для которого $T_* = T_j$, $\omega = 0$.

Таким образом, итоговые формулы имеют вид:

$$\omega = N \cdot \Delta S + \left(\frac{q}{T} \right)_* - \left(\frac{q}{T} \right)_j; \quad (2)$$

$$\Delta S = S_j - S_* = (\Delta S)_{eq} - \left(\frac{\gamma q^2}{2\lambda T^2} \right)_j + \left(\frac{\gamma q^2}{2\lambda T^2} \right)_*.$$

При кристаллизации переохлажденного расплава изменение равновесной энтропии равно

$$(\Delta S)_{eq} = \int_{T_*}^{T_c} \frac{c(T)}{T} dT - \int_{T_j}^{T_c} \frac{c(T)}{T} dT - \frac{L}{T_c},$$

где T_c – температура кристаллизации. В первом из этих интегралов содержится теплоемкость $c(T)$ жидкой фазы, во втором интеграле – теплоемкость $c(T)$ кристаллической фазы.

Вывод: условие необратимости теплового процесса на неравновесном фронте фазовых превращений состоит в том, что $\omega > 0$, см. формулу (2).

Литература

1. Васильев В.А., Митин Б.С., Пашков И.Н. и др. Высокоскоростное затвердевание расплава. – М.: «СП ИНТЕРМЕТ ИНЖИНИРИНГ», 1998. – 400 с.
2. Шабловский О.Н. //Труды четвертой междунар. конф. по матем. моделированию. Т.1. – М.: Изд-во «Станкин», 2001. – С. 99-107.
3. Шабловский О.Н. //Поверхность. – 2002. – № 2. – С. 49-54.
4. Соболев С.Л. //Успехи физических наук. – 1997. – Т. 167. – № 10. – С. 1095-1106.

Получено 11.10.2002 г.