

АЛГОРИТМ РОЗРАХУНКУ КОЕФІЦІЄНТА ОБ'ЄМНОГО СТИСНЕННЯ ЗА ДОПОМОГОЮ ІТ ТЕХНОЛОГІЙ

Мочалов О. О.¹ – д.т.н., професор;

Шаповал Н. О.² – к.т.н., доцент;

Коваль С.С.³ – к.ф.-м.н., доцент;

Євфимко К.Д.⁴ – старший викладач.

^{1,2,3,4} Національний університет кораблебудування ім. адм. Макарова

^{1,2,3,4} Україна, Миколаїв

¹ oleksandr.mochalov@nuos.edu.ua, ² natalia.shapoval@nuos.edu.ua,

³ sergiy.koval@nuos.edu.ua, ⁴ kostiantyn.yevfymko@nuos.edu.ua.

Анотація. Розглянуто можливості моделювання і представлений алгоритм проведення обчислювального експерименту для розрахунку коефіцієнта об'ємного стиснення за допомогою методу структурних одиниць.

Ключові слова: коефіцієнт об'ємного стиснення, структурна одиниця, міжатомна відстань, зміщення атомів, сили взаємодії, потенціал міжатомної взаємодії.

Вступна частина. В даний час, хоча ми і використовуємо поняття коефіцієнта об'ємного стиснення в термодинамічних розрахунках, проте нам не відома природа сил цього явища. Значення коефіцієнта об'ємного стиснення визначається експериментально, згідно відомого співвідношення $k_p = \frac{dV}{V \cdot dp}$ [1]. Експериментальні дослідження при великих значеннях тиску p затруднені і провести їх для кожного матеріалу неможливо.

Дослідження фізичних властивостей речовин актуально розраховувати за допомогою нанотехнологій на структурному рівні. В даний час можливості обчислювальної техніки дозволяють розробляти нові методи дослідження фізичних властивостей твердих тіл на мікрорівні, а також безпосередньо дослідити міжатомну взаємодію. Одним з таких методів є метод структурних одиниць, який можна використовувати для дослідження і прогнозування фізичних властивостей матеріалів [2].

Мета роботи: вивести закономірність і записати вираз для розрахунку коефіцієнта об'ємного стиснення k_p , використовуючи метод структурних одиниць.

Основна частина. Розглянемо висновок вираження для коефіцієнта об'ємного стиснення k_p , як функції від фізичних властивостей тіл і термодинамічних параметрів p , V , T .

Запишемо зміну об'єму структурної одиниці від термодинамічних параметрів, використовуючи загальновідомий вираз [1]

$$\frac{\Delta V}{V_0} = 3\beta T - k_p p, \quad (1)$$

де V_0 – об'єм структурної одиниці при $T = 0$ К;

p – результуючий тиск;

β – коефіцієнт лінійного розширення структурної одиниці матеріалу;

k_p – коефіцієнт об'ємного стиснення структурної одиниці.

Використовуючи рівняння (1) запишемо вираз для розрахунку коефіцієнта k_p :

$$k_p = \frac{3\beta T - \frac{\Delta V}{V_0}}{p}, \quad (2)$$

зміна об'єму структурної одиниці

$$\Delta V = V_0 \left[\left(1 + 3 \frac{\Delta r}{r_0} \right) - 1 \right] = r_0^3 \cdot 3 \frac{\Delta r}{r_0},$$

де r_0 – міжатомна відстань структурної одиниці при $T = 0$ К.

Зробимо розрахунок результуючого тиску структурної одиниці, вираженого через зовнішній тиск $p_{зов}$ та тиск обумовлений силами міжатомної взаємодії $p_{ат}$

$$p = p_{зов} + p_{ат}.$$

Тиск $p_{ат}$, створюваний атомарними силами взаємодії в структурну одиницю, знайдемо із співвідношення

$$p_{ат} = \frac{F_{ам}}{r_0^2 \left(1 + 2 \frac{\Delta r}{r_0} \right)},$$

де $F_{ам} = -\frac{d\Delta W(\Delta r)}{d\Delta r}$, $\Delta W(\Delta r) = \varepsilon (1 + e^{-2a\Delta r} - 2e^{-a\Delta r})$ [3].

Запишемо вираз для повного тиску

$$p = \frac{F_{зов} \pm F_{ам}}{r_0^2 \left(1 + 2 \frac{\Delta r}{r_0} \right)} = \frac{F_{зов} \pm 2a\varepsilon (e^{-2a\Delta r} - e^{-a\Delta r})}{r_0^2 \left(1 + 2 \frac{\Delta r}{r_0} \right)}.$$

Використовуючи збільшення потенціалу міжатомної взаємодії $\Delta W(\Delta r)$ і зв'язок його з температурою структурної одиниці T , після нескладних перетворень, отримаємо співвідношення яке пов'язує зміну межатомної відстані як функції фізичних властивостей структурної одиниці матеріалу і температури [3].

$$\Delta r = \frac{1}{a} \left(\frac{k_B}{\varepsilon} \cdot T \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{або} \quad a\Delta r = \left(\frac{k_B}{\varepsilon} \cdot T \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3)$$

де a – постійна, що характеризує фізичні властивості взаємодіючих атомів;

k_B – постійна Больцмана;

ε – енергія сублімації атомів структурної одиниці.

Підставимо вираз (3) в (2) та перетворивши, отримаємо

$$k_p = \frac{3\beta T - \frac{3x}{r_0}}{p_{\text{зов}} + p_0(e^{-2x} - e^{-x})}, \quad (4)$$

$$\text{де } x = \frac{1}{a} \left(\frac{k_B}{\varepsilon} \cdot T \right)^{\frac{1}{2}};$$

$$p_{\text{зов}} = \frac{F_{\text{зов}}}{r_0^2 \left(1 + 2 \frac{\Delta r}{r_0} \right)} - \text{зовнішній тиск на структурну одиницю};$$

$$p_0 = \frac{2a\varepsilon}{r_0^2 \left(1 + 2 \frac{\Delta r}{r_0} \right)} (e^{-2a\Delta r} - e^{-a\Delta r}) - \text{тиск, обумовлений міжатомними силами взаємодії, при}$$

$T = 0 \text{ К.}$

Згідно, проведеного обчислювального експерименту, наведемо дані розрахунку коефіцієнта об'ємного стиснення [4] $k_p = f(T)$ для заліза при умові $p_{\text{зов}} = \text{const}$, $\beta = f(T)$, $p_0 = f(T)$ у вигляді таблиці і залежності від зміщення атомів в структурну одиницю та температури (див. Таб.1)

Таблиця 1. Розрахунок коефіцієнта об'ємного стиснення заліза.

Зовнішній тиск, $p_{\text{зов}} = \frac{H}{\text{м}^2}$	Відносна зміна об'єму, $\frac{\Delta V}{V}$	Коефіцієнт об'ємного стиснення згідно формули $k_p = \frac{dV}{V \cdot dp}, \frac{\text{м}^2}{\text{Н}}$
$5 \cdot 10^8$	$2,89 \cdot 10^{-3}$	$0,578 \cdot 10^{-11}$
$10 \cdot 10^8$	$5,75 \cdot 10^{-3}$	$0,575 \cdot 10^{-11}$
$15 \cdot 10^8$	$8,56 \cdot 10^{-3}$	$0,5706 \cdot 10^{-11}$
$20 \cdot 10^8$	$11,33 \cdot 10^{-3}$	$0,5666 \cdot 10^{-11}$
$25 \cdot 10^8$	$14,07 \cdot 10^{-3}$	$0,5628 \cdot 10^{-11}$
$30 \cdot 10^8$	$16,78 \cdot 10^{-3}$	$0,5593 \cdot 10^{-11}$

Висновки. Запропонована методика дає можливість обчислити зміну коефіцієнта об'ємного стиснення для різних матеріалів в залежності від їх геометричних і фізичних властивостей, зовнішніх впливів $p_{\text{зов}}$, температури T і сил міжатомної взаємодії $F_{\text{ам}}$. А також дозволяє аналізувати вплив цих величин на коефіцієнт об'ємного стиснення.

REFERENCES

1. Zachek I.R., Kravchyk I.M., Lopatynskyi (Ed.)(2002). Kyr's fiziki [Physics course]. Lviv.
2. Mochalov A.A., Gaisha A.A., Evfimenko K.D. (2009). Dinamika deformacii stryktyrnoy edinicy tverdogo tela ot vneshnego vozdeistviya [The dynamics of deformation of solid's building block from the external action]. The magazine of nano- and electronic Physics , 1/1, 70-79.

3. Sena L.A. (1977). Edinitsi fizicheskikh velichin i ih razmernosti [The Physical units and their dimensions]. Moscow, Russia: Science.

4. Mochalov A.A., Gaisha A.A., Evfimenko K.D. (2014). Issledovaniya temperaturnykh harakteristik tverdogo tela na mikroyrovne s pomosh'yu metoda strukturnykh edinic [The investigation of solid's thermal characteristics in the microlevel using the method of building blocks]. The magazine of nano- and electronic Physics, 4, doi:04040(4cc).

A. Mochalov, N. Shapoval, S. Koval, K. Evfimko

The algorithm for calculating the coefficient of the volumetric compression using the information technology

Annotation. *There are considered the possibilities of the modeling and the algorithm for carrying out a computational experiment for calculating the coefficient of the volumetric compression using the method of structural units is presented.*

Keywords: *the coefficient of volumetric compression, structural unit, interatomic distance, displacing of atoms, interatomic potential*

Мочалов А. А., Шаповал Н. А., Коваль С.С., Евфимко К.Д.

Исследование влияния физических свойств вещества и внешних воздействий на коэффициент объемного сжатия

Аннотация. *Рассмотрены возможности моделирования и представлен алгоритм проведения вычислительного эксперимента для расчета коэффициента объемного сжатия с помощью метода структурных единиц.*

Ключевые слова: *коэффициент объемного сжатия, структурная единица, межатомное расстояние, смещение атомов, силы взаимодействия, потенциал межатомного взаимодействия.*