

А.Ш.Қажикенова, Ж.Б.Шалабаев, Д.Б.Әлібиев

Е.А.Бөкетов атындағы Қарағанды мемлекеттік университеті
(E-mail: aigul-kazhikenova@mail.ru)

Кластерлердің байланысқан деңгейін ескергендегі сұйық галлийдің тұтқырлығы

Мақалада байланысқан кластерлердің сұйық балқымаларға әсер ету деңгейін ескеретін, сұйық галлийдің тұтқырлығын есептейтін жалпы моделі келтірілген. Кристалданған бөлшектерінің біркелкі моделінің сұйық күйіндегі элементарлық кластерінің балқыған металдың температуралық тұтқырлығының тәуелділігі анықталған. Тұтқырлықтың температурадан тәуелділігінің жалпыланған формасы металл ерітіндісінің ағын энергиясының құлшынысын санауға Френкель теңдеуімен бірге қолданылған. Жаңа жартылай эмпирикалық моделі тұтқырлық пен температура арасында тәуелділігінің анықтамалығы галлий ерітіндісі арқылы көрсетілген. Ұсынылып отырған модель бойынша есептелген сұйық галлий тұтқырлығының салыстырмалы нәтижесі келтірілген.

Кілт сөздер: тұтқырлық, модель, Больцман таралуы, ретсізделген бөлшектер концепциясы, реперлік нүкте, галлий.

Ж.Әбішев атындағы Химия-металлургиялық институтының қызметкерлері, техника ғылымдарының докторы, профессор В.П.Мальшев және техника ғылымдарының докторы А.М.Турдукожаева бастамасымен, Больцманның таратылуына негізделген, ретсізделген бөлшектер концепциясы ұсынылды. Тұжырымдамаға сәйкес, заттың үш агрегатты жағдайы жалғыз көзқараспен қарастырылды — құрылыссыз жағдайымен. Барлық жағдайларда энергия көлемінің ретсізденген бөлшектер қозғалысынан ерекшеленетін бөлшектері зерттелді. Ретсізделген бөлшектер концепциясы бойынша, үш агрегатты жағдайда *кристалқозғалысты, сұйыққозғалысты және буқозғалысты* бөлшектері анықталды.

Концепция авторы ретсізделген бөлшектер концепциясына негізделген сұйық металл тұтқырлығының үш моделін ұсынды [1, 2]. Балқымалардың тұтқырлық тәуелділігі кристалқозғалысты бөлшектердің аумалылығын анықтаумен ескерілетін теңестірумен білінуі мүмкін.

$$v = v_r T_r / T, \tag{1}$$

мұнда v_r және T_r — кинематикалық тұтқырлыққа және реперлік нүктедегі абсолютті температураға, өндірістік принципте таңдалатын ең сенімді зертханалық анықтауға сәйкес; немесе бұл әсердің сұйыққозғалысты бөлшектермен әлсізденуі,

$$v = \frac{v_r T_r [\exp(-T_m / T_r) - \exp(-T_b / T_r)]}{T [\exp(-T_m / T) - \exp(-T_b / T)]}, \tag{2}$$

T_m және T_b — балқу және қайнау температурасына сәйкес; немесе тұтқырлықтың сұйық жылжымалы және буқозғалысты бөлшектерімен әлсізденуі

$$v = \frac{v_r T_r \exp(-T_m / T_r)}{T \exp(-T_m / T)} = \frac{v_r T_r}{T} \exp\left(\frac{T_m}{T} - \frac{T_m}{T_r}\right). \tag{3}$$

Бұл үш модельдің балқымалы металдар тұтқырлығының кең ауқымды тексерісі мыналарды орнатуға мүмкіндік берді [3]: біріншіден, ұсынылып отырған үш үлгінің де анықтамалық мәліметтерінің бағынбаған жағдайлары болмаған; екіншіден, бұл бағыныштылық Менделеевтің периодтық заңының, металдардың ионизациялану шамасымен сәйкес.

Сонда да әрбір үш тұтқырлық моделін және таңдауды тексерудің қажеттілігі осындай тәуелділікті құрау әдісіне белгісіздік енгізеді, сондай-ақ мәліметтерді өңдеу барысын қиындатады. Бұл жағдай ретсізденген бөлшектер концепциясының аясында қала отырып, сұйық қалыптың табиғатын тағы бір мұқият қарауға мүмкіндік берді.

Температураға деген тәуелділігі, сұйық жылжымалы және буқозғалысты бөлшектер арқылы тұрақтауы *қауымдастырылған және біріктірілген* кластерлардың пайда болуымен түсіндіріледі.

Бұл бірдей бөлшектердің қосылуы мүмкін болғандықтан, алынған әсерді базалық модель (1) аясында ескеруге мүмкіндік береді:

$$v = v_r (T_r / T)^a. \tag{4}$$

Мұнда a көрсеткіші n -бөлшектік кластерлерінің бірігу мағынасына ие. $a = 1$ (4) болғанда (1) өтеді, $a < 1$ физикалық мағынадан алшақтатылған. Бұл жарамдылыққа сәйкес, алдыңғы үлгілер нәтижесі (1), (2), (3) барлық металдар [3] балқымаларынан әлсіз (1) тәуелділігі анықталмаған.

Бұл көрсеткіштің тіркелуі тұтқырлық мәліметтерінің өңдеуін қажет еткенімен, балқыманың құрылысын толық, мұқият анықтауға мүмкіндік береді. Осыған орай a параметрі (4) былай анықталады:

$$a = \frac{\ln(v/v_r)}{\ln(T_r/T)} \quad (5)$$

Бұл үшін тұтқырлықтың барлық зертханалық мағыналарын қолданған жөн, v_r , T_r санамағанда, белгісіздікке әкеліп соғатын әр түрлі температурада $a = 0/0$, a параметрлерінің келесі орташалау есебін де қолданған жөн:

$$\bar{a} = \frac{1}{m} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq r}}^m \frac{\ln(v_i/v_r)}{\ln(T_r/T_i)} \quad (6)$$

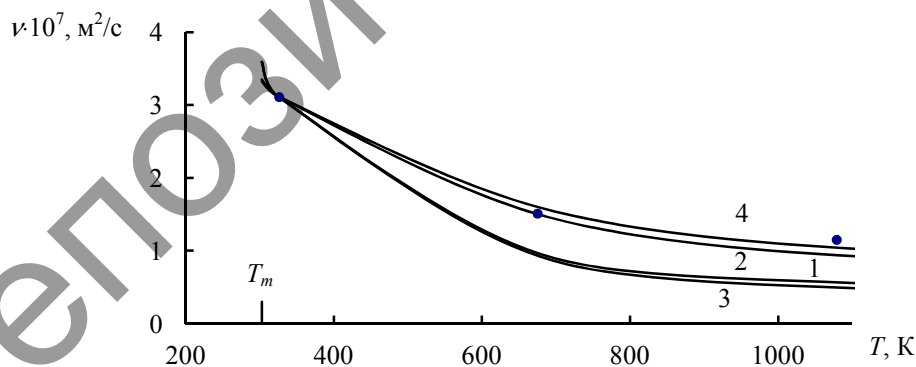
Әдеттегідей, орташа мағынаны анықтағанда біркелкілігін тексеріп, содан соң есептік мағыналарды алу үшін көлемді қолдану керек.

Ұсынылып отырған модель бойынша есептелген сұйық галлий тұтқырлығының салыстырмалы нәтижесін келтірейік. Галлий үшін [4] $T_m = 302,92$ К; $T_b = 2478$ К. Кинематикалық тұтқырлықты санау нәтижелері, сондай-ақ $T_r = 326$ К және $v_r = 3,11 \cdot 10^{-7}$ м²/с температурасында ұсынылып отырған үлгілер (1)–(4) төмендегі кестеде және де 1-ші суретте көрсетілген.

К е с т е

(1)–(4) үлгілерімен галлийдің 10^7 м²/с кинематикалық тұтқырлығын зертханалық және есептелген тұрғыдан салыстыру

T	v (эксп.)	$v(1)$	$v(2)$	$v(3)$	a	$v(4)$
$T_m=302,9$	–	3,35	3,59	3,59	–	3,33
326	3,11	3,11	3,11	3,11	–	3,11
675	1,51	1,50	0,97	0,93	0,99	1,60
1079	1,15	0,94	0,57	0,49	0,83	1,04
$T_b=2478$	–	0,41	0,31	0,18	–	0,49
R	–	0,990	0,644	0,540	–	0,995



v — кинематикалық тұтқырлық; T — температура. Нүктелер, зертханалық мәліметтер бойынша [4]:
1 — (1); 2 — (2); 3 — (3); 4 — (4) модельдер бойынша

1-сурет. Галлийдің кинематикалық тұтқырлығының температураға тәуелділігі

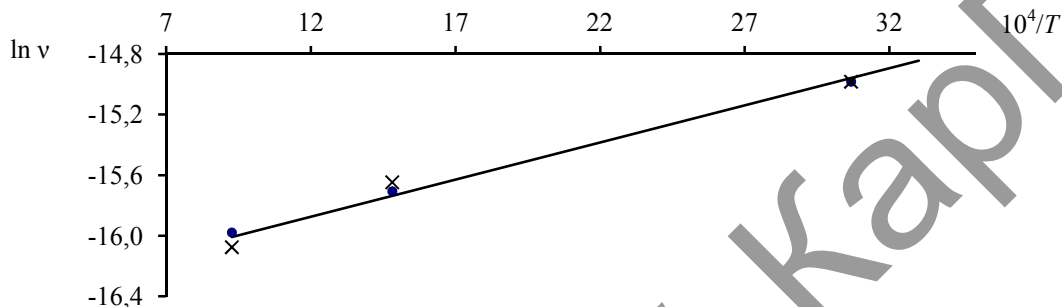
Сонымен, (1) бойынша модельдер және жалпыланған (4) тұтқырлықтың температураға тәуелділігін ең жақсы тәсілмен сипаттайды, корреляция коэффициентіне сәйкес олар 0,990 және 0,995, сондай-ақ осы модельдердің жалпы модельді қолдануға болатынын көрсетеді.

Орташа мағына $\bar{a} = 0,91 < 1$. Кластерлер қауымдастығының байқалатын деңгейі. Кластерлердің қауымдастық деңгейін ескере отырып, (4) модельді қолдануға болады. Сонда галлийдің тұтқырлығын есептеу үшін мына теңдеуді аламыз:

$$\nu = 6,091 \cdot 10^{-5} / T^{0,91} \pm 3,56 \cdot 10^{-9}, \text{ м}^2/\text{с}. \quad (7)$$

Ретсізделген бөлшектер концепция негізінде кристалқозғалысты бөлшектердегі кластерлер қауымдастығын ескере отырып, осы маңызды сипаттаманың температурасын анықтауға мүмкіндік туады.

Металл ерітіндісінің ағын энергиясының құлшынысы (4) модель үшін 4074 Дж/моль, ал зертханалық мәліметтер үшін — 3850 Дж/моль. Галлийдің тұтқырлық логарифмі температураның кері шамасынан тәуелділігі 2-суретте көрсетілген.



ν — кинематическая вязкость; T — температура. Точки, зертханалық мәліметтер бойынша:
 × — (7) үлгі бойынша; тۈзу — $\ln \nu = \ln A' + E_a / (RT)$ бойынша

2-сурет. Галлий тұтқырлығының логарифмі температураның кері шамасынан тәуелділігі

Қорытынды

1. Жұмыстың маңыздылығы физикалық химияның саласындағы қатты, сұйық және газ түріндегі күйінің тек құрылысының құрамына байланысты туындаған мәселенің бірыңғай теориясының есебін шешумен анықталады. Осы айтылған үш күйдегі бөлшектердің ретсіз қозғалысы біріккен энергетикалық заңдылықтарының негізінде мәселенің жалпы шешіміне негіз болып табылады.

2. Сұйық металдардың сұйықтық күйіне алынған нақты нәтижелерді күрделі бірігулер, қорытпалар, көпкомпонентті шлак жүйесінде дамытуға ұсынылады.

Әдебиеттер тізімі

1. Мальшев В.П., Турдожаева А.М., Кажикенова А.Ш. Вязкость расплавов металлов по концепции хаотизированных частиц // Тяжелое машиностроение. — 2009. — № 6. — С. 37–39.
2. Мальшев В.П., Нурмагамбетова А.М. Зависимость вязкости расплавов от температуры на основе концепции хаотизированных частиц: Тезисы докл. XV Междунар. конф. по химической термодинамике в России. — М., 2005. — С. 197.
3. Турдожаева А.М. Применение распределения Больцмана и информационной энтропии Шеннона к анализу твердого, жидкого и газообразного состояний вещества (на примере металлов): автореф. дис. ... д-ра техн. наук. — Караганда: ХМИ, 2008. — 32 с.
4. Свойства элементов: Справ. изд.: В 2 кн. — Кн. 1 / Под ред. М.Е.Дрица. — 3-е изд., перераб. и доп. — М.: Изд. дом «Руда и металлы», 2003. — 448 с.

А.Ш.Қажикенова, Ж.Б.Шалабаев, Д.Б.Алибиев

Вязкость жидкого галлия с учетом ассоциации кластеров

В статье рассмотрена температурная зависимость вязкости жидкого галлия согласно концепции хаотизированных частиц. Проанализированы модели зависимости вязкости от температуры с учетом различного содержания частиц: кристаллоподвижных, жидкоподвижных и пароподвижных. Предложена

новая кластерная модель температурной зависимости вязкости, позволяющая выявить поведение вязкости в широком диапазоне температур. Показана применимость данной модели на примере расплава галлия.

A.Sh.Kazhikenova, Zh.B.Shalabaev, D.B.Alibiyev

Viscosity of liquid gallium taking into account association of clusters

In this work temperature dependence of viscosity according to the concept of the randomized particles is considered. Models of viscosity dependence on temperature taking into account various maintenance of particles are analysed: crystal-moving, fluid and steam-moving particles. The new cluster model of viscosity temperature dependence allowing to reveal behavior of viscosity in the wide range of temperatures is offered. Applicability of this model on the example of gallium fusion is shown.

References

- 1 Malyshev V.P., Turdukozhaeva A.M., Kazhikenova A.Sh. *Heavy engineering*, 2009, 6, p. 37–39.
- 2 Malyshev V.P., Nurmaganbetova A.M. *Abstracts of XV Int. Conf on Chem. Thermodynamics in Russia*, Moscow, 2005, p. 197.
- 3 Turdukozhaeva A.M. *Application of the Boltzmann distribution and information Shannon entropy to the analysis of solid, liquid and gaseous states of matter (for example metals)*, Synopsis of Dis. ... Dr. of techn. sciences, Karaganda: ChMI, 2008, 32 p.
- 4 *Elements properties: Directory*, In 2 books, Book 1, Ed. by M.E.Drits, 3rd ed., Moscow: «Ruda i metally» Publ. house, 2003, 448 p.