

УДК 669:536.2+536.6+537.31

Венець Ю.С.

ФУНКЦІОНАЛЬНИЙ ОПИС ТЕПЛОЄМНОСТІ, ТЕПЛО- І ЕЛЕКТРОПРОВІДНОСТІ ТВЕРДОГО ЗАЛІЗА.

Табличні дані теплоємності, тепло- і електропровідності твердого заліза пропонується описувати функціональними залежностями в широкому температурному інтервалі існування твердих фаз.

Наведені залежності властивостей заліза корелюють з термодинамічної функцією електронної структури, єдиної для α -, β -, γ - і δ -алотропних модифікацій.

Теплоємність, тепло- і електропровідність, термодинаміка, залізо

To simplify the operation of automated process control systems, it is proposed to describe the table data of heat capacity, thermal conductivity and electrical conductivity of solid iron by functional relationships in a wide temperature range of existence of solid phases.

The given dependences of the properties of iron correlate with the thermodynamic function of the electronic structure common to α -, β -, γ - and δ -allotropic modifications. In the simulation of two- and multicomponent systems, the description of the parameters of the electronic structure of single metals can be represented as a weighted average of the thermodynamic functions of the entire steel.

The description of the tabular data of the properties of iron from 20 °C to 900 °C with extrapolation to melting temperatures gives the value of the theoretical molar heat capacity of the system of non-interacting particles at constant pressure in the value of $9R / 2$. The ratio of thermal conductivity to electrical conductivity is confirmed by the Wiedemann-Franz law.

Теплоємність, тепло- і електропровідність, термодинаміка, залізо

У сталеплавильній галузі потреба в технологічних розкислювачах розплавів частково задовольняється значними обсягами виробництва марганцевих феросплавів в надпотужних дугових печах (SAF) із зануреною дугою шляхом карботермічного відновлення оксидної марганцевої сировини з регулюванням автоматичними системами управління технологічним процесом (АСУ ТП). При цьому робоча температурна область у ванні оксидно-металевого розплаву основних феросплавів марганцю (феромарганцю і силікомарганцю) становить від 1400 до 1650 °C і в цих межах теплотехнічні властивості ванни піддаються апроксимації [1].

При цьому в окремому випадку заліза (у вигляді різних сталей) теплоємність, тепло- і електропровідність в твердому стані в залежності від температури часто є табличними величинами [2], що досить громіздко для розробки АСУ ТП в металургії. Тобто для такого вживання інформації про властивості металів від кімнатних температур до плавлення може представляти практичний інтерес їх короткий запис в залежності від середньозваженої суми термодинамічних функцій елементів при моделюванні дво- і багатокомпонентних систем.

Наведені далі температурні залежності властивостей заліза корелюють з термодинамічної функцією електронної структури, загальної для α -, β -, γ - і δ -алотропних модифікацій і апробованої в описі розчинності в них азоту і водню [3].

Опис теплоємності заліза.

Теплоємність заліза пропонується описувати за термодинамічним параметром електронної конфігурації $a(t)$ [3]:

$$\ln[a_{Fe}(T)] = \frac{-1909}{T} + 2,528 \quad (1)$$

Молярні теплоємності, електронна C_{el} і неелектронна C_2 , описані наступними залежностями [4]:

$$C_{el} = \frac{dG(T)}{dT} = \frac{d\{R \cdot T \cdot \ln[a_{Fe}(T)]\}}{dT} = R \cdot 2,528 = 21,02 \text{ Дж/моль} \cdot ^\circ\text{C} = 376 \text{ Дж/кг} \cdot ^\circ\text{C} \quad (2)$$

$$C_2 = C_{el} \cdot \frac{2}{7} \cdot e^{a_{Fe}(T)}, t < 768^\circ\text{C} \quad (3)$$

$$C_2 = C_{el} \cdot \frac{2}{7} \cdot \frac{\int_{17^\circ\text{C}}^{768^\circ\text{C}} e^{a_{Fe}(T)} dt}{768 - 17}, t > 768^\circ\text{C} \quad (4)$$

Тобто виходячи зі структури неелектронній теплоємності C_2 при рівності $a_{Fe}(T)$ нулю множник $e^{a_{Fe}(T)}$ дорівнює одиниці і з C_2 можливо виділити постійну частину $C_2^i = C_{el} \cdot \frac{2}{7}$.

Сумарна теплоємність заліза (мал.1) дорівнює:

$$C_{Fe}(t) = C_{el} + C_2 \quad (5)$$

При температурі плавлення заліза теплоємність за цими розрахунками дорівнює 670 Дж/кг·°C або 37,4 Дж/ моль·°C, що в свою чергу дорівнює $9R/2$ (Δ - 0,01%) як теоретичної теплоємності для системи частинок, що не взаємодіють, при постійному тиску [5]. Середня теплоємність заліза представлена на мал.2. Тут і далі табличні дані теплоємності, тепло- і електропровідності заліза взяті на основі стали 08КП, хімічний склад якої на 99% являє залізо [2].

* Венець Юрій Сергійович - Інженер «ВО «ОСКАР»

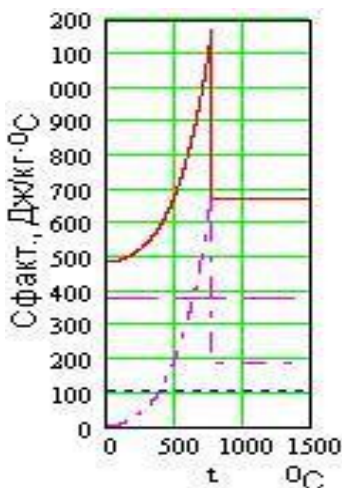


Рисунок.1 Теплоємність заліза:
«—» - загальна; «- - -» - електронна; «- · -» - постійна частина неелектронної; «· · ·» - неелектронна без постійної частини.

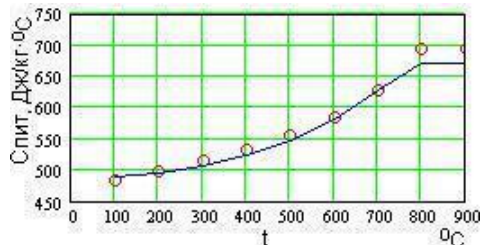


Рисунок.2 Питома теплоємність заліза для інтервалу температур від 20°C.
Крапки - табличні значення сталі 08КП[2], лінія - розрахунок середньої теплоємності заліза за (5) від 20°C до фактичної.

Опис коефіцієнта теплопровідності заліза.
Теплопровідність сталі 08КП при температурах від 100 до 900°C [2] описується на підставі параметра заліза $a(t)$ за (1) (мал.3 і 4):

$$\lambda = \lambda_0 \cdot \left(\pi \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} - 2 \right)^{a(t)} \tag{6}$$

де

$$\lambda_0 = \frac{C_{el} \cdot m_{el} \cdot 28 \cdot c}{\pi \cdot R_{Fe}^2} = \frac{376 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \cdot 28 \cdot 2,998 \cdot 10^8}{3,14159 \cdot (1,241 \cdot 10^{-10})^2} = 59,5 \frac{Вт}{м \cdot ^\circ C}$$

де C_{el} - електронна теплоємність за (2);
 m_{el} - маса електрона, кг;
28 - число електронів в залізі;
 c - швидкість світла у вакуумі, м/с;
 R_{Fe} - радіус заліза, м.

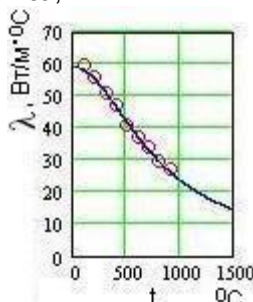


Рисунок.3. Питома теплопровідність заліза.
Крапки - табличні дані сталі 08КП[2], лінія - розрахунок за (6).

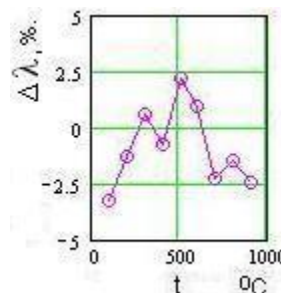


Рисунок.4. Помилки розрахунку теплопровідності за (6).

Опис питомого опору заліза.
Відомо, що опір дорівнює:

$$R = \frac{U}{I} = \frac{U \cdot t}{q} \tag{7}$$

$$R = \rho \cdot \frac{l}{S} \tag{8}$$

Тоді з виразів (7) та (8) питомий опір заліза при 20°C на прикладі одного атома дорівнює:

$$\rho_0 = \frac{U \cdot t \cdot S}{q \cdot l} = \frac{U \cdot \left(\frac{\pi \cdot R_{Fe} \cdot \sqrt{3}}{c} \right) \cdot (\pi \cdot R_{Fe}^2)}{e_{эл} \cdot (2 \cdot R_{Fe})} = \frac{U \cdot \pi^2 \cdot R_{Fe}^2 \cdot \sqrt{3}}{e_{эл} \cdot c \cdot 2} = 1,531 \cdot 10^{-7} \tag{9}$$

де час t проходження електронем одного атома дорівнює:

$$t = \frac{\pi \cdot R_{Fe} \cdot \sqrt{3}}{c} \tag{10}$$

Тут час t виражено як шлях електрона при проходженні одного атома заліза зі швидкістю світла. При цьому в об'ємно-кристалічній (ОЦК) решітці атоми контактують не по ребру в ОЦК-чарунці, а по об'ємній діагоналі, тому введений

множник $\sqrt{3}$. А так як електрони проходять ОЦК-чарунку не по прямій між ядрами атомів, а по траєкторії півкола зовнішньої орбіталі, то введений множник π .

Величина напруги U у виразі (9) прийнята рівною в 55,85 В, яка дорівнюється за таблицею Менделєєва середньому числу протонів і нейтронів в атомах заліза. Слід зазначити, що подібна паралель числа протонів і нейтронів була виявлена при спостереженнях оптимальних режимів роботи в рудовідновлювальних процесах. Сплави ФМн78 і СМн17 виплавлялися в дугових печах з різними геометричними та теплотехнічними характеристиками, різними схемами електроживлення ванн (трикутник або зірка), але з єдиною електричною характеристикою процесу, що спостерігалась.

Питомий електроопір стали 08КП при температурах від 100 до 900°C[2] описується на базі питомого електроопору при 20°C ρ_0 з виразу (9) і параметра заліза $a(t)$ за (1) (мал.5 і 6):

$$\rho = \rho_0 \cdot \left(1 + \pi \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot a(t) \right), \quad (11)$$

де $\frac{\sqrt{3}}{2}$ - перенормування розмірів в ОЦК-чарунку з ребра куба на половину об'ємної діагоналі;

π - перенормування з радіусу кола на довжину півкола.

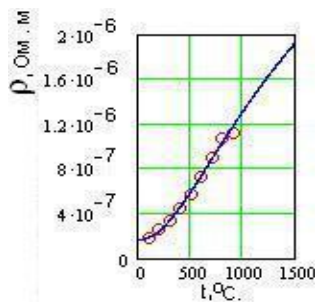


Рисунок.5. Питомий опір заліза. Крапки - табличні дані стали 08КП[2], лінія - розрахунок за (11).

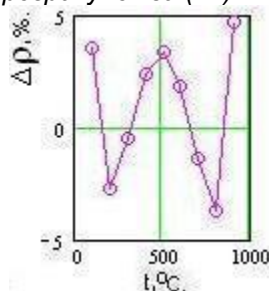


Рисунок.6. Помилка розрахунку електроопору за (11).

Закон Відемана-Франца-Лоренца.

Співвідношення коефіцієнта теплопровідності заліза λ і його питомої електропровідності σ (зворотній величині питомого опору ρ) постулюється законом Відемана-Франца-Лоренца в залежності від абсолютної температури T [5] на мал.7:

$$\frac{\lambda}{\sigma} = \lambda \cdot \rho = L \cdot T, \quad (12)$$

де L - число Лоренца [5], розраховане на основі постійної Больцмана k і заряду електрона e :

$$L = \frac{\pi^2}{3} \cdot \left(\frac{k}{e} \right)^2 = 2,44 \cdot 10^{-8}, \text{ Дж/К} \cdot \text{Кл} \quad (13)$$

Слід звернути увагу, що табличні коефіцієнти теплопровідності і питомого електроопору були взяті за основу при температурах від 100 до 900°C, тоді як розрахункові екстраполяції залежностей цих властивостей за (6) і (11) наведені до 1500°C.

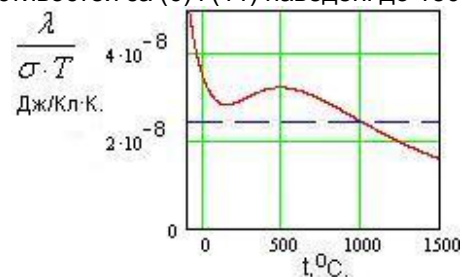


Рисунок.7. Співвідношення коефіцієнта теплопровідності до питомої електропровідності по відношенню до абсолютної температури.

«— —» - число Лоренца L за (13); «—» -

$$\frac{\lambda}{\sigma \cdot T} = \frac{\lambda \cdot \rho}{T} \text{ за (12), (6) і (11).}$$

Висновки:

- запропонований опис теплоємності заліза від 20°C до 900°C при екстраполяції до температур плавлення дає значення теоретичної теплоємності системи частинок, що не взаємодіють, при постійному тиску в значенні $9R/2$;

- запропоновані описи тепло- і електропровідності заліза від 20°C до 1500°C підтверджуються законом Відемана-Франца-Лоренца;

- функціональні залежності наведених властивостей заліза на основі зв'язку з термодинамічним описом електронної конфігурації металу можуть спростити розробку і експлуатацію АСУ ТП в металургії в широкому інтервалі існування твердих фаз.

Бібліографічний список:

1. Мянoвская Я В., Пройдак Ю.С. Оценка степени завершенности тепло- и массообменных процессов при движении фаз в процессах формирования марганцевых сплавов // Теория и практика металлургии. - 2017. - №№1-2. – С.5-9.
2. Марочник сталей и сплавов. 2-е изд. доп. и испр./ А.С. Зубченко, М.М. Колесников, Ю.В. Каширский и др. Под общей ред. А.С. Зубченко - М.: Машиностроение, 2003. – 784с.
3. Yu. Venets Classic description of the Nitrogen and Hydrogen solubility in solid iron // High Nitrogen Steels HNS'2009 : int. conf., 6-8.07.2009, Moscow : proc. of conf. – М. : MISIS. – 2009. // High Nitrogen Steels HNS'2009 : int. conf., 6-8.07.2009, Moscow : proc. of conf. – М. : MISIS. – 2009. – P. 51-56.
4. Венец Ю.С. Формирование структурной устойчивости котельных сталей и металлов // «Актуальные проблемы прочности» : 53-я междунар. научн. конф., Витебск, Беларусь. : Сб. материалов, Ч.2. – Витебск: УО «ВГТУ». - 2012. – С. 126-128.
5. Яворский Б.М., Детлаф А.А. Справочник по физике. – М.: Наука. – 1980. – 512с.

Стаття поступила: 18.09.18