

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ РАСЧЕТА ПРОЦЕССА ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ВЕЩЕСТВО

О.Т. Данилова, Ф.В. Коржов

In given work are presented main positions to make models of the influence elektromagnetic field on structured change material. Model allows to get information on nature thermodynamic and elektromagnetic parameter in system, value the direct energy influence on material of the complex composition for the reason speedups of the reactions reconstruction useful components.

Введение

Проблема использования непосредственного энергетического воздействия на вещество сложного состава с целью интенсификации реакций и достижения высокой степени восстановления полезной компоненты находится на стыке нескольких наук: математики, физики, химии. Электромагнитные поля влияют на кинетику химических реакций и термодинамику фазовых превращений, в сильных электрических полях меняется скорость, выход и даже направление химических реакций. В данной работе представлена структура модели влияния электромагнитного поля на вещество [3].

Структура модели

На основании обзора теории и методов высокочастотного воздействия, термодинамики и химических свойств оксидов разработана модель расчета, позволяющая получить информацию о характере электромагнитных и термодинамических и иных параметров в системе. Модель состоит из трех основных блоков: информационно-логического (I), теплового (II) и электрического (III). В информационно-логическом блоке осуществляется ввод/вывод информации; задаются максимально и минимально допустимые частоты; токи; напряженность поля E – не приводящая к пробое; осуществляется взаимодействие модулей программы, определяемой конкретной структурой вещества, а также изменением его свойств в электромагнитном поле и режима работы технологической

© 2003 О.Т. Данилова, Ф.В. Коржов

E-mail: kfv@netti.ru, danilova@univer.omsk.su

Омский государственный университет

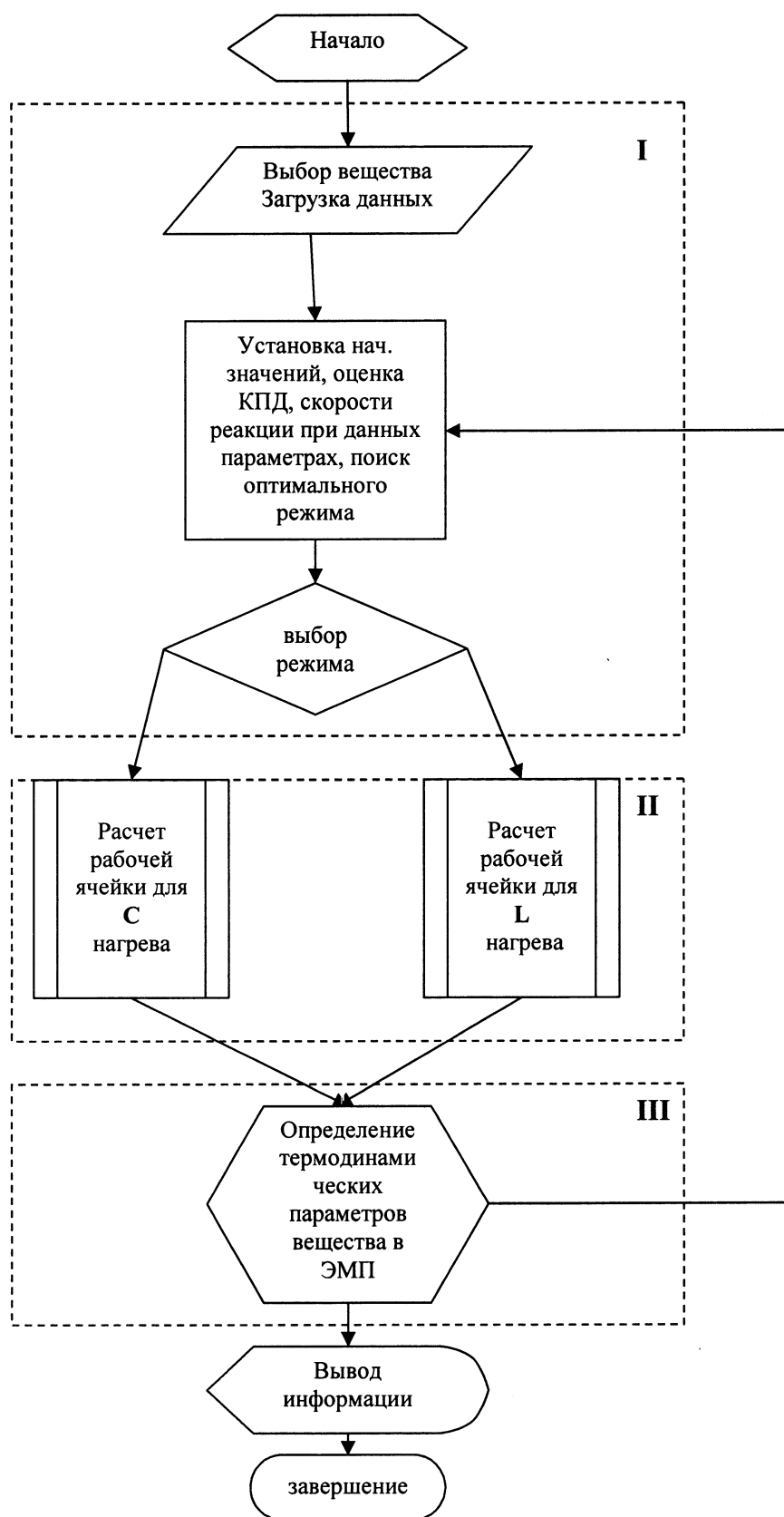


Рис. 1. Блок-схема модели.

установки; здесь же производится выбор наиболее оптимального решения поставленной задачи; позволяет определить необходимую частоту, мощность для достижения максимального КПД установки. Принято во внимание следующее: в отличие от индукционного нагрева металлов при диэлектрическом нагреве диэлектриков поверхностный эффект является вредным, так как приводит к неравномерному распределению температуры, которая не может выровняться из-за низкой теплопроводности диэлектриков; во избежание заметных проявлений поверхностного эффекта подбирается такая частота поля, чтобы глубина проникновения в 3-4 раза превосходила размеры нагреваемого тела.

Так как нагреваемое тело имеет конечные размеры, то из-за отражения электромагнитных волн от границ тела внутри него устанавливаются стоячие волны подобно тому, что происходит в электрических цепях с распределенными параметрами. Это явление в сочетании с поверхностным эффектом может приводить к весьма сложной картине распределения поля по объему тела. У большинства диэлектриков относительная магнитная проницаемость $\mu = 1$. При этих ограничениях условие выбора частоты имеет вид [1]:

$$f_0 = \frac{1,5 \cdot 10^7}{a\sqrt{\varepsilon}}.$$

В состав теплового блока (II) входят модули расчета рабочей ячейки для индукционного и диэлектрического нагрева, причем, какой именно метод будет задействован, выбирает информационно-логический блок на основании прогноза поведения свойств вещества при нагреве. При диэлектрическом нагреве для обеспечения равномерного распределения тепла с различием плотности, равным 2 %, необходимо, чтобы E изменялось не более чем на 1 %, должно выполняться условие:

$$\frac{\pi r}{\lambda} < 0,1.$$

Если длина волны в материале больше двадцатикратного его наибольшего размера, то волновые процессы можно не учитывать и расчет параметров можно вести так же как и при малых частотах. Глубина проникновения при индукционном нагреве, на которой поглощается 84% энергии [6]:

$$\Delta = 503 \sqrt{\frac{\rho}{\mu f}}.$$

В электрическом блоке производится анализ изменений вещества в электромагнитном поле при заданных параметрах. В электромагнитном поле с напряженностью E происходит деформация равновесной геометрической структуры молекулы: изменяются её межатомные расстояния, углы между связями, симметрия молекулы и в конечном счете – силовое поле молекулы. В молекуле возникает индуцированный дипольный момент. Поляризуемость складывается из электронной и атомной:

$$\alpha = \alpha_e + \alpha_a.$$

Внутренняя составляющая энтропии [1]:

$$S = S_B + S_K + S_E,$$

где индексы B, K, E относятся к вращательной, колебательной и электрической [1].

Энтропия вещества в интервале температур от 0 до T определяется известным соотношением:

$$S = \int \frac{c_p}{T} dT.$$

Если в этом интервале температур имеются переходы от одной кристаллической модификации в другую, то необходимо учитывать возрастание энтропии при этом переходе

$$\Delta S = \frac{\lambda_{\alpha \rightarrow \beta}}{T_{\alpha \rightarrow \beta}}$$

или

$$\Delta S = \frac{\Delta H}{T},$$

где $\lambda_{\alpha \rightarrow \beta}$ – тепловой эффект процесса.

Следовательно,

$$S = \int \frac{c_p}{T} dT + \frac{\lambda_{\alpha \rightarrow \beta}}{T_{\alpha \rightarrow \beta}} + \int \frac{c_p}{T} dT.$$

Энтропия вещества, помещенного в ЭМП:

$$S = - \left(\frac{\partial(F)}{\partial(T)} \right) = S_0 - \frac{1}{8\pi} \left(E^2 \frac{\partial(\varepsilon)}{\partial(T)} + H^2 \frac{\partial(\mu)}{\partial(T)} \right),$$

внутренняя энергия

$$U = F + TS = F_0 + TS_0 + \frac{E^2}{8\pi} \left(\varepsilon - T \frac{\partial(\varepsilon)}{\partial(T)} \right) + \frac{H^2}{8\pi} \left(\mu - T \frac{\partial(\mu)}{\partial(T)} \right),$$

расчет энтропии, энтальпии и внутренней энергии ведется через теплоемкость вещества, которую для большинства твердых веществ и газов можно найти из соотношения [4]

$$C_p = a + bT + cT^{-2}.$$

Удельная скорость химической реакции в общем случае записывается известным уравнением

$$k = AT^n \exp \left(-\frac{\varepsilon_a}{R_0 T} \right).$$

Величины A и ε_a зависят от конфигурации активированного комплекса – промежуточного состояния между исходным и конечным веществом. Даже в том случае, когда химически реагирующая система не подвергается действию внешнего поля, расположение атомов и длина связей в молекулах при переходе их в активированный комплекс сильно меняются. При этом происходит более или менее сильное изменение вращательного и колебательного состояний

исходных молекул. Значения предэкспоненциального множителя меняются в сравнительно узком интервале – пределах одного-двух порядков. Изменение энергии активации оказывается значительно большим, поэтому скорость реакции во внешнем силовом поле может значительно измениться. Из элементарного анализа взаимодействия в электрическом поле двух плоских дипольных молекул выведенное соотношение для изменения энергии активации химического взаимодействия имеет вид [1]:

$$\Delta\varepsilon_a = 0,009\alpha E^2,$$

где $\Delta\varepsilon_a$ – изменение энергии активации под действием поля, которое действует подобно катализатору.

В ионной решетке, свойственной большинству солей и типичной для большинства неорганических соединений, силы взаимодействия между ее элементами являются в основном электростатическими. Строение решетки определяется в первую очередь типом соединения: числом зарядов и расстоянием их друг от друга, а также соотношением между радиусами ионов, составляющих решетку. Химическая природа ионов менее сказывается на строении решетки, нежели геометрические факторы.

При формировании решетки ионы стремятся образовать наиболее устойчивую ее конфигурацию, соответствующую минимуму ее свободной энергии. Теоретическая прочность кристаллических твердых тел и их прочность зависит от величины сил взаимодействия между ионами, атомами или молекулами, образующими решетку кристалла. Энергия решетки зависит от количества структурных единиц кристалла, их размера и валентности и для ионной решетки может быть приближенно вычислена по Капустинскому [2]:

$$U = 287,2 \frac{Z_1 Z_2 \sum n}{r_1 + r_2} \left(1 - \frac{\rho}{r_1 + r_2} \right),$$

где $\sum n$ – число ионов, составляющих молекулу; r_1 – радиусы при координатном числе; $Z_1 Z_2$ – валентности ионов; $\rho=0,345$ – репульсивный коэффициент.

Энергия решетки в значительной мере и определяет твердость тела. Чем больше силы связи между структурными элементами, тем труднее тело разрушить.

В связи с тем что реакции в твердых смесях осуществляются обычно под атмосферным давлением (или близким к нему), изменением температуры плавления компонентов смеси от давления в подавляющих случаях можно пренебречь.

Химический состав фаз, возникающий в процессе превращения кристаллических веществ, может отличаться от состава исходных фаз или совпадать с ним. Различают два типа превращения твердых веществ:

- 1) протекающий без изменения химического состава фаз;
- 2) сопровождающийся появлением фаз с измененным химическим составом.

К процессам первого типа относятся полиморфные превращения и явления упорядочивания и разупорядочивания твердых растворов. Среди процессов, протекающих без изменения химического состава исходных фаз, по Эренфейсту [4] следует различать два рода фазовых переходов. При переходах первого

рода изменение кристаллической структуры тела и первых производных его термодинамического потенциала по температуре и давлению, то есть энтропии и объема, а следовательно, и внутренней энергии, происходит при определенной температуре резким скачком и сопровождается заметным тепловым эффектом. При этом изменение термодинамического потенциала остается непрерывным. При неизменном давлении каждая модификация вещества устойчива в определенном интервале температур на границе (называемой обычно точкой превращения) происходит переход вещества в другую модификацию. При фазовых превращениях второго рода термодинамический потенциал и его первые производные – энтропия и объем – меняются непрерывно, а вторые производные по температуре и давлению – скачкообразно. В силу непрерывности изменения энтропии в процессе перехода тепло не выделяется. В результате скачкообразного изменения вторых производных термодинамического потенциала по давлению и температуре скачком же меняются выражаемые этими производными термодинамические величины, такие как теплоемкость, коэффициенты теплового расширения и коэффициент сжимаемости (они могут меняться скачкообразно и при переходах первого рода). При превращениях второго рода решетка во время нагревания переходит из одной модификации в другую путем ряда незначительных скачкообразных изменений, протекающих на протяжении некоторого интервала температур. Таким образом, хотя прерывность процесса в этом случае в принципе сохраняется, тело переходит в новое состояние постепенно, так что при температурах, близких к точке перехода, новая модификация ничтожно мало отличается от старой. В точке перехода состояния обеих фаз совпадают, или, иначе, все вещество находится в одном состоянии. В этом отношении фазовые переходы второго рода являются практически непрерывными.

Учитывая вышеприведенное, можно сделать вывод об использовании представленной модели для организации расчетного алгоритма, позволяющего получить информацию о термодинамических и электрических параметрах системы при энергетическом воздействии на вещество сложного состава.

ЛИТЕРАТУРА

1. Туманов Ю.Н. *Низкотемпературная плазма и высокочастотные электромагнитные поля в процессах получения материалов для ядерной энергетики*. М.: Энергоатомиздат, 1989.
2. Ормонт Б.Ф. *Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников*. М.: Высшая школа, 1982.
3. Нетушил А.В. *Высокочастотный нагрев диэлектриков и полупроводников*. М.: Госэнергоиздат, 1959.
4. Куликов И.С. *Термодинамика оксидов*. М.: Металлургия, 1983.
5. Троицкий В.Н., Рахматуллина А.З., Берестенко В.И., Гуров С.В. *Температура начала спекания ультрадисперсных порошков* // Порошковая металлургия. 1983. №1. С 13-15.
6. Глуханов Н.П. *Физические основы высокочастотного нагрева*. Л.: Машиностроение, 1989.