

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ПРИКЛАДНИХ ПРОБЛЕМ МЕХАНІКИ І МАТЕМАТИКИ
ім. Я.С.ПІДСТРИГАЧА

На правах рукопису

Г Р И Ц И Н А
Ольга Романівна

УДК 539.3

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ МЕХАНОДИФУЗИЙНИХ
ПРОЦЕСІВ У ТВЕРДИХ РОЗЧИНАХ ІЗ ВРАХУВАННЯМ ЕФЕКТІВ
ЛОКАЛЬНОЇ ГРАДІЄНТНОСТІ

Спеціальність - 01.02.04 механіка деформівного
твердого тіла

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Львів - 1995

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ПРИКЛАДНИХ ПРОБЛЕМ МЕХАНІКИ І МАТЕМАТИКИ

ім. Я.С.ПІДСТРИГАЧА

На правах рукопису

Г Р И Ц И Н А

Ольга Романівна

УДК 539.3

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ МЕХАНОДИФУЗИЙНИХ
ПРОЦЕСІВ У ТВЕРДИХ РОЗЧИНАХ ІЗ ВРАХУВАННЯМ ЕФЕКТИВ
ЛОКАЛЬНОЇ ГРАДІЄНТНОСТІ

Спеціальність - 01.02.04 механіка деформованого
твердого тіла

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Львів - 1996

4.1)
Робота виконана в Інституті
1 математики ім.Я.С.Підстригача

ЛННБ України ім.В.Стефаника



00761185 (S)

Наукові керівники

професор БУРАК Я.Я.
- кандидат фіз.-мат.наук,
старший науковий співробітник
Нагірний Т.С.

Офіційні опоненти

- доктор фіз.-мат.наук,
професор ШАБЛИЙ О.М.
- кандидат фіз.-мат.наук,
старший науковий співробітник
ПАВЛИНА В.С.

Провідна установа

- Інститут механіки
ім.С.П.Тимошенка НАН України.

Захист дисертації відбудеться " " 1995 р.
о 15-00 години на засіданні спеціалізованої вченої ради
Д.04.17.01 в Інституті прикладних проблем механіки і мате-
матики ім.Я.С.Підстригача НАН України (м.Львів, вул.Наукова,
3-б).

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту
прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача
НАН України (м.Львів, вул.Наукова, 3-б).

Відгук на автореферат просимо надсилати за адресов:
290601, МСП, м.Львів, вул. Наукова, 3-б, вченому секретарю
спеціалізованої ради.

Автореферат розіслано " " 1995 р.

1995 р.

ЛННБ ім.В.Стефаника
спеціалізованої ради

ШЕВЧУК П.Р.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. В останні десятиріччя в науковій літературі значна увага приділяється кількісному опису процесу деформування твердих тіл при їх взаємодії з зовнішнім середовищем із врахуванням приповерхневої та приконтактної градієнтності. Це зумовлено, насамперед, необхідністю створення нових та вдосконалення існуючих технологій зміцнювальної обробки елементів конструкцій та приладів, а також оптимізацією проектування та розрахунку робочих характеристик структур з тонкоплівковими прошарками, тонкоплівкових та тонковолокнистих систем. При дослідженні таких систем необхідно враховувати реальну структуру тіла, яке завжди містить у собі чужорідні домішки. Тому актуальною стає проблема математичного моделювання та дослідження деформування твердих тіл з врахуванням взаємозв'язку механотермодифузійних процесів і локальної градієнтності полів.

Методика побудови нових теоретичних моделей деформівних твердих тіл ґрунтується на основних положеннях нерівноважної термодинаміки, фізики твердого тіла та механіки суцільного середовища, достатньо повно систематизованих у монографіях С. де Гроота, П. Гленсдорфа, А.К. Ерінгена, О.А. Ільїшина, А.Д. Коваленка, П. Мазура, І. Пригожина, Я.С. Підстригача, Л.І.Сєдова, Р.Хаазе та ін.

Термодинамічний підхід до побудови моделей багатокомпонентних твердих тіл запропоновано Я.С.Підстригачем. Конкретні моделі деформівних твердих розчинів та дослідження взаємозв'язаних процесів у багатокомпонентних тілах містяться у роботах В.С.Горського, Б.Я.Любова, М.С.Фастова, О.М.Шаблія, Р.М.Швеця, Е.С.Аіфантіс, Н.Нендел, у тому числі із врахуванням приповерхневої градієнтності у роботах - Я.Я.Бурака, Б.П. Галапаца, Б.М. Гнідця, В.С. Павлини, Д.З. Повстенка, П.Р.Шевчука, Є.Я.Чаплі, В.М.Дзєвича та ін. У більшості із згаданих робіт приповерхнева неоднорідність враховується заміною приповерхневих областей тіла фізичною поверхнею, якій приписуються усереднені характеристики, що відображають властивості перехідної області. Для електропровідних тіл приповерхневі явища досліджуються на основі моделі механіки суцільного середовища, що враховує градієнтність поля елект-

ричного (електронного) потенціалу.

В роботах S.Kobayashi, K.Takahashi та ін. при моделюванні поведінки термополярних матеріалів фазовий простір параметрів стану доповнено температурним градієнтом.

Я.И.Бураком запропоновано, а в спільних розробках з Т.С.Нагірним розвинено, термодинамічний підхід до опису взаємозв'язаних процесів у локально-градієнтних термомеханічних системах. У роботах цих авторів показано, що врахування локальної градієнтності хімічного потенціалу дозволяє у тривимірній постановці описувати приповерхневу неоднорідність деформівних систем.

У літературі практично відсутні роботи з континуального опису термомеханічної поведінки однорідних та кусково-однорідних локально-градієнтних багатокомпонентних тіл.

Метою роботи є: побудова методами термодинаміки нерівноважних процесів та механіки суцільного середовища моделі N-компонентного деформівного твердого розчину із врахуванням локальної градієнтності температури і хімічних потенціалів його компонент та обміну масою між підсистемами розчину; постановка нових крайових задач механотермодифузії; побудова розрахункової схеми та дослідження на її основі законмірності механодифузії у тілах канонічної форми.

Наукова новизна роботи:

- побудовано модель N-компонентного деформівного твердого розчину із врахуванням локальної градієнтності температури і хімічних потенціалів його компонент та обміну масою між підсистемами розчину;

- узагальнено принцип локального рівноважного термодинамічного стану на локально-градієнтні термопружні багатокомпонентні системи;

- запропоновано варіаційний принцип лінеаризованої локально-градієнтної термомеханіки твердих розчинів;

- дано постановку задач механодифузії з врахуванням приповерхневої та приконтатної неоднорідності розглядуваних полів в об'ємному підході;

- виявлено деякі законмірності поведінки взаємозв'язаних механічних і дифузійних процесів в одно- та багат шарових тілах простої геометричної конфігурації.

Вірогідність основних наукових результатів дисертації ґрунтується на прийнятті в основу апробованих положень та співвідношень термодинаміки нерівноважних процесів і механіки суцільного середовища, строгістю проведених математичних викладок та використанням обґрунтованих методів розв'язування, узгодженням часткових результатів з відомими у літературі.

Практична цінність роботи. Отримана у роботі система рівнянь дає змогу проводити кількісні дослідження взаємозв'язаних механотермо-дифузійних процесів у деформівних твердих тілах (у тому числі у тонких плівках і волокнах, тілах з тонкоплівковими прошарками і т.п.) із врахуванням за об'ємного підходу приповерхневої та приконтактної неоднорідності. Отримані результати можуть бути теоретичною основою для раціонального вибору характеристик захисних покриттів, забезпечення параметрів їх надійності та міцності.

Робота проведена у відповідності з програмою наукових досліджень відділу теорії фізико-механічних полів Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України по темі "Термодинамічний опис, дослідження та оптимізація фізико-механічних полів у деформівних локально-неоднорідних системах з врахуванням нелінійних ефектів та самоорганізаційних явищ" та проектом 5.44.07/002 "Дослідження нерівноважних процесів тепломасопереносу в тонкоплівкових структурах та малих частинках", що виконувався в рамках Державної науково-технічної програми ДНТ України.

Апробація роботи. Основні результати роботи доповідались на 11 Краснодарській крайовій конференції "Прикладні питання нерівноважної термодинаміки і тепло-та масообміну" (1990р.), Всесоюзному науковому семінарі "Актуальні проблеми неоднорідної механіки" (Єреван, 1991 р.), VII Всесоюзному з'їзді з теоретичної та прикладної механіки (Москва, 1991 р.), III Всесоюзній конференції "Механіка неоднорідних структур" (Львів, 1991 р.), II Всесоюзній нараді-семінарі "Інженерно-фізичні проблеми нової техніки" (Москва, 1992 р.), I Міжнародному симпозиумі "Фізико-хімічна механіка композиційних матеріалів" (Івано-Франківськ, 1993 р.). У цілому робота обговорювалась на спеціалізованому кваліфікаційному семінарі

з механіки деформівного твердого тіла в Інституті прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України та на семінарах відділу теорії фізико-механічних полів цього інституту.

Публікації. За матеріалами дисертаційної роботи опубліковано 12 наукових праць.

Структура та об'єм роботи. Дисертаційна робота складається із вступу, чотирьох розділів, висновків, списку літератури (184 назв). Матеріали викладено на 120 сторінках машинописного тексту та ілюструються 46 рисунками.

КОРОТКИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовано актуальність і важливість питань, які розглядаються в дисертації, дано огляд близьких за напрямком досліджень робіт, сформульовано мету досліджень і їх новизну, коротко викладено зміст роботи.

У першому розділі методами термодинаміки нерівноважних процесів та механіки суцільного середовища побудовано модель N-компонентного деформівного твердого розчину із врахуванням локальної градієнтності температури та хімічних потенціалів компонент розчину. Дано постановку відповідних крайових задач механіки для однорідних та кусково-однорідних тіл.

З цією метою розглянуто N-компонентний твердий розчин, що складається з каркасу (підсистема 1) та домішок (підсистема 2,N). Підсистема домішок та каркасу є відкритими одні для одних, тобто можуть обмінюватися масою. За визначальні прийнято процеси деформування, теплопровідності та масопереносу. Вихідними при формулюванні рівнянь моделі є зображення векторів потоку ентропії та мас компонент розчину \dot{J}_s^{o*} , \dot{J}_{mk}^{o*} сумов двох складових

$$\dot{J}_s^{o*} = - \frac{\partial \dot{H}_s^o}{\partial \tau} + \dot{J}_s^o, \quad \dot{J}_{mk}^{o*} = - \frac{\partial \dot{H}_{mk}^o}{\partial \tau} + \dot{J}_{mk}^o, \quad (k = \overline{1, N}), \quad (1)$$

а також рівняння балансу загальної енергії $E_o = U_o + K_o$, імпульсу механічного поступального руху \dot{K}_o , ентропії S_o та мас

компонент розчину

$$\frac{\partial E_o}{\partial \tau} = \hat{\psi}_o \cdot \left[\hat{\sigma}_o \cdot \hat{\psi} - \sum_{k=1}^N H_k \left(\hat{J}_{mk}^o - \frac{\partial \hat{\Pi}_{mk}^o}{\partial \tau} \right) - T \left(\hat{J}_S^o - \frac{\partial \hat{\Pi}_S^o}{\partial \tau} \right) \right]. \quad (2)$$

$$\frac{\partial \hat{k}_o}{\partial \tau} = \hat{\psi}_o \cdot \hat{\sigma}_o. \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(S_o - \hat{\psi}_o \cdot \hat{\Pi}_S^o \right) = - \hat{\psi}_o \cdot \hat{J}_S^o + \sigma_S^o, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\rho_{ok} - \hat{\psi}_o \cdot \hat{\Pi}_{mk}^o \right) = - \hat{\psi}_o \cdot \hat{J}_{mk}^o + \sigma_{mk}^o, \quad (k = \overline{1, N}). \quad (5)$$

Тут $\hat{\Pi}_S^o, \hat{\Pi}_{mk}^o$ - вектори пружних змінень ентропії та маси k -ої компоненти; $\hat{J}_S^o, \hat{J}_{mk}^o$ - необоротні складові потоків $\hat{J}_S^{o*}, \hat{J}_{mk}^{o*}$; $\hat{\sigma}_o$ - тензор напружень Піоли-Кірхгофа 1-го роду; $\hat{\psi}$ - вектор швидкості точок континуума центрів мас; σ_S^o - виробництво ентропії; $H_k, \rho_{ok}, \sigma_{mk}^o$ - хімічні потенціали, густини та джерела маси k -ої компоненти розчину ($\sigma_{m1}^o + \sigma_{m2}^o + \dots + \sigma_{mN}^o = 0$); T - температура; U_o, K_o - густина внутрішньої та кінетичної енергій; τ - час; $\hat{\psi}_o$ - оператор Гамільтона; символом "o" відзначено величини, віднесені до початкової геометричної конфігурації.

За умови потенціального опису ситуації у фізично малій підсистемі співвідношення (1)-(5) дозволили розширити принцип локального рівноважного термодинамічного стану на локально-градієнтні багатокомпонентні системи узагальненим рівнянням Гібса

$$d\hat{\alpha}_o = \left(\hat{\sigma}_o \cdot (\hat{V}_o^T)^{-1} \right) : d\hat{\varepsilon}_o - S_o dT - \sum_{k=1}^N \rho_{ok} dH_k - \hat{\Pi}_S^o \cdot d(\hat{\psi}_o T) - \sum_{k=1}^N \hat{\Pi}_{mk}^o \cdot d(\hat{\psi}_o H_k) \quad (6)$$

та виразом для виробництва ентропії σ_S^o

$$\sigma_S^o = - \hat{J}_S^o \cdot \frac{\hat{\psi}_o T}{T} - \sum_{k=1}^N \hat{J}_{mk}^o \cdot \frac{\hat{\psi}_o H_k}{T} - \sum_{k=2}^N \frac{H_k - H_1}{T} \sigma_{mk}^o. \quad (7)$$

Тут

$$\Omega_0 = U_0 - S_0 T - \sum_{k=1}^N \rho_{0k} H_k - \hat{P}_S^0 \cdot (\hat{\varphi}_0 T) - \sum_{k=1}^N \hat{P}_{mk}^0 \cdot (\hat{\varphi}_0 H_k), \quad (8)$$

$\hat{V}_0 = \hat{\varepsilon}_1 \hat{\varepsilon}_0^1; \hat{\varepsilon}_1, \hat{\varepsilon}_0^1$ - ко- та контраваріантні базисні вектори лагранжевої системи координат (ζ^i) ($i = 1, 3$) в актуальній та початковій геометричних конфігураціях відповідно; \hat{e}_0 - тензор деформації Коші-Гріна, для якого

$$\hat{e}_0 = \frac{1}{2} \left[\hat{V}_0^T \cdot \hat{V}_0 - \hat{I}_0 \right], \quad (9)$$

\hat{I}_0 - одиничний тензор; індекс "Т" означає транспонування.

Порівняно з відомими в літературі роботами, зображення (1) дозволило розширити простір базових параметрів стану за рахунок градієнтів хімічних потенціалів $\hat{\varphi}_0 H_k$ підсистем домішок ($k = 2, N$).

$$\Omega_0 = \Omega_0(T, (H_k), \hat{\varphi}_0 T, (\hat{\varphi}_0 H_k), \hat{e}_0). \quad (10)$$

Узагальнене рівняння Гібса (6) є вихідним при формулюванні рівнянь стану моделі. Якщо функція Ω_0 відома, як функція збурень базових параметрів відносно їх рівноважних значень ($t = T - T^*, \eta_k = H_k - H_k^*, \hat{\varphi}_0 t = \hat{\varphi}_0 T - \hat{\varphi}_0 T^*, \hat{\varphi}_0 \eta_k = \hat{\varphi}_0 H_k - \hat{\varphi}_0 H_k^*, \hat{e}_0 = \hat{e}_0 - 0$), то для визначення спряжених параметрів $S_0, \rho_{0k}, \hat{\sigma}_0, \hat{P}_S^0, \hat{P}_{mk}^0$ отримуємо

$$S_0 = - \frac{\partial \Omega_0}{\partial t}, \quad \rho_{0k} = - \frac{\partial \Omega_0}{\partial \eta_k}, \quad \hat{\sigma}_0 = \frac{\partial \Omega_0}{\partial \hat{e}_0} \cdot \hat{V}_0^T, \\ \hat{P}_S^0 = - \frac{\partial \Omega_0}{\partial (\hat{\varphi}_0 t)}, \quad \hat{P}_{mk}^0 = - \frac{\partial \Omega_0}{\partial (\hat{\varphi}_0 \eta_k)} \quad (k = 1, N). \quad (11)$$

При формулюванні кінетичних рівнянь вихідним є вираз для виробництва ентропії (7) та твердження про те, що причиною термодинамічних потоків є термодинамічні сили, тобто

$$\overset{\star}{J}_s^o = \overset{\star}{J}_s^o \left[-\frac{\overset{\star}{\varphi}_o t}{T}, \left\{ -\frac{\overset{\star}{\varphi}_o \eta_j}{T} \right\}, \left\{ -\frac{\eta_j - \eta_1}{T} \right\}; \Omega_o \right],$$

$$\overset{\star}{J}_{mk}^o = \overset{\star}{J}_{mk}^o \left[-\frac{\overset{\star}{\varphi}_o t}{T}, \left\{ -\frac{\overset{\star}{\varphi}_o \eta_j}{T} \right\}, \left\{ -\frac{\eta_j - \eta_1}{T} \right\}; \Omega_o \right], \quad (k, j = \overline{1, N}),$$

$$\sigma_{mk}^o = \sigma_{mk}^o \left[-\frac{\overset{\star}{\varphi}_o t}{T}, \left\{ -\frac{\overset{\star}{\varphi}_o \eta_j}{T} \right\}, \left\{ -\frac{\eta_j - \eta_1}{T} \right\}; \Omega_o \right]. \quad (12)$$

Параметрична залежність термодинамічних потоків $\overset{\star}{J}_s^o$, $\overset{\star}{J}_{mk}^o$, σ_{mk}^o від потенціалу Ω_o відображає той факт, що нерівноважні процеси розглядаються на основі відповідного локального стану. Тому співвідношення (12) підпорядковуються умові

$$J^o(0, 0, 0; \Omega_o) = 0, \quad (13)$$

де $J^o = \left\{ \overset{\star}{J}_s^o, \left(\overset{\star}{J}_{mk}^o \right), \sigma_{mk}^o \right\}$.

Записані у роботі балансові (3)-(5) та кінетичні рівняння (12), рівняння стану (11) разом із співвідношенням (9) для тензора деформації, виразом (7) для виробництва ентропії, формулою

$$\overset{\star}{k}_o = \rho_o \overset{\star}{\delta}, \quad \left(\rho_o = \sum_{k=1}^N \rho_{ok} \right) \quad (14)$$

для імпульсу механічного поступального руху складають повну систему рівнянь моделі локально-градієнтного термопружного твердого розчину із врахуванням обміну масою між його підсистемами. Ця система рівнянь є нелінійною за рахунок нелінійностей імпульсу механічного поступального руху, виробництва ентропії та визначальних співвідношень, а також геометричної нелінійності.

Сформульовано відповідні граничні, контактні та початкові умови.

Записано лінеаризовану систему рівнянь локально-градієнтної термомеханіки твердих розчинів у наближенні ідеального газу для підсистем домішок. Ключова система рівнянь приведена для випадку, коли за розв'язуючі функції приймається вектор переміщення $\overset{\star}{u}$, збурення температури t та хімічних

потенціалів η_k компонент твердого розчину. Вона має вигляд

$$\begin{aligned} \rho^* \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial \tau^2} &= \mu \Delta \hat{u} + (\lambda + \mu) \hat{\varphi}(\hat{\varphi} \cdot \hat{u}) - \left(\lambda + \frac{2}{3} \mu \right) \left[\alpha_t \hat{\varphi} t + \sum_{k=1}^N \alpha_m^k \hat{\varphi} \eta_k \right], \\ c_v \frac{\partial t}{\partial \tau} + (\lambda + \frac{2}{3} \mu) \alpha_t T^* \frac{\partial(\hat{\varphi} \cdot \hat{u})}{\partial \tau} + \sum_{k=1}^N \alpha_s^k \frac{\partial \eta_k}{\partial \tau} - \\ - T^* \sum_{k=1}^N \beta_{mt}^k \frac{\partial(\Delta \eta_k)}{\partial \tau} - \beta_s \frac{\partial(\Delta t)}{\partial \tau} &= \gamma_t \Delta t + \sum_{k=1}^N \gamma_{mt}^k \Delta \eta_k, \\ \alpha_{tm} t + \alpha_m \hat{\varphi} \cdot \hat{u} + \sum_{k=1}^N \alpha^k \eta_k - \beta_m^{11} \Delta \eta_1 - \beta_{mt}^1 \Delta t &= 0, \\ \alpha_s^k \frac{\partial t}{\partial \tau} + (\lambda + \frac{2}{3} \mu) \alpha_m^k T^* \frac{\partial(\hat{\varphi} \cdot \hat{u})}{\partial \tau} + \sum_{l=1}^N \alpha_s^{kl} \frac{\partial \eta_l}{\partial \tau} &= \gamma_{tm}^k \Delta t + \\ + \sum_{l=1}^N \gamma_m^{kl} \Delta \eta_l - \sum_{l=2}^N \gamma_{kl} (\eta_l - \eta_1) &\quad (k=2, N), \quad (15) \end{aligned}$$

де Δ - оператор Лапласа; ρ^* - густина у початковий момент часу; $\lambda, \mu, c_v, \alpha_t, \alpha_m^k, \alpha_s^k, \alpha_s^{kl}, \alpha_{tm}, \alpha_m, \alpha^1, \beta_s, \beta_{mt}, \beta_m^{11}, \gamma_t, \gamma_{kl}, \gamma_{mt}^k, \gamma_m^{kl}$ - характеристики матеріалу.

При нехтуванні впливом кульової складової \hat{e} тензора деформації $\hat{\epsilon}$ на температуру t та густини ρ_k компонент твердого розчину, знаходження розв'язку отриманої системи рівнянь зводиться до послідовного визначення температури t та хімічних потенціалів η_k ($k = \overline{1, N}$) компонент розчину із взаємозв'язаної системи рівнянь та вектора переміщення \hat{u} із рівняння руху.

В останньому параграфі розділу запропоновано варіаційне формулювання лінійних крайових задач моделі. Записано функціонал W типу згортки, означений в просторі параметрів $\hat{\sigma}, \hat{e}, (\rho_k), (\eta_k), S, t, (\sigma_{mp}), \hat{u}, (\hat{p}_{mk}), \hat{p}_s, \hat{J}_q = \hat{J}_s / T^*, (\hat{J}_k^m = T^* \hat{J}_{mk}^*)$ ($k = \overline{1, N}, p = \overline{2, N}$). З умови рівності нулю варіації

даного функціоналу

$$\delta W = 0, \quad (16)$$

отримуємо рівняння руху, балансу маси і ентропії, визначальні та кінетичні співвідношення, а також відповідні граничні умови.

У другому розділі зроблено постановку лінеаризованих задач механодифузії про визначення рівноважного стану двокомпонентного твердого розчину ($N = 2$). При цьому за ключові функції вибрано хімічні потенціали компонент розчину η_1 , η_2 , вектор переміщення \hat{u} або тензор напружень $\hat{\sigma}$. В останньому випадку записано відповідне моделі рівняння Бельтрамі-Мітчела.

Знайдено аналітичні розв'язки крайових задач про визначення рівноважного стану вільних від зовнішнього силового навантаження шару та суцільної кулі, на поверхнях яких підтримуються постійні значення хімічних потенціалів (густин) компонент розчину. На основі аналізу отриманих розв'язків показано, що побудована модель локально-градієнтного твердого розчину дозволяє описувати у тривимірній постановці приповерхневу неоднорідність у розподілі домішок. Вивчено закономірності рівноважного розподілу компонент розчину та напружень у розглядуваних тілах, зокрема, досліджено вплив кривини поверхні тіла на механічні напруження та хімічний потенціал (густину) домішок.

Показано, що:

- неоднорідність рівноважних механодифузійних полів у тонких плівках та малих частинках є суттєвою у всій області тіла;
- домішки у тілі розташовуються так, щоб "скомпенсувати" градієнтність хімічного потенціалу каркасу.

У третьому розділі дано постановку лінеаризованих задач рівноважної механодифузії для двокомпонентних тіл ($N=2$) кусково-однорідної структури. Знайдено аналітичні розв'язки задач для тіл з плоскими границями та двошарової суцільної кулі. Вивчено приконтактну неоднорідність твердих розчинів: закономірності рівноважного розподілу його компонент та тензора напружень у двошарових системах з плоскими та сферични-

ми границями і півпросторі, покритому одно- або двошаровою плівкою, на вільних поверхнях яких підтримуються фіксовані значення хімічних потенціалів компонент розчину. Проведено порівняння хімічних потенціалів (густин) домішок у тілах з покриттями та без них.

На основі порівняння розв'язків сформульованих задач для систем "одношарове покриття - півпростір" та "двошарове покриття-півпростір" (товщини покриття рівні, а характеристики матеріалів одношарового та зовнішнього шару двошарового покриття однакові) записано умови на характеристики внутрішнього шару двошарового покриття, при виконанні яких максимальні розтягуючі напруження у двошаровому покритті є меншими ніж в одношаровому.

У четвертому розділі розглянуто квазістатичні задачі механо дифузії двокомпонентних пружних півпростору та шару. При розв'язуванні сформульованих задач використано перетворення Лапласа по часу. Вивчено кінетику дифузійного насичення та виявлено характерні особливості механо дифузійних процесів. Результати порівнюються з аналогічними, отриманими при нехтуванні локальною градієнтністю хімічного потенціалу каркасу. Показано, зокрема, що дана модель добре описує експериментально встановлений факт, згідно з яким в процесі дифузійного насичення тіла екстремум у розподілі домішок досягається не на поверхні насичення, а на деякій віддалі від неї.

В останньому параграфі розділу вивчається процес самодифузії та зумовлений ним напружено-деформований стан із врахуванням локальної градієнтності. При моделюванні самодифузійних явищ приймається, що матеріальна частинка може перебувати як у стані дифундуєчих домішок, так і у стані пружного зв'язку з каркасом. При цьому вважається, що частинки, які знаходяться у станах дифундуєчих домішок або пружного зв'язку з каркасом, характеризуються різними значеннями хімічних потенціалів. Розглядувані підсистеми твердого розчину є відкритими одна для одної, тобто можуть обмінюватися масою. Результати числового дослідження стаціонарних механо дифузійних полів у шарі порівнюються з аналогічними, коли нехтується обміном масою між підсистемами.

У висновках сформульовано основні результати роботи.

Отримані у роботі результати проведених досліджень належать авторіві. Наукові керівники брали участь у формулюванні задач та обговоренні одержаних результатів.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ РОБОТИ

Методами термодинаміки нерівноважних процесів та механіки суцільного середовища побудовано модель локально-градієнтного N -компонентного термопружного твердого розчину із врахуванням обміну масою між підсистемами.

Узагальнено принцип локально-рівноважного термодинамічного стану на багатокомпонентні локально-градієнтні системи. У зв'язку з цим, простір базових параметрів стану розширено за рахунок градієнтів хімічних потенціалів його компонент. Показано, що параметрами, спряженими до градієнтів хімічних потенціалів є вектори пружних зміщень маси, які характеризують оборотні складові векторів потоку маси компонент твердого розчину.

Побудовано функціонал типу згортки, екстремалами якого є взаємозв'язані рівняння лінеаризованої локально-градієнтної механотермодифузії та відповідні граничні умови.

Запропоновано розрахункову схему наближеного розв'язування лінеаризованих крайових задач моделі.

Показано, що побудована модель описує приповерхневу та приконтактну неоднорідність розглядуваних полів за об'ємного підходу (без апріорного виділення приповерхневих областей тіла як таких, характеристики матеріалу яких відрізняються від відповідних характеристик глибинних областей). Тому вона може бути застосована, зокрема, для континуального вивчення взаємозв'язаних полів у тонких плівках, волокнах та багат шарових системах з тонкоплівковими прошарками, для яких вплив поверхневого та об'ємного факторів на внутрішню енергію є співвимірний.

На прикладі модельних задач вивчено закономірності рівноважного розподілу компонент твердого розчину та механічних напружень у тілах простої геометричної конфігурації. Виявлено, що домішки у тілі в рівноважному стані розташовуються так, щоб скомпенсувати неоднорідність хімічного потенціалу

каркасу.

На основі порівняння розв'язків крайових задач механо-дифузії про визначення рівноважного стану у півпросторі з одношаровим та двошаровим покриттями однакової сумарної товщини та однакових характеристиках матеріалу зовнішнього шару покриття, отримано умови на характеристики внутрішнього шару двошарового покриття, при виконанні яких максимальні розтягуючі напруження у зовнішньому шарі двошарового покриття є меншими, ніж в одношаровому.

З використанням розв'язків модельних задач для тіл з покриттями та без них, запропоновано розрахункові формули для вибору характеристик раціональних захисних покриттів.

ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ ДИСЕРТАЦІЇ ОПУБЛІКОВАНО В РОБОТАХ:

1. Бурак Я.И., Грицина О.Р., Нагірний Т.С. Визначальні співвідношення узагальненої електротермомеханіки // Доп. АН УРСР. Сер.А. - 1990. - №9. - С.32-35.
2. Бурак Я.И., Грицина О.Р., Нагірний Т.С. Визначальні співвідношення узагальненої електротермомеханіки N-компонентного твердого розчину // Фіз.-хім. механіка матеріалів. - 1991. - №1. - С.9-13.
3. Бурак Я.И., Грицина О.Р., Нагірний Т.С. Про термодинамічне моделювання приповерхневих явищ в термомеханіці//Доп. АН України. - 1991. - №9. - С.66-70.
4. Бурак Я.И., Грицина О.Р., Нагірний Т.С. Про один підхід до врахування приповерхневої неоднорідності в термомеханіці твердих розчинів // Доп. АН України. - 1991. - №11. - С.47-51.
5. Бурак Я.И., Нагірний Т.С., Грицина О.Р. Термодинамические аспекты расчета приповерхностной неоднородности в термомеханических системах // В кн.: Актуальные проблемы неоднородной механики. (Матер. Всес.научного семинара. Ереван, 23-26 сентября 1991 г.). - Ереван, 1991. - С.81-86.
6. Бурак Я.И., Грицина О.Р., Нагірний Т.С. Механо-дифузійні процеси у півпросторі з врахуванням поверхневих явищ // Доп. АН України. - 1992. - №11. - С.37-40.
7. Бурак Я.И., Грицина О.Р., Нагірний Т.С. Моделювання та

- дослідження механоконцентраційних полів у приконтактних областях двокомпонентних кусково-однорідних систем // Фіз.-хім. механіка матеріалів. - 1994. - №1. - С.40-56.
8. Бурак Я.И., Грицина О.Р. Математическое моделирование динамических процессов в N -компонентном твердом растворе // 9 Краснодарская краевая конф. Прикл. вопр. неравновесной термодинамики и тепло- и массообмена, Краснодар, 1990: Тез. докл. - Краснодар, 1990. - С.13-15.
 9. Бурак Я.И., Грицина О.Р., Нагирный Т.С. Локально - градиентный подход в механике кусочно-однородных систем // III Всес. конф. Механика неоднородных структур, Львов, 17-19 сент., 1991: Тез. докл. - Львов, 1991. - Ч.1. - С.43.
 10. Бурак Я.И., Грицина О.Р., Нагирный Т.С. Термодинамические основы обобщенной локально - градиентной термомеханики электропроводных неферромагнитных твердых растворов // VII съезд по теор. и прикл. механике, Москва, 15-21 сент., 1991: Аннот. докл. - М., 1991. - С.66.
 11. Бурак Я.И., Грицина О.Р., Нагирный Т.С. Особенности физико-механических полей в приконтактной области тела // 2 Всес. совещ.-семина. Инж.-физ. пробл. нов. техн., Москва, 17-19 февр., 1992: Тез. докл. - М., 1992. - С.45.
 12. Бурак Я.И., Грицина О.Р., Нагирный Т.С. Механоконцентраційні поля в тонкоплівкових системах // I Міжнар. Сімп. ФХММ-93, Івано-Франківськ, 15-19 лютого, 1993: Анот. доп. - Івано-Франківськ, 1993. - С.20-21.

ABSTRACT. Hritsyna O.R. Mathematical modelling and investigation of local-gradient mechanodiffusion processes in solid solutions.

Thesis for master's degree (physics and mathematics) specialization - 01.02.04 - mechanics of deformable solids. Pidstryhach Institute of applied problems of mechanics and mathematics of the Ukrainian National Academy of Sciences, Lviv, 1995.

The model of continuous medium for quantitative description of interdependent mechanothermodiffusion processes

in N -component solid solution with regard for both temperature local gradient and chemical potentials of its components is proposed. The near-surface (near-contact) non-homogeneity in distributions of extrinsic particles and stressed-strained state in homogeneous and piece-wise homogeneous bodies with simple geometry (thin films and thin film structures including) are investigated.

АННОТАЦІЯ. Грицина О.Р. Математическое моделирование и исследование локально-градиентных механо-диффузионных процессов в твердых растворах.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности -01.02.04- механика деформируемого твердого тела, Институт прикладных проблем механики и математики им.Я.С.Подстригача НАН Украины, Львов, 1995.

Предложена модель сплошной среды для количественного описания взаимосвязанных механотермодиффузионных процессов в N -компонентном твердом растворе с учетом локальной градиентности температуры и химических потенциалов его компонент. Исследованы приповерхностная (приконтактная) неоднородность в распределении примесных частиц и напряженно-деформированного состояния в однородных и кусочно-однородных телах простой геометрической конфигурации, включая тонкие пленки и тонкопленочные структуры.

Ключові слова: термопружні тверді розчини, локальна-градієнтність, математична модель, механо-дифузійні поля, приповерхневі та приконтактні явища, тонкоплівкові системи.

Зам. №76. Підписано до друку: 22.06.95р.
Формат 60x84/16. Ум.друк.арк. 1,0. Тираж 100 пр.

Роз'явлено в бібліотеці Львівської наукової бібліотеки ім. В.Стефаніка
НАН України. Львів, вул.Лермонтова, 15.

ДНБ ім. В. Стефаника
АН України

443640

AV 33.088