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

На правах рукопису
УДК 539.3:532.72

Ч А П Л Я
ЄВГЕН ЯРОСЛАВОВИЧ

КОНТИНУАЛЬНО-ТЕРМОДИНАМІЧНІ ОСНОВИ МЕХАНІКИ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ З ВРАХУВАННЯМ ЛОКАЛЬНИХ ЗМІН СТАНУ КОМПОНЕНТ

01.02.04 - механіка деформівного твердого тіла.

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
доктора фізико-математичних наук

Львів - 1996

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана у науково-учбовому Центрі математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України

Науковий консультант - член-кореспондент НАН України,
доктор фізико-математичних наук,
професор
БУРАК Ярослав Йосипович

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук,
професор
СЕЛЄЗОВ Ігор Тимофійович;

доктор фізико-математичних наук,
професор
ШАБЛІЙ Олег Миколайович;

доктор фізико-математичних наук,
професор
ОСАДЧУК Василь Антонович

Провідна установа - Київський Національний університет
ім. Т.Г.Шевченка

Захист відбудеться "23" грудня 1996р. о 15 год. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 04.17.01 в Інституті прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України за адресою:

290601, м.Львів-53, МСП, вул.Наукова, 3"б".

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці ІППММ ім.Я.С.Підстригача НАН України (м.Львів-53, вул.Наукова, 3"б").

Відгук на автореферат у 2-х примірниках, завірених печаткою, просимо надсилати за адресою: 290601, м.Львів-53, вул.Наукова, 3"б", ІППММ НАН України, вченому секретарю спеціалізованої ради

Автореферат розісланий "19" листопада 1996р.

Вчений секретар
спеціалізованої ради Шевчук П.Р.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. До сучасних проблем механіки деформівного твердого тіла належить прогнозування деформаційних, міцнісних та інших функціональних параметрів деталей машин і елементів конструкцій, які у процесі виготовлення і експлуатації перебувають у складних умовах взаємодії з зовнішнім середовищем. Для широкого класу матеріалів такі характеристики суттєво залежать від процесів просторового перерозподілу маси та локальних змін стану типу фазових перетворень. У багатокомпонентних твердих тілах (твердих розчинах) особливості цих процесів зумовлюються локальною структурою матеріалу та фізико-механічними властивостями компонент. Так для випадку монокристалів частинки домішкової речовини одного хімічного виду знаходяться у мікроскопічно різних станах, коли вони перебувають у різних типах міжвузлів, вакансіях або областях точкових дефектів іншої природи. Для тіл з просторово розподіленими дислокаціями і границями зерен (полікристалічні матеріали) необхідно розрізняти фізичні стани, які відповідають положенням частинок домішкової речовини в області ядер дислокацій і границь зерен та поза ними. У дрібнодисперсних багатокомпонентних середовищах, зокрема пористих тілах, стан домішкових частинок залежить від типу фази, у якій вони перебувають. У кожному з цих станів частинки одного і того ж хімічного сорту відрізняються своїми дифузійними рухливостями, викликають різну деформацію структури, тощо. При цьому вказана ситуація є характерною для довільно вибраного елемента тіла, який при макроскопічному описі розглядається як фізично малий. У таких середовищах за певних зовнішніх дій експериментально спостерігаються механополяризаційні явища та механогетеродифузійні процеси, які не описуються у рамках класичних модельних уявлень, що базуються на використанні осереднених локальних механодифузійних характеристик тіла.

Підходи і методи прогнозування деформаційних і міцнісних параметрів та механічної поведінки таких тіл грунтуються на конкретних теоретичних моделях механіки суцільного середовища.

Загальні аспекти побудови теоретичних моделей механіки суцільного середовища розглянуто у працях А.Ерінгена, О.А.Ільюшина, Л.І.Седова, К.Трусдела та інших, зокрема, стосовно проблем термомеханіки - А.Д.Коваленка, В.Новацького, Я.С.Підстригача. Вагомий внесок у теорію зв'язаних фізико-механічних полів внесли роботи С.О.Амбарцумяна, Я.Й.Бурака, В.Г.Карнаухова, Л.В.Мольченка, І.Т.Селєзова, А.Ф.Улітка та інших. Моделі механіки, в яких використовуються багатоконтинуумні уявлення з відображенням структури середовища, наведені у працях Р.І.Нігматуліна, В.М.Ніколаєвського, Я.Я.Руцицького, Л.П.Хорошуна та інших.

Основи механіки твердих розчинів, яка враховує фундаментальні термодинамічні закони деформівних середовищ, сформульовано в працях Я.С.Підстригача і стосовно різних об'єктів фізико-математичного моделювання конкретизувались і досліджувались у роботах Я.Й.Бурака, Б.П.Галапаца, О.Р.Гачкевича, В.А.Осадчука, Ю.З.Повстенка, В.С.Павлини, Р.М.Швеця, П.Р.Шевчука та інших. Важливі аспекти механіки багатокомпонентних тіл, які пов'язані з врахуванням фазових перетворень, розглянуті у роботах О.М.Шаблія, В.І.Зарецького та інших.

Окремі конкретні задачі гетеродифузного масопереносу при локальних змінах стану частинок домішкової речовини одного хімічного сорту, з використанням уявлень фізики твердого тіла, розглядались у роботах Б.С.Бокштейна, П.В.Волобуєва, А.Я.Купряжкіна, Т.І.Кучера, Б.Я.Любова, Ю.С.Нечаєва, К.Шродера, С.Ху та інших. У працях [1,2] ці ефекти масопереносу описані у рамках математичної моделі механіки твердих розчинів. Одночасно, виходячи з інших концепцій, у роботах Е.Айфантіса і Дж.Хілла була запропонована і досліджена континуальна модель дифузії домішок двома шляхами з врахуванням переходів частинок. Відзначимо, що при цьому взаємозв'язок процесів різної фізичної природи не розглядався.

Разом з тим залишались не розв'язаними окремі проблеми континуально-термодинамічного опису локального стану систем, зокрема, формулювання рівняння Ейлера, переходу до питомих величин і польового опису неоднорідних твердих деформівних тіл; врахування ефектів відносного пружного зміщення частинок різних компонент та побудови недифузійного варіанту

1 Бурак Я.Й., Галапац Б.П., Чапля Е.Я. Деформация электропроводных тел с учетом гетеродиффузии заряженных примесных частиц//Физ.-хим. мех. материалов. - 198О. - №5. - С.8-14.

2 Бурак Я.Й., Галапац Б.П., Чапля Е.Я. Исходные уравнения процесса деформации электропроводных твердых растворов с учетом различных путей диффузии примесных частиц//Мат. методы и физ.-мех. поля.- 198О.-Вып.11.-С.6О-66.

теорії бінарних систем; формулювання та дослідження модельних співвідношень механіки твердих розчинів, в яких число термодинамічних компонент є більшим за число хімічно різних частинок тіла. У зв'язку з цим актуальним є дальший розвиток методів фізико-математичного моделювання та кількісного опису зв'язаних механогетеродифузійних процесів у твердих розчинах при врахуванні локальних змін стану типу фазових перетворень компонент.

Метою роботи є розробка континуально-термодинамічних підходів до побудови моделей механіки твердих розчинів, у рамках яких з єдиних позицій описуються фізико-механічні процеси та локальні зміни стану компонент типу фазових перетворень. Досягнення цієї мети зокрема включає: означення екстенсивних властивостей термодинамічних параметрів для відкритих фізично малих областей деформівних одно- і багатокомпонентних систем, встановлення рівняння Ейлера та формулювання термодинамічних співвідношень для питомих величин або густин макроскопічних параметрів; побудову вихідних рівнянь нелінійної термомеханіки бінарних систем, обгрунтування одноконтинуумних наближень і розгляд фізико-математичної моделі тіла з неперервно розподіленими мікродефектами; створення основ теорії багатокомпонентних твердих розчинів з числом термодинамічних компонент більшим за кількість хімічно різних частинок тіла; оцінку нових коефіцієнтів матеріалу моделі та введення ефективних механодифузійних характеристик твердих розчинів; дослідження механогетеродифузійних процесів у тілах найпростішої геометричної конфігурації.

Наукова новизна. У роботі запропоновано континуально-термодинамічний підхід до побудови фізико-математичних моделей механіки твердих розчинів, які описують механічні, теплові і дифузійні процеси з врахуванням локальних змін стану складових компонент типу фазових перетворень. Запропоновано узагальнення базових термодинамічних співвідношень для відкритих твердих деформівних систем, які узгоджуються з аналогічними для її рідкого (газоподібного) стану. Побудовано вихідні рівняння нелінійної термомеханіки бінарних систем, яка враховує відносні пружні зміщення частинок різних компонент, обгрунтувано одноконтинуумний варіант її опису, зокрема для тіл з неперервно розподіленими мікродефектами. Сформульовано основи термодинамічної теорії чотирикомпонентних твердих розчинів з урахуванням локальних перетворень компонент домішкової речовини. Запропоновано методику введення ефективних механодифузійних характеристик матеріалу твердих розчинів та, на прикладі тіл найпростішої геометричної конфігурації, вивчено особливості механогетеродифузійних процесів.

Вагомість результатів виконаних досліджень полягає у тому, що отримані модельні співвідношення дають можливість кількісно описувати особливості пружно-деформованого стану тіл, пов'язані з впливом мікроструктури матеріалу на процес переносу частинок домішкових компонент та їх локального перерозподілу. Запропонований варіант термодинамічних співвідношень відкритих деформівних систем може бути використаний для побудови фізико-математичних моделей механіки багатокомпонентних неоднофазних тіл. Сформульовані одноконтинуумні підходи до опису термомеханічної поведінки бінарних систем дають можливість дослідити ефекти пружної взаємодії компонент, коли частинки в основному "зберігають" своїх найближчих сусідів та процесом їх дифузії можна знехтувати.

Методика досліджень. При побудові вихідних модельних співвідношень використовуються геометричні та континуальні уявлення механіки суцільного середовища і методи термодинаміки нерівноважних процесів. При цьому приймається гіпотеза локальної термодинамічної рівноваги, вибираються параметри стану фізично малого макроелемента і виконується перехід до питомих величин. Для екстенсивних параметрів записуються балансові рівняння, які відповідають законам збереження маси, імпульсу і енергії. Встановлюються рівняння балансу внутрішньої енергії, рівняння Гіббса і формулюється рівняння балансу ентропії. Кінетичні рівняння, які замикають систему шуканих вихідних співвідношень, будуються з використанням теорії Онзагера та принципу Кюрі. Лінеаризація системи ключових рівнянь, а також введення ефективних характеристик моделі, виконується базуючись на даних фізики та хімії конденсованого стану про оцінку параметрів фізичної і геометричної нелінійності та взаємозв'язку досліджуваних процесів. Формулюються модельні задачі математичної фізики, які розв'язуються і досліджуються для конкретних випадків відомими з літератури методами.

Вірогідність отриманих результатів забезпечується достовірністю основних співвідношень нерівноважної термодинаміки, методів механіки суцільного середовища; математичною строгістю і коректністю постановки та розв'язання розглянутих у роботі задач, а також узгодженням окремих результатів з відомими у літературі теоретичними і експериментальними даними.

Теоретична і практична цінність. Теоретична цінність роботи полягає у розробці континуально-термодинамічного підходу до побудови моделей механіки твердих розчинів, в яких з єдиних позицій описуються просторово неоднорідні фізико-механічні процеси та процеси локальної зміни стану окремих компонент типу фазових перетворень. Запропоновано варіант аксіоматизації термомеханіки відкритих твердих систем; здійснено узагальнення математичної моделі континуального опису бінарних систем, зокрема, обгрунтовано одноконтинуумні і локально-градієнтні наближення; розроблено методику введення ефективних механодифузійних характеристик твердих розчинів.

Практична цінність роботи полягає у тому, що запропоновані модельні співвідношення дають можливість кількісно досліджувати особливості напружено-деформованого стану тіла, пов'язаного з дифузією домішкової речовини декількома шляхами та зміною стану частинок, який, за певних зовнішніх дій, характерний для широкого класу матеріалів з мікроструктурою. Конкретні розв'язки наведених у роботі задач можуть бути використані для опису фільтрації, дегазації і дифузійного насичення у таких елементах конструкцій, як мембрани і кулі. Результати загального характеру, отримані при дослідженні механогетеродифузійних процесів у твердих розчинах з урахуванням двох станів частинок домішкової компоненти, можуть бути використані при оцінці параметрів міцності полікристалічних дрібнодисперсних тіл, які перебувають в умовах міжкристалітної корозії.

Реалізація результатів роботи. Дослідження, які склали основу роботи, виконувались відповідно до державних замовлень і відомчої тематики Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України та його науково-учбового Центру математичного моделювання і їх результати відображені у наукових звітах.

Апробація роботи. Основні результати дисертаційної роботи доповідались на: Всесозному симпозіумі з актуальних проблем нелінійної теорії пружності (Ленінград, 1983), II та III Всесоюзній конференції з механіки неоднорідних структур (Львів, 1987 і 1991), Міжнародній конференції з прикладного моделювання та імітації (Львів, 1993), Українській конференції з моделювання і дослідження стійкості систем (Київ, 1995), VI Міжнародній конференції з механіки неоднорідних структур (Тернопіль, 1995), V Міжнародному симпозіумі з руйнування та зв'язаних процесів (Польща, Бялосток-Бяловежа, 1995), XXXIV та XXXV Симпозіумах з моделювання в механіці (Польща, Вісла, 1995 і 1996), Міжнародній конференції "II Школа геомеханіки" (Польща, Устронь-Заводнє, 1996), XI Конференції з міцності та пластичності (Москва, 1996), XXXI Польській конференції з механіки твердого тіла (Польща, Мярки, 1996). У цілому робота доповідалась і обговорювалась на семінарах: "Проблеми механіки деформівного твердого тіла" Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України під керівництвом чл.-кор. НАН України Г.С.Кіта, "Проблеми механіки" Київського національного університету ім.Т.Г.Шевченка під керівництвом чл.-кор. НАН України А.Ф.Улітка, "Хвилі в суцільних середовищах" Інституту гідромеханіки НАН України під керівництвом проф. І.Т.Селєзова, "Математичне моделювання і механіка деформованого твердого тіла" Тернопільського приладобудівного інституту ім.І.Пулюя під керівництвом проф. О.М.Шаблія, "Математичне моделювання і методи оптимізації у природознавстві і техніці" Центру математичного моделювання ІППММ ім.Я.С.Підстригача НАН України під керівництвом проф. М.М.Войтовича.

Публікації. За результатами роботи опубліковано 37 наукових праць, основні результати досліджень викладено у 25 публікаціях.

Особистий внесок автора. Основні результати дисертаційної роботи отримані автором самостійно. Науковому консультанту чл.-кор. НАН України Я.Й.Бураку належить ідея використання пружніх зміщень при описі бінарних систем та термомеханічних систем з локальною мікроструктурою; співавтору

Б.П.Галапацу - побудови відповідних модельних співвідношень для електропровідних багатокомпонентних твердих тіл; В.І.Третяку - конформної відповідності фізичних просторів замкнутих термодинамічних систем з різними масами; О.Ю.Чернусі - узагальнення моделі масопереносу частинок домішкової речовини одного хімічного сорту двома шляхами при взаємопереходах між ними на випадок наявності пасток на одному з шляхів дифузії. В інших цитованих роботах автору належить ідея постановки задач та аналіз отриманих розв'язків або обговорення і формулювання результатів дослідження.

На захист виноситься:

- континуально-термодинамічний підхід до побудови фізико-математичних моделей механіки твердих розчинів, які описують зв'язані механічні, теплові і дифузійні процеси та враховують вплив локальних змін стану компонент типу фазових перетворень;
- формулювання базових термодинамічних співвідношень для відкритих твердих деформівних систем, зокрема встановлення рівняння Ейлера;
- математичні моделі термомеханіки бінарних систем, в яких враховуються відносні пружні зміщення частинок різних компонент; обгрунтування одноконтинуумного варіанту їх опису, зокрема, для тіл з неперервно розподіленими мікродефектами;
- основи теорії багатокомпонентних твердих розчинів з числом термодинамічних компонент більшим за кількість хімічно різних частинок тіла та методика побудови відповідних моделей механіки суцільного середовища з ефективними механодифузійними характеристиками;
- кількісна оцінка нових характеристик матеріалу моделі та знайдені закономірності механогетеродифузійних процесів у твердих розчинах при двох станах частинок домішкової речовини для шару та кулі.

Структура та обсяг роботи. Дисертаційна робота, загальним обсягом 305 сторінок (рисунки у тексті), складається з вступу, семи розділів, висновків і списку літератури, що містить 219 найменувань.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі міститься короткий огляд праць, що стосуються теми дисертації, обгрунтовується актуальність вибраної проблематики, сформульована мета роботи, відзначена її новизна, наукове і практичне значення, місце серед інших досліджень. Наводяться також основні результати, отримані в роботі, та основні положення, які виносяться на захист.

У першому розділі розглянуто вихідні положення континуального опису багатокомпонентних систем. Наведено основні уявлення про системи відліку та польовий опис твердих деформівних середовищ. Введено конфігураційні і кінематичні характеристики континуумів, записані рівняння руху і вирази для механічної роботи.

Приймається, що поряд з дискретною сукупністю елементарних матеріальних частинок K^* реального тіла $\mathbf{K}^*$, існують точки X основної множини $\mathbf{X}$ афінного простору X. З афінним простором X асоційований лінійний векторний простір (лінеал) E, а саме $f:(O,X)\Leftrightarrow \bar{r}\in\mathbf{E}$, де $(O,X)\in\mathbf{X}\times\mathbf{X}$ - впорядкована пара точок $(O,X\in\mathbf{X})$, $\bar{r}\in\mathbf{E}$ - елемент основної множини $\mathbf{E}$ лінеалу E (радіус-вектор точки X), символом $\times$ позначено декартів добуток просторів. Вважається, що між матеріальними частинками тіла $\mathbf{K}^*$ і точками афінного простору X у кожен момент часу τ задано взаємнооднозначне відображення: $f_\tau:K^*\Leftrightarrow X\in(\mathbf{X}_\tau)$, де τ - параметр відображення; $(\mathbf{X}_\tau)$ - обмежена область скінченного об'єму V_τ.

Точкам афінного простору $X\in\mathbf{X}$ взаємно однозначно ставляться у відповідність матеріальні точки K континууму $\mathbf{K}$, множина яких утворює компактний топологічний простір і є многовидом трьох вимірів класу m. Вважається, що для моменту часу $\tau=0$ лагранжева координатна сітка $\left\{\xi^\alpha\right\}$ цього многовиду збігається з координатною сіткою $\left\{x^\alpha\right\}$ афінного простору X, тобто $\xi^\alpha\equiv x^\alpha$, де ξ^α, x^α - дійсні числа ($\alpha=\overline{1,3}$). Цим здійснена "індивідуалізація" точок матеріального континууму $\mathbf{K}$ і кожній точці $K\in\mathbf{K}$ присвоєна "мітка" $\left\{\xi^\alpha\right\}$. Відображення між афінним простором **X** і континуумом **K** записується у вигляді закону руху

$$\bar{r}_\tau = \bar{r}_\tau(\bar{r}_\circ;\tau) \quad \text{і} \quad \bar{r}_\circ = \bar{r}_\circ(\bar{r}_\tau;\tau), \tag{1.1}$$

де $\bar{r}_\tau$, $\bar{r}_\circ$ - радіс-вектори точки $K \in \mathbf{K}$ у довільний і початковий моменти часу. Для спрощення індекс τ надалі опущено.

З використанням представлень про фізично малі околи точок X основної множини **X** афінного простору **X**, відповідних граничних переходів та відображень f_τ і (1.1) матеріальні точки K континууму **K** наділяються властивостями системи $\mathbf{K}^*$.

У кожній точці $K \in \mathbf{K}$ будується локальний (дотичний) лінеал $\mathrm{E}(\mathrm{K})$. За лагранжевого опису у якості базисних векторів $\underset{\alpha}{\bar{e}}$ реперу $\left\{K, \underset{\alpha}{\bar{e}}(K)\right\}$ вибрано вектори, дотичні до координатних ліній $\underset{\alpha}{\bar{e}} \equiv \partial\bar{r}\left(\left\{\xi^\alpha\right\};\tau\right)\big/\partial\xi^\alpha$, а метрика задана функціями $g_{\alpha\beta} = \underset{\alpha}{\bar{e}} \cdot \underset{\beta}{\bar{e}}$, які є коваріантними компонентами метричного тензора $\hat{g} = g_{\alpha\beta}\, \overset{\alpha}{\bar{e}} \otimes \overset{\beta}{\bar{e}}$ $(\alpha, \beta = \overline{1,3}$ і за грецькими індексами, що повторюються, виконується підсумовування). При цьому в початковий момент часу $\tau = 0$: $\underset{\alpha}{\overset{\circ}{\bar{e}}} = \underset{\alpha}{\overset{\circ}{\bar{i}}}$, $\overset{\circ}{g}_{\alpha\beta} = \underset{\alpha}{\overset{\circ}{\bar{e}}} \cdot \underset{\beta}{\overset{\circ}{\bar{e}}}$ і $\hat{g}_\circ = \overset{\circ}{g}_{\alpha\beta}\, \underset{\circ}{\overset{\alpha}{\bar{e}}} \otimes \underset{\circ}{\overset{\beta}{\bar{e}}}$, де $\underset{\alpha}{\overset{\circ}{\bar{i}}} \equiv \partial\bar{r}\left(\left\{x^\alpha\right\}\right)\big/\partial x^\alpha$ - координатні вектори вихідного лінеалу E, асоційованого з афінним простором **X**. За ейлерового опису локальним репером матеріальної системи є координатний репер афінного простору, а поле компонент метричного тензора $\{g_{\alpha\beta}\}$ може також додатково пов'язуватись з полями концентрацій речовини. При цьому зберігається можливість доозначення і аналізу екстенсивних (інтенсивних) властивостей параметрів локального стану системи.

Величини

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \left(g_{\alpha\beta} - \overset{\circ}{g}_{\alpha\beta}\right)\Big/2, \quad \underset{\circ}{\hat{\varepsilon}} = \varepsilon_{\alpha\beta}\, \underset{\circ}{\overset{\alpha}{\bar{e}}} \otimes \underset{\circ}{\overset{\beta}{\bar{e}}}, \quad \hat{\varepsilon} = \varepsilon_{\alpha\beta}\, \overset{\alpha}{\bar{e}} \otimes \overset{\beta}{\bar{e}} \tag{1.2}$$

- розглядаються відповідно як компоненти деформації, тензори деформації Гріна другого роду та Альмансі. Тут $\overset{\alpha}{\bar{e}}$ і $\underset{\circ}{\overset{\alpha}{\bar{e}}}$ - контраваріантні базисні вектори, а символами $\otimes$ і $\bullet$ - позначено тензорний добуток і внутрішню (скалярну) згортку.

На частинки системи діють далекодіючі сили, густина яких є $\bar{f}_i^{\bullet}(\bar{r}) = \rho_i \bar{f}_i(\bar{r})$, де $\bar{f}_i(\bar{r})$ - інтенсивність цих сил, ρ_i - густина маси компоненти i. Як кількісну міру короткодіючих силових взаємодій між матеріальними частинками системи прийнято вектор напружень $\bar{\sigma}^{(n)}(\bar{r}) = \bar{n}(\bar{r}) \cdot \hat{\sigma}(\bar{r})$, де $\bar{n}(\bar{r})$ - нормаль до довільної інфінітизимально малої поверхні $(\delta\,\partial\mathbf{X})$, $\hat{\sigma} = \sigma^{\alpha\beta}\, \underset{\alpha}{\bar{e}} \otimes \underset{\beta}{\bar{e}}$ - симетричний тензор напружень Коші валентності два, $\sigma^{\alpha\beta}$ - його компоненти.

Вказаним вище способом введено також представлення про деформацію і силові характеристики континуумів $\mathbf{K}_k$, які співставляються компонентам системи $\mathbf{K}_i^{\bullet}$ $\left(\mathbf{K}^{\bullet} = \bigcup_i \mathbf{K}_i^{\bullet}\right)$. При цьому сили міжкомпонентної взаємодії віднесено до об'ємних.

Рівняння руху подаються в актуальній та вихідній геометричних конфігураціях

$$\rho \frac{d\bar{v}}{d\tau} = \bar{\nabla} \cdot \hat{\sigma} + \bar{f}^{\bullet}, \quad \rho_{\circ} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \tau} = \bar{\nabla}_{\circ} \cdot \hat{\sigma}^{\bullet} + \bar{f}_{\circ}^{\bullet}, \tag{1.3}$$

де $\rho = \sum \rho_i$ - сумарна густина, $\rho_0 = J^{-1}\rho$, $J = (g/g_0)^{1/2}$, $g = \det\|g_{\alpha\beta}\|$ і $g_0 = \det\|g^0_{\alpha\beta}\|$; $\bar{v}(\bar{r}_{\circ};\tau) \equiv \partial\bar{r}(\bar{r}_{\circ};\tau)/\partial\tau$ - швидкість точок $K \in \mathbf{K}$ (континуум $\mathbf{K}$ співставляється системі $\mathbf{K}^{\bullet}$ у цілому), яка розглядається як функція точок афінного простору $\mathbf{X}$, тобто $\bar{v} = \bar{v}(\bar{r};\tau)$; $d/d\tau = \partial/\partial\tau + \bar{v} \cdot \bar{\nabla}$ - повна похідна, $\bar{\nabla}$ і $\bar{\nabla}_{\circ}$ - набла-оператори Гамільтона; $\bar{f}^{\bullet} = \sum f_i^{\bullet}$ - об'ємна сила і $\bar{f}_{\circ}^{\bullet} = J\bar{f}^{\bullet}$; $\hat{\sigma}^{\bullet} = J\left(\bar{\nabla} \otimes \bar{r}_{\circ}\right)^{\mathrm{T}} \cdot \hat{\sigma}$ - тензор напружень Піоли (індексом T відзначається операція транспонування).

Густина механічної роботи δw_0 макрочастини системи з розрахунку на одиницю об'єму вихідної конфігурації буде

$$\delta w_0 = \delta \mathrm{E}_k + \frac{1}{2} J \rho_{\circ} \sigma^{\alpha\beta} \delta g_{\alpha\beta} \text{ або } \delta w_0 = \delta \mathrm{E}_k + \hat{\sigma}^{\bullet\mathrm{T}} : \delta\left(\bar{\nabla}_{\circ} \otimes \bar{r}\right), \tag{1.4}$$

де $\delta \mathrm{E}_k = (\partial \mathrm{E}_k / \partial \tau) d\tau$ і $\mathrm{E}_k = \rho_\circ \bar{v}^2/2$ - густина кінетичної енергії.

Квазістатичні процеси означаються як такі процеси, в яких система не отримує приросту кінетичної енергії, тобто $\delta \mathrm{E}_k = 0$. Для рідких або газоподібних станів ($\sigma^{\alpha\beta} = -Pg^{\alpha\beta}$, P - тиск) робота над макрочастиною в актуальній конфігурації є: $\delta W_c = -P\delta V$, де $\delta W_c = \delta w_c \delta V_0$ і $\delta V = J\delta V_0$, δV_0 - її об'єм у вихідній конфігурації.

Зазначимо, що з відповідними уточненнями аналогічні за структурою рівняння руху і вирази для механічної роботи записано для компонент $\mathbf{K}_i^* \subset \mathbf{K}^*$.

У другому розділі сформульовано базові термодинамічні співвідношення для відкритих одно- і багатокомпонентних деформівних систем.

Прийнято наступні положення:

- зміна внутрішньої енергії U однорідної закритої твердої деформівної системи маси m визначається рівнянням Гіббса

$$dU = TdS + (V/2)\sigma^{\alpha\beta} dg_{\alpha\beta}, \qquad (2.1)$$

де T - абсолютна температура і S - ентропія;

- при відомій залежності $U = U(S, \{g_{\alpha\beta}\}; m)$ зв'язок між параметрами задається рівняннями стану системи

$$T = (\partial U/\partial S)_{\{g_{\alpha\beta}\}, m}, \; V\sigma^{\alpha\beta}/2 = (\partial U/\partial g_{\alpha\beta})_{S,m}; \qquad (2.2)$$

- дві закриті системи $\delta\mathbf{K}$ і $\delta\overline{\mathbf{K}}$ з масами m і ηm знаходяться в одному і тому ж термодинамічному стані, якщо макроскопічні параметри $(T, \sigma^{\alpha\beta}, g_{\alpha\beta}, U, S, V_0)$ і $(\overline{T}, \overline{\sigma}^{\alpha\beta}, \overline{g}_{\alpha\beta}, \overline{U}, \overline{S}, \overline{V}_0)$ цих систем зв'язані умовами:

$$T = \overline{T}, \quad \sigma^{\alpha\beta} = \overline{\sigma}^{\alpha\beta}, \; \overline{g}_{\alpha\beta} = \varphi(\eta) g_{\alpha\beta}, \qquad (2.3)$$

$$\overline{U} = \eta U, \overline{S} = \eta S, \overline{V}_0 = \eta V_0, \qquad (2.4)$$

де $\varphi(\eta) > 0$ і $\varphi(\eta)_{\eta=1} = 1$ $(\eta > 0 \in \mathbb{R})$;

- зміна внутрішньої енергії δU відкритої системи $\delta\mathbf{K}'$ внаслідок зміни її маси на δm рівна різниці внутрішніх енергій двох закритих систем $\delta\mathbf{K}$ і $\delta\overline{\mathbf{K}}$, які знаходяться у тому ж самому термодинамічному стані (2.3), (2.4) і відрізняються масою на δm;

- для рідких (газоподібних) систем відповідно маємо

$$U = TS - PV + \mu m, \quad dU = TdS - PdV + \mu dm,$$

$$U = U(S,V,m): \quad T = \partial U/\partial S, \; P = -\partial U/\partial V, \; \mu = \partial U/\partial m. \quad (2.5)$$

З умов екстенсивності (2.4), рівнянь стану (2.2) та узгодженності термодинамічних співвідношень для твердого і рідкого стану системи встановлено рівняння Ейлера

$$U = TS + \sigma V/3 + \mu m, \quad (2.6)$$

рівняння Гіббса

$$dU = TdS + \overline{\sigma}^{\alpha\beta} d\overline{g}_{\alpha\beta} + \mu dm \quad (2.7)$$

і для $U = U\left(S, \{\overline{g}_{\alpha\beta}\}, m\right)$ рівняння стану

$$T = \partial U/\partial S, \quad \overline{\sigma}^{\alpha\beta} = \partial U/\partial \overline{g}_{\alpha\beta}, \quad \mu = \partial U/\partial m. \quad (2.8)$$

Тут $\overline{\sigma}^{\alpha\beta} = JV_*^{1/3}\sigma^{\alpha\beta}/2$ і $\overline{g}_{\alpha\beta} = V_*^{2/3} g_{\alpha\beta}$ - термодинамічні параметри, які задовольняють умовам (2.3) і (2.4); $\sigma = \sigma^{\alpha\beta} g_{\alpha\beta}$ - перший інваріант тензора напружень Коші.

З використанням рівняння Ейлера (2.6) рівняння Гіббса (2.7) записується для питомих величин або густин. Для масових питомих величин

$$u = U/m, \; s = S/m, \; \sigma^{\alpha\beta}_{(m)} = \overline{\sigma}^{\alpha\beta}/m, \; g^{(m)}_{\alpha\beta} = \overline{g}_{\alpha\beta}/m, \; \rho = m/V$$

маємо

$$u = Ts + \sigma/(3\rho) + \mu, \quad du = Tds + \sigma^{\alpha\beta}_{(m)} dg^{(m)}_{\alpha\beta}. \quad (2.9)$$

Для густин

$$u_0 = U/V_0, \; s_0 = S/V_0, \; \sigma^{\alpha\beta}_{(0)} = \overline{\sigma}^{\alpha\beta}/V_0, \; g^{(0)}_{\alpha\beta} = \overline{g}_{\alpha\beta}/V_0, \; \rho_0 = m/V_0,$$

введених відносно початкової (вихідної) геометричної конфігурації, знаходимо

$$u_0 = Ts_0 + J\sigma/3 + \mu\rho_0, \quad du_0 = Tds_0 + \sigma^{\alpha\beta}_{(0)} dg^{(0)}_{\alpha\beta} + \mu\, d\rho_0, \quad (2.10)$$

а для густин

$$\breve{u} = U/V, \; \breve{s} = S/V, \; \breve{\sigma}^{\alpha\beta} = \overline{\sigma}^{\alpha\beta}/V, \; \breve{g}_{\alpha\beta} = \overline{g}_{\alpha\beta}/V$$

відносно актуальної конфігурації, отримуємо

$$\breve{u} = T\breve{s} + \sigma/3 + \mu\rho, \quad d\breve{u} = Td\breve{s} + \breve{\sigma}^{\alpha\beta} d\breve{g}_{\alpha\beta} + \mu\, d\rho. \quad (2.11)$$

У частковому випадку, коли $\sigma^{\alpha\beta} = -Pg^{\alpha\beta}$, для рідких (газоподібних) систем маємо

$$u = Ts - P/\rho + \mu, \quad du = Tds - Pd(1/\rho),$$

$$\tilde{u} = T\tilde{s} - P + \mu\rho, \quad d\tilde{u} = Td\tilde{s} + \mu d\rho, \tag{2.12}$$

Одержані термодинамічні співвідношення узагальнені на випадок багатокомпонентних систем.

Записані умови рівноваги Гіббса між твердим і рідким станом тіла. У випадку однокомпонентної системи при ізотермічних умовах ($T^s = T^l \equiv T$)

$$\bar{\nabla}_0 \cdot \hat{\sigma}^* - \rho_0 \bar{f} = 0, \ \left(\hat{\sigma}^*\right)^{\mathrm{T}} + JP\left(\bar{\nabla} \otimes \bar{r}_*\right) = 0 \ \text{(або } \hat{\sigma} = -P\hat{g}); \tag{2.13}$$

$$u_0^s - T s_0^s + JP - \mu^l \rho_0 = 0, \tag{2.14}$$

де $\hat{\sigma}^* = \left(\bar{\nabla} \otimes \bar{r}_*\right)^{\mathrm{T}} \cdot \hat{\sigma}$ - тензор напружень Піоли; індекси s і l відмічають тверду і рідку фази.

Враховуючи умову механічної рівноваги (2.13) і рівняння Ейлера (2.10), термодинамічну рівність (2.14) подамо у вигляді

$$\hat{\mu}_0^s = \mu^l \hat{g}_0 \ \text{ або } \ \hat{\mu}^s = \mu^l \hat{g}, \tag{2.15}$$

де

$$\hat{\mu}_0^s = \left(u_0^s - T s_0^s\right)\hat{g}_0 + J\,\underset{\bullet}{\hat{\sigma}} \ \text{ і } \ \hat{\mu}^s = \left(u_0^s - T s_0^s\right)\hat{g} + J\hat{\sigma} \tag{2.16}$$

- тензори хімічного потенціалу в базисі вихідної та актуальної геометричної конфігурацій, $\underset{\bullet}{\hat{\sigma}}$ - енергетичний тензор.

Отримані результати можна розглядати як одне з можливих термодинамічних означень тензора хімічного потенціалу.

У третьому розділі розглянуто математичні моделі термомеханіки бінарних систем з пружньою взаємодією компонент.

Приймається, що довільно вибрана фізично мала доля (макрочастина) тіла містить частинки двох хімічно різних сортів, які при деформації зберігають своїх сусідів (процеси дифузії є нехтовно малими). До основних процесів, поряд з деформацією, віднесено пружну поляризацію (відносні зміщення частинок різного типу) і теплопровідність. Компонентам $\mathbf{K}_i^*$ матеріального середовища поставлено у відповідність матеріальні континууми $\mathbf{K}_i$ $(i = \overline{1,2})$.

За вихідні співвідношення прийнято закони збереження маси і балансові рівняння для імпульсу і ентропії, записані для кожної компоненти зокрема за ейлерового підходу:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial \tau} + \bar{\nabla} \cdot \bar{\upsilon}_M^{(i)} = 0, \tag{3.1}$$

$$\frac{\partial \bar{\upsilon}_M^{(i)}}{\partial \tau} + \bar{\nabla} \cdot \left(\bar{\upsilon}_M^{(i)} \otimes \bar{v}_i\right) = \bar{\nabla} \cdot \hat{\sigma}_i + \rho_i \bar{g}_i + (-1)^i \bar{P}, \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial(\rho_i s_i)}{\partial\tau}+\bar{\nabla}\cdot\left(\bar{\upsilon}_M^{(i)}s_i\right)=-\bar{\nabla}\cdot\bar{J}_{si}+\bar{J}_{Qi}\cdot\bar{\nabla}(1/T_i)-$$
$$-(-1)^i\bar{P}\cdot\bar{v}_i/T_i+(-1)^i e/T_i. \qquad (3.3)$$

Тут $\bar{\upsilon}_M^{(i)}=\rho_i\bar{\upsilon}_i$ - потік маси (вектори кількості руху), $\bar{v}_i(\bar{r},\tau)$ - швидкості точок компоненти i ; $\bar{g}_i=-\bar{\nabla}\psi_i$ - масова сила $(\partial\psi_i/\partial\tau=0)$, ψ_i - потенціал; $\bar{P}$ - імпульс сили, яким обмінюються компоненти; $\bar{J}_{si}=\bar{J}_{Qi}/T_i$, $\bar{J}_{Qi}$ - потік ентропії і тепла у компоненті i тіла; e - енергія, якою обмінюються компоненти; s_i - питома ентропія з розрахунку на одиницю маси компоненти i ; T_i - абсолютна температура.

Зв'язок між ентропією s_i і внутрішньою енергію u_i дається диференційною 1-формою (рівнянням Гіббса)

$$du_i=T_i\,ds_i+\left(\sigma_i^{\alpha\beta}/2\rho_i\right)d\left(g_{\alpha\beta}^i\right), \qquad (3.4)$$

яка є наслідком рівняння балансу внутрішньої енергії для квазістатичних процесів. За потенціального опису локального стану системи $u_i=u_i\left(s_i,\left\{g_{\alpha\beta}^i\right\}\right)$ рівняння стану будуть

$$T_i=\partial u_i/\partial s_i,\ \bar{\sigma}_i^{\alpha\beta}/2\rho_i=\partial u_i/\partial g_{\alpha\beta}^i. \qquad (3.5)$$

З рівнянь балансу ентропії (3.3) знайдено

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial\tau}+\bar{\nabla}\cdot\left(\sum\bar{\upsilon}_M^{(i)}s_i\right)=-\bar{\nabla}\cdot\bar{J}_s+\sigma_s. \qquad (3.6)$$

Тут $s=\sum C_i s_i$ - питома ентропія системи; $\bar{J}_s=\bar{J}_{s1}+\bar{J}_{s2}$ - сумарний потік ентропії;

$$\sigma_s=\bar{J}_{Q1}\cdot\bar{X}_{Q1}+\bar{J}_{Q2}\cdot\bar{X}_{Q2}+\bar{P}\cdot\bar{X}_p+eX_T\ge 0 \qquad (3.7)$$

- потужність виробництва ентропії;

$$\bar{X}_{Qi}=\bar{\nabla}(1/T_i),\ \bar{X}_p=\bar{v}_1/T_1-\bar{v}_2/T_2,\ X_T=1/T_2-1/T_1 \qquad (3.8)$$

- термодинамічні сили, які спряжені до потоків тепла $\bar{J}_{Qi}$ $\left(i=\overline{1,2}\right)$, імпульсу сили $\bar{P}$ і енергії e.

За потенціального опису дисипативних процесів кінетичними рівняннями є

$$\bar{J}_{Qi}=\partial\Pi/\partial\bar{X}_{Qi},\ \bar{P}=\partial\Pi/\partial\bar{X}_p,\ e=\partial\Pi/\partial X_T, \qquad (3.9)$$

де $\Pi=\Pi\left(\left\{\bar{X}_{Qi}\right\},\bar{X}_p,X_T\right)$ - кінетичний потенціал.

Записані співвідношення складають повну систему рівнянь моделі термомеханіки бінарних систем.

Розглянуто математичні моделі у наближенні континуума центрів мас $\mathbf{K}_c$ і базової компоненти $\mathbf{K}_l$ ($\rho_1 >> \rho_2$). Вихідні співвідношення подано у субстанціональній формі, яка пов'язана з рухом матеріальних точок континууму $\mathbf{K}_c$ або $\mathbf{K}_l$. Зокрема, в першому випадку отримано таке узагальнене рівняння Гіббса

$$du = Tds + (\hat{\sigma}''/\rho):d\left(\bar{\nabla}_{0c} \otimes \bar{r}\right)^{\mathrm{T}} + (\hat{\sigma}''_c/\rho):d\left(\bar{\nabla}_{0c} \otimes \bar{u}\right)^{\mathrm{T}}, \quad (3.10)$$

де $u = \sum C_i u_i$ - питома внутрішня енергія; $\hat{\sigma}'' = \hat{\sigma}'_1 + \hat{\sigma}'_2$, $\hat{\sigma}''_c = C_1\hat{\sigma}'_2 - C_2\hat{\sigma}'_1$. $\hat{\sigma}'_i = \left(\bar{\nabla} \otimes \bar{r}_\circ\right)^{\mathrm{T}} \cdot \hat{\sigma}_i$ - тензор напружень Піоли $\left(i = \overline{1,2}\right)$; $\bar{r}$ - радіус-вектор точок континууму $\mathbf{K}_c$, $\bar{u} = \bar{r}_2 - \bar{r}_1$ - вектор відносних (пружніх) зміщень; $\bar{\nabla}_{0c}$ - набла-оператор Гамільтона у вихідній конфігурації континууму центрів мас.

Побудовано визначальні співвідношення моделі з орієнтацією на вихідну конфігурацію. Для густини повної енергії $\mathrm{E}(\bar{r}_\circ, \tau)$ і ентропії $s(\bar{r}_\circ, \tau)$ записуємо

$$\frac{\partial \mathrm{E}}{\partial \tau} = -\bar{\nabla}_\circ \cdot \bar{J}_{\mathrm{E}}, \quad \frac{\partial s}{\partial \tau} = -\bar{\nabla}_\circ \cdot \bar{J}_s + \sigma_s, \quad (3.11)$$

де $\bar{J}_{\mathrm{E}}(\bar{r}_0, \tau) = T\bar{J}_s - \sum \hat{\sigma}_i^{(M)} \cdot \bar{\upsilon}_{\mathrm{M}}^{(i)}$ - потік енергії; $\hat{\sigma}_i^{(M)}(\bar{r}_\circ, \tau) = \hat{\sigma}'_i/\rho$ - матеріальний тензор напружень для континууму $\mathbf{K}_i$ $\left(i = \overline{1,2}\right)$; $\sigma_s(\bar{r}_\circ, \tau) = \left(-\bar{\nabla}_\circ T/T\right) \cdot \bar{J}_s \geq 0$ - виникнення ентропії.

У відповідність рівнянню балансу енергії і ентропії ставиться диференційна 1-форма

$$dL = Tds - \sum \bar{P}_i \cdot d\bar{\upsilon}_{\mathrm{M}}^{(i)} + \sum \hat{\sigma}_i^{(M)}:d\left(\hat{\varepsilon}_{\mathrm{M}}^{(i)}\right)^{\mathrm{T}}. \quad (3.12)$$

Тут уведено такі позначення:

$$L = \mathrm{E} - \sum \bar{P}_i \cdot \bar{\upsilon}_{\mathrm{M}}^{(i)}, \quad \bar{P}_i = \bar{P}_{i(\circ)} + \int_{\tau_\circ}^{\tau} \left(\bar{\nabla}_\circ \cdot \hat{\sigma}_i^{(M)}\right) d\tau, \quad (3.13)$$

$\bar{P}_{i(\circ)} \equiv \bar{P}_i(\bar{r}_\circ, \tau)$ - імпульс поступального руху $\left(i = \overline{1,2}\right)$; $\hat{\varepsilon}_{\mathrm{M}}^{(i)} = \bar{\nabla}_\circ \otimes \bar{u}_{\mathrm{M}}^{(i)}$, $\bar{u}_{\mathrm{M}}^{(i)}(\bar{r}_\circ, \tau)$ - переміщення ($\bar{\upsilon}_{\mathrm{M}}^{(i)} = \partial \bar{u}_{\mathrm{M}}^{(i)}/\partial\tau$).

Якщо за потенціал локальної ситуації прийняти функцію $L = L(\mathrm{B})$, де $\mathrm{B} \equiv \left(s, \bar{\upsilon}_{\mathrm{M}}^{(1)}, \bar{\upsilon}_{\mathrm{M}}^{(2)}, \hat{\varepsilon}_{\mathrm{M}}^{(1)}, \hat{\varepsilon}_{\mathrm{M}}^{(2)}\right)$, то для такої функції диференційна 1-форма є повним диференціалом і тоді маємо рівняння ситуації

$$T = \partial L/\partial s, \quad \bar{P}_i = \partial L/\partial \bar{\upsilon}_{\mathrm{M}}^{(i)}, \quad \hat{\sigma}_i^{(M)} = \partial L/\partial \hat{\varepsilon}_{\mathrm{M}}^{(i)} \quad \left(i = \overline{1,2}\right). \quad (3.14)$$

Друге рівняння даної системи можна трактувати як рівняння збереження імпульсу. Якщо $\bar{v}_M^{(1)} = \bar{v}_M^{(2)} = 0$, то отримуємо наближення рівноважних термодинамічних станів.

Запропонований формалізм використано для побудови локально-градієнтної моделі термопружності для тіла з мікродефектами. У цьому випадку маємо такі локальні балансові рівняння

$$\frac{\partial\rho}{\partial\tau} + \bar{\nabla}\cdot\bar{J}_M = w_M, \quad \frac{\partial E}{\partial\tau} + \bar{\nabla}\cdot\bar{J}_E = w_E, \quad \frac{\partial s}{\partial\tau} + \bar{\nabla}\cdot\bar{J}_s = w_s + \sigma_s. \qquad (3.15)$$

Тут $w_M(\bar{r}_0,\tau), w_s(\bar{r}_0,\tau), w_E(\bar{r}_0,\tau)$ - густини потужностей джерел адитивних характеристик і прийнято, що

$$\bar{J}_M = -\partial\bar{\Pi}_M/\partial\tau, \quad w_M = \partial q_M/\partial\tau, \quad w_s = \partial q_s/\partial\tau$$

$$\bar{J}_E = T\bar{J}_s + \mu\bar{v}_M - \hat{\sigma}^{(M)}\cdot\bar{v}_M, \quad w_E = T\,\partial q_s/\partial\tau + \mu\,\partial q_M/\partial\tau, \qquad (3.16)$$

де $\bar{J}_M$ і $\bar{\Pi}_M$ - масовий потік і вектор пружніх зміщень; $\mu(\bar{r}_0,\tau)$ - масовий поляризаційний потенціал; $q_M(\bar{r}_0,\tau)$, $q_s(\bar{r}_0,\tau)$ - масова та ентропійна характеристики розподілених мікродефектів (вакансій, дислокацій, границь зерен, тріщин, тощо).

Рівнянням балансу енергії і ентропії ставиться у відповідність диференційна 1-форма

$$dL = Tds + \mu d\rho - \bar{P}\cdot d\bar{v}_M + (\bar{\nabla}\mu)\cdot d\bar{\Pi}_M + \hat{\sigma}:d\hat{\varepsilon}_M^T. \qquad (3.17)$$

де $L = E - \bar{P}\cdot\bar{v}_M$ і $\bar{P} = \bar{P}_{(0)} + \int_{\tau_0}^{\tau}\left(\bar{\nabla}\cdot\hat{\sigma}^{(M)}\right)d\tilde{\tau}$ - імпульс сили, $\bar{v}_M = \bar{v}_M(\bar{r}_0,\tau)$ - питомий вектор кількості руху (імпульсу руху) тіла в цілому.

При потенціальному описі $L = L(s,\rho,\bar{v}_M,\bar{\Pi}_M,\hat{\varepsilon}_M)$ маємо рівняння ситуації

$$T = \partial L/\partial s, \quad \mu = \partial L/\partial\rho,$$

$$\bar{P} = -\partial L/\partial\bar{v}_M, \quad \bar{\nabla}\mu = \partial L/\partial\bar{\Pi}_M, \quad \hat{\sigma}^{(M)} = \partial L/\partial\hat{\varepsilon}_M. \qquad (3.18)$$

На відміну від відомих моделей термопружності, тут фізично мала підсистема розглядається як відкрита, враховуються локально-градієнтні ефекти "поляризації" маси, а також до параметрів стану включена швидкість $\bar{v}_M$ та імпульс сили $\bar{P}$.

Сформульовано додаткові обмеження, які пов'язані з узагальненням принципу локальної термодинамічної рівноваги.

Повна енергія E зображається у вигляді суми кінетичної E_k і внутрішньої u енергій і приймається, що

$$dE_k = \bar{P} \cdot d\bar{v}, \quad du = Tds + \mu d\rho + \bar{\nabla}\mu \cdot d\bar{\Pi}_M + \hat{\sigma}^{(M)} : d\hat{\varepsilon}_M^{\mathrm{T}}. \quad (3.19)$$

Тоді рівняння локальної ситуації будуть

$$\bar{P} = \partial E_k / \partial \bar{v}, \; T = \partial u / \partial s, \; \mu = \partial u / \partial \rho,$$
$$\bar{\nabla}\mu = \partial u / \partial \bar{\Pi}_M, \; \hat{\sigma}^{(M)} = \partial u / \partial \hat{\varepsilon}_M. \quad (3.20)$$

Розглянуто рівноважний стан пружного тіла з локально розподіленими мікродефектами при ізотермічних умовах. Вважалось, що зміна масового поляризаційного потенціалу, в основному, пов'язана з мікродефектністю (функцією q_M). Покладалось, що в однорідному природному вихідному стані $\bar{\Pi}_M(\bar{r}_0, \tau_0) = 0$, $q_M(\bar{r}_0, \tau_0) = 0$. Для такого наближення отримана лінійна система рівнянь

$$\rho - \rho_0 = C_M(\mu - \mu^0), \quad \hat{\sigma} = 2G\left(\hat{\varepsilon} - \frac{1}{3}\varepsilon\hat{I}\right) + K\left[\varepsilon - \beta(\mu - \mu^0)\right]\hat{I};$$

$$æ\,\Delta\mu - C_M(\mu - \mu^0) = -q_M, \; G\Delta\bar{u} + \left(K + \frac{G}{3}\right)\bar{\nabla}(\bar{\nabla} \cdot \bar{u}) + \bar{F} = 0, \quad (3.21)$$

де $\bar{F} = -K\beta\bar{\nabla}(\mu - \mu_{(0)})$ - густина об'ємних сил.

Тут $\varepsilon = \hat{\varepsilon} : \hat{I}$ - перший інваріант тензора деформації, $\hat{I}$ - одиничний тензор; K - модуль об'ємного стиску і G - модуль зсуву; C_M , β , і $æ$ - матеріальні характеристики. При цьому рівняння балансу маси буде $\rho - \rho_0 - \bar{\nabla} \cdot \bar{\Pi}_M = q_M$.

При такому поданні функція $\bar{F}$ трактується як густина об'ємних сил, які зумовлені неоднорідністю поля масового поляризаційного потенціалу. Тому при розгляді конкретних задач для тіл з мікродефектами, можна використати особливі розв'язки рівнянь теорії пружності для тіл із зосередженими силовими факторами.

У четвертому розділі побудована математична модель теорії твердих розчинів, яка описує фізико-механічні процеси при врахуванні дифузії домішкової речовини двома шляхами і зміни стану частинок при переході з одного шляху міграції на інший. Матриця твердого розчину складається з двох базових компонент одного хімічного сорту. Під базовими компонентами розуміються, наприклад, частинки різних модифікацій кристалічного стану (включаючи аморфний), твердої і рідкої фази, тощо.

При макроскопічному описі кожній компоненті $\mathbf{K}_i^*$ тіла відповідає окремий континуум (многовид) $\mathbf{K}_i$ $\left(i = \overline{1,4}\right)$, а тілу в цілому - континуум центрів мас $\mathbf{K}_c$. За основні процеси, які протікають у тілі, приймається деформація, теплопровідність і гетеродифузія. Механічні процеси і процеси переносу тепла описуємо з використанням конфігураційних і кінематичних характеристик континууму центрів мас $\mathbf{K}_c$.

Макроскопічний стан фізично малого елемента системи визначено значеннями спряжених параметрів $s \div T$, $\rho^{-1}\hat{\sigma} \div \hat{\varepsilon}$, $\mu_i \div C_i$ $(i = \overline{1,4})$. За потенціального опису локального стану тіла рівняння стану конкретизовані у лінійному наближенні для ізотропних і анізотропних тіл.

Закон збереження маси, балансові співвідношення для концентрацій компонент тіла, імпульсу і ентропії мають вигляд

$$\frac{d\rho}{d\tau} = -\rho\bar{\nabla}\cdot\bar{\upsilon},\ (\rho = \sqrt{g/g_0}\,\rho_0\,);\quad \rho\frac{dC_i}{d\tau} = -\bar{\nabla}\cdot\bar{J}_i + (-1)^{i'} J;$$

$$\rho\frac{d\bar{\upsilon}}{d\tau} = -\bar{\nabla}\cdot\hat{\sigma} + \rho\sum C_i\bar{f}_i';\quad \rho\frac{ds}{d\tau} = -\bar{\nabla}\cdot\bar{J}_s + \sigma_s, \tag{4.1}$$

де $\bar{J}_s = \bar{J}_Q/T$ і $\sigma_s = \left(\bar{J}_Q\cdot\bar{X}_Q + \sum\bar{J}_i\cdot\bar{X}_i + J\,A\right)/T$ - потік і потужність виробництва ентропії, $\bar{X}_Q = -\bar{\nabla}T/T$ - термодинамічна сила, яка спряжена з потоком тепла $\bar{J}_Q$, $\bar{X}_i = \bar{f}_i' - \bar{\nabla}\mu_i'$ - термодинамічна сила, яка спряжена з масовим потоком $\bar{J}_i$ $(\bar{f}_i' = \bar{f}_i'' - \bar{f}_1'',\ i = \overline{2,4})$, $A = \mu_4 - \mu_3$ - термодинамічна сила, що спряжена до скалярного потоку маси J, який характеризує перехід домішкових частинок компоненти з стану 3 у 4 $(i' = \overline{3,4})$.

Термодинамічні потоки і сили пов'язані між собою кінетичними рівняннями, які конкретизовані у лінійному наближенні для анізотропних і ізотропних тіл.

За ключові функції моделі прийнято вектор переміщення $\bar{u} = \bar{r} - \bar{r}_o$, відхилення абсолютної температури $t = T - T_0$ і концентрації домішкових частинок $c_i = C_i - C_i^\circ$ $\left(i = \overline{2,4}\right)$ від їх значень у природньому стані ($s_0 \div T_0$; $\hat{\sigma} = 0$, $\hat{\varepsilon} = 0$; $\mu_i^\circ \div C_i^\circ$ і термодинамічні сили дорівнюють нулеві). Визначальна система рівнянь для ізотропних тіл у лінійному наближенні приймає вигляд

$$s = s_\circ + (C_V/T_\circ)t + (\alpha K/\rho)\varepsilon + \sum a_{(c)i}\, c_i\,,$$

$$\underset{\circ}{\hat{\sigma}} = \left[(K - 2G/3)\varepsilon - K\left(\alpha t + \sum \beta_i\, c_i\right)\right]\hat{g}_\circ + 2G\,\underset{\circ}{\hat{\varepsilon}}\,,$$

$$\mu_i = \mu_i^\circ + a_{(t)i}\, t - (K\beta_i/\rho)\varepsilon + \sum a_{ij}\, c_j\,; \tag{4.2}$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial \tau} = \sum D_{ij}\Delta c_j + D_{(t)i}\Delta t - D_{(\varepsilon)i}\Delta\varepsilon + (-1)^{i}\left(\sum L_j c_j + L_{(t)}\, t + L_{(\varepsilon)}\,\varepsilon\right);$$

$$\frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \tau^2} = \left(\bar{\nabla}\cdot\hat{\sigma}\right)/\rho_0\,,\ \hat{\varepsilon} = \frac{1}{2}\left[\bar{\nabla}\otimes\bar{u} + \left(\bar{\nabla}\otimes\bar{u}\right)^{T}\right],\ Jnk\,\hat{\varepsilon} = \bar{\nabla}\times\left(\bar{\nabla}\times\hat{\varepsilon}\right) = 0;$$

$$(\rho_\circ C_V/T_\circ)\frac{\partial t}{\partial \tau} + \rho_\circ \sum a_{(c)i}\frac{\partial c_i}{\partial \tau} - \alpha K\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} = (\kappa/T)\Delta t + \delta Q_H\,. \tag{4.3}$$

Тут C_V, α, $a_{(c)i}$, K, G, β_i, $a_{(t)i}$, a_{ij} - коефіцієнти матеріалу моделі $\left(i, j = \overline{2,4}\right)$; $D_{(t)i}$, D_{ij}, $D_{(\varepsilon)i}$, L_j, $L_{(t)}$, $L_{(\varepsilon)}$ і κ - кінетичні коефіцієнти; δQ_H - нескомпенсоване тепло, Δ - оператор Лапласа. Дальша лінеаризація здійснена у припущенні, що $t / T_\circ << 1$ і $\delta Q_H \approx 0$.

Сформульовано відповідні моделі початкові і граничні умови.

Запропоновано підхід до введення ефективних механодифузійних характеристик для випадку, коли час релаксації процесів локальних фазових змін стану є нехтовно малим у порівнянні з часами релаксації процесів переносу, тобто

$$\mu_3 = \mu_4 \quad (\bar{\nabla}\mu_3 \neq 0,\ \bar{\nabla}\mu_4 \neq 0). \tag{4.4}$$

З цієї умови, враховуючи вирази для хімічних потенціалів (4.1), знайдено залежність концентрацій c_3, c_4 від $c_{ef} = c_3 + c_4$ та інших ключових функцій. З їх використанням отримано систему рівнянь моделі з ефективними характеристиками. Ці характеристики визначають, зокрема, стаціонарний стан нерівноважної термодинамічної системи при $\tau \to \infty$.

У п'ятому розділі на модельних задачах проведено оцінку нових коефіцієнтів матеріалу моделі твердого розчину, які пов'язані з врахуванням зміни стану домішкових частинок. Досліджено релаксаційні процеси при однорідному напружено-деформованому стані тіла та резонансні явища у шарі.

Приймаємо, що фізичні, конфігураційні і кінематичні властивості базових компонент є однакові ($\mu_1^\circ = \mu_2^\circ = \mu_0^\circ$ і

$\bar{\upsilon}_1 = \bar{\upsilon}_2 = \bar{\upsilon}_0$), стану 1 відповідає швидкий шлях дифузії домішкових частинок, а 2 - повільний, тобто $\overline{D}_1 >> \overline{D}_2$ (при цьому базові компоненти відзначені індексом нуль).

В наближенні теорії слабких розчинів знайдено таку оцінку коефіцієнтів концентраційної і температурної залежності хімічного потенціалу

$$a_{11} = RT/AC_1^\circ + m_{11}^i,\ a_{12} = m_{12}^i,\ a_{21} = m_{21}^i.\ a_{22} = RT/AC_2^\circ + m_{22}^i;$$
$$a_{(t)i} = (R/A)\ln(A_0 C_i/A) \quad (i = \overline{1,2}). \tag{5.1}$$

Тут $R = 8,32 \cdot 10^3$ *Дж/кмоль·град* - універсальна газова постійна; A , A_0 - атомні маси домішок і основи тіла, m_{ij}^i - відомі інтенсивні характеристики системи. Зазначимо, що для характерних значень параметрів $a_{ii} \approx 10^7 + 10^9$ *Дж/кг* .

Для оцінки коефіцієнтів $\beta_i = (\partial\varepsilon/\partial C_i)_{T,\sigma,C_{j\neq i}}$ використано літературні експериментальні дані про енергію активації домішкових частинок і залежність густини тіла від їх концентрації. У випадку твердого розчину $Fe - C$ знайдено $\beta_2 \cong 10^{-2}$ і $\beta_1 < \beta_2$.

Для оцінки кінетичних коефіцієнтів, пов'язаних із зміною стану частинок, розглянуто дві модельні задачі про розтяг стержня кругового поперечного перетину за ізотермічних умов. У першій модельній задачі вважається, що у початковий момент часу до його країв прикладені зовнішні зусилля сталої інтенсивності p , а в другій - для часу $\tau > 0$ осьові переміщення країв. З порівняння отриманих результатів з експериментальними даними про додаткову деформацію довгих дротин з дрібнодисперсних полікристалічних сплавів Fe-C знайдено, що $a_{11} - a_{12} \approx 3,09 \cdot 10^3$ *Дж/кг*. Співставлення цієї величини з оцінкою коефіцієнта a_{11} за формулою (5.1) показує, що коефіцієнт a_{12} є одного порядку з коефіцієнтом a_{11} . Відповідно для кінетичного коефіцієнта знайдено

$$L_a' \cong 5 \cdot 10^{-6}\ кг/Дж \cdot c\ \ (J = L_a'(\mu_2 - \mu_1)).$$

Отримане значення кінетичного коефіцієнта L_a' і величини $a_{11} - a_{12}$ дозволяє оцінити релаксацію напружень як таку, що складає до 2,5% своїх вихідних значень.

Вивчення ефектів внутрішнього тертя у твердих розчинах розглянуто на прикладі шару товщини $2l$ при усталеному зовнішньому гармонічному навантаженні. В умовах масоізоляції дисперсійне рівняння для визначення хвильових чисел задачі розв'язувалось наближено методом розкладу за параметром β_2. Проведено оцінку амплітуд коливань з врахуванням впливу процесів дифузії та змін стану частинок. Показано, що зміщення резонансних частот шару і декременти затухання, в основному, визначаються процесом переходу частинок. Отримані аналітичні вирази використані також для уточнення оцінки кінетичних характеристик моделі.

Для оцінки коефіцієнтів дифузії розв'язано окремі граничні випадки задачі про дифузію домішкових частинок у регулярно неоднорідний (шаруватий) півпростір.

Півпростір $(x \geq 0)$ утворено з перпендикулярних до вільної поверхні $x = 0$ шарів товщиною $2l$ і $2L$ з різних матеріалів, які необмежені у напрямі осі Oz, а у напрямі осі Oy утворюють регулярну (періодичну) структуру.

Матеріал кожного шару є бінарним твердим розчином основної компоненти та дифундуючої домішкової речовини. Концентрації у початковий момент часу приймаються нульовими, а на поверхні $x = 0$ - підтримуються фіксованими. На границі між шарами задаються умови ідеального масового контакту.

Розв'язок задачі досліджено, зокрема, у граничному випадку $l, L \to 0$ і $L/l = n = const$. Розподіл концентрації визначається з відомих законів Фіка при коефіцієнті дифузії

$$D^*_{ef} = \left(1 + nd^x q^*\right)/\left(1 + nq^*\right), \tag{5.2}$$

де $d^x = D^*_2/D^*_1$, D^*_2 і D^*_1 - коефіцієнти дифузії у відповідних шарах; $q^* = c^e_2/c^e_1$ (c^e_2, c^e_1 - рівноважні значення концентрацій при $\tau \to \infty$ за однорідних умов).

Розглянутий випадок відповідає умовам рівноваги (4.4) (або $q = c^e_2/c^e_1 = L_1/L_2$ - константа рівноваги Генрі) при описанні переносу маси з допомогою системи рівнянь гетеродифузії. При цьому ефективний коефіцієнт дифузії буде

$$D_{ef} = \left[1 + d_2 + q(d + d_1)\right]/(1 + q), \tag{5.3}$$

де $d = D_2/D_1$, $d_1 = D_3/D_1$, $d_2 = D_4/D_1$ - безрозмірні коефіцієнти матеріалу тіла.

Вирази для ефективних коефіцієнтів дифузії однакові, якщо покласти $d_1 = d_2 = 0$ і $d^* = d$, $q^* n = q$. Таким чином ефективний коефіцієнт дифузії знаходиться за коефіцієнтами дифузії частинок домішкової речовини у кожному з своїх станів, сталою Генрі та геометричним локальним параметром тіла, який характеризує густину швидкого шляху дифузії. За умов ідеального масового контакту між шарами $\left(q^* = 1\right)$ відповідно маємо $n = q$, $c = (c_1 + nc_2)/(1+n)$.

Шостий розділ присвячений дослідженню механогетеродифузійних процесів у трикомпонентних твердих розчинах при двох шляхах міграції частинок домішкової речовини. На основі системи рівнянь механогетеродифузії (4.2) і (4.3) розглянуто характерні постановки початково-крайових задач для шару, які відповідають фізичним умовам одно- і двостороннього насичення, фільтрації домішок через мембрану та дегазації при чистому згині.

Вважається, що у початковий момент часу $\tau = 0$ в області шару $0 \le x \le l$ товщини l, основи якого є вільні від зовнішнього механічного навантаження, а краї $(y,z \to \pm\infty)$ нерухомі, задано неоднорідний розподіл концентрацій домішкової речовини $c_i^*(x)$ $\left(i = \overline{1,2}\right)$. На поверхнях шару $x = 0,l$ концентрації (в загальному випадку хімічні потенціали) домішкових частинок змінюються в часі по заданому закону $c_i\big|_{x=0} = c_i^\Sigma(\tau)$, $c_i\big|_{x=l} = c_i^{\Sigma *}(\tau)$.

З використанням скінченного сінус-перетворення Фур'є і перетворення Лапласа за часом знайдено загальне представлення розв'язку задачі. Зокрема, коли $c_i(x,0) = 0$ $(0 < x < l)$, а $c_i^{\Sigma *}(\tau) = 0$, $c_1^\Sigma(\tau) = \eta c_0^\Sigma$, $c_2^\Sigma(\tau) = (1-\eta)c_0^\Sigma$ $(1 > \eta > 0)$, то сума відхилень концентрацій $c(x,\tau)$ і напруження σ_{yy} (σ_{zz}) мають таку структуру

$$c = c_0^\Sigma(1 - x/l) + \left(q_\eta^* c_0^\Sigma D^{(0)}/D_{ef}\right) f(x) + \tilde{c}(x,\tau),$$

$$\sigma_{yy} = -2G\xi^0 c_0^\Sigma \left\{\beta^\eta(1 - x/l) + \left(q_\eta^* D^\beta/D_{ef}\right) f(x) - \tilde{\sigma}(x,\tau)\right\}. \quad (6.1)$$

Тут $f(x) = 1 - x/l - sh\eta_\circ(1 - x/l)/sh\eta_\circ$ - функція, що визначає асимптотичну поведінку розв'язку; $\tilde{c}(x,\tau)$, $\tilde{\sigma}(x,\tau)$ - відомі функції (при $\tau \to \infty$ прямують до нуля); q_η^*, β^η, $D^{(0)}$, $\eta_\circ$, D^β -

характеристики задачі, які визначаються за коефіцієнтами системи рівнянь (4.2), (4.3).

На рис.7.1а і 7.1б показані характерні розподіли концентрації $c(x,\tau)$ і концентраційних напружень σ_{yy} (σ_{zz}). Тут використано характерні значення матеріальних характеристик тіла, які відповідають твердим розчинам алюмінію, цинку, срібла у міді; водню, вуглецю, алюмінію у залізі; міді у германії, тощо, при $0,7 \div 0,8$ температури плавлення. Криві 1-5 відповідають

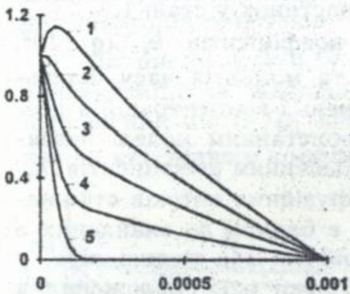

Рис.7.1а

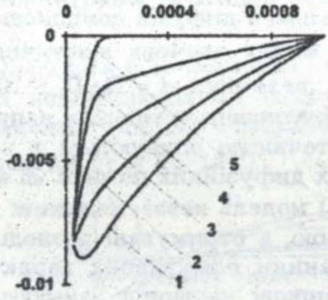

Рис.7.1б

значенням $\eta = 1$; 0,75; 0,5; 0,25; 0 при $K = 10^{11}\ H/м^2$, $G = 4 \cdot 10^{10}\ H/м^2$, $\beta_1 = 5 \cdot 10^{-3}$, $\beta_2 = 5 \cdot 10^{-2}$, $q = 2 \cdot 10^1$, $d = 5 \cdot 10^{-3}$, $\tau^* = 1,5 \cdot 10^{-2}$, $k_2 = 5 \cdot 10^{-5}\ c^{-1}$, $D_2 = 5 \cdot 10^{-12}\ м^2/c$, $D_3 = D_4 = 0$, $l = 10^{-3}\ м$. По осі ординат відкладено величину c / c_0^{Σ} і $\sigma_{yy}(Gc_0^{\Sigma})^{-1}$, а по осі абсцис відраховується просторова координата x ($\tau^* = k_2\tau$).

Розглянуто два граничних випадки гетеродифузії, а саме, коли виконується умова (4.4), то приходимо до моделі з ефективними механодифузійними параметрами

$$c_1(x,\tau) = c_{ef}(x,\tau)/(1+q),\ c_2(x,\tau) = qc_{ef}(x,\tau)/(1+q). \qquad (6.2)$$

$$\frac{\partial c_{ef}}{\partial \tau} = D_{ef}\frac{\partial^2 c_{ef}}{\partial x^2}, \quad \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = -2G\xi\beta_{ef}c_{ef}. \qquad (6.3)$$

Тут $\beta_{ef} = (\beta_1 + q\beta_2)/(1+q)$ - ефективний коефіцієнт концентраційної зміни об'єму, $\xi = 3K(3K+4G)^{-1}$.

У другому випадку нехтуємо переходом частинок з одного шляху дифузії на інший і розглядаємо модель невзаємодіючих дифузійних потоків. Концентрації домішок $c_1(x,\tau)$ у першому і $c_2(x,\tau)$ другому стані та напруження $\sigma^{(1)}_{yy}(x,\tau)$ і $\sigma^{(2)}_{yy}(x,\tau)$ знаходимо незалежно з розв'язку рівнянь (6.2) і (6.3), приймаючи, що $D_{ef} = D_1$, $\beta_{ef} = \beta_1$ і $D_{ef} = D_2$, $\beta_{ef} = \beta_2$, відповідно.

Встановлено, що значення величин напружень і концентрацій, знайдені на основі ефективних характеристик матеріалу моделі, є більші за відповідні значення, отримані з точного розв'язку, за винятком області близької до поверхні $x = l$, де визначальною є дифузія домішкових частинок у стані 1.

Для малих значень кінетичних коефіцієнтів k_i ($q \geq 10^2$, $k_1 < 10^{-3}$), величини $d = D_2/D_1 \leq 10^{-2}$ та моментів часу, близьких до початкового, розподіли напружень і концентрацій з достатньою точністю описуються з використанням моделі невзаємодіючих дифузійних потоків. Зі збільшенням коефіцієнтів k_i ($k_1, k_2 < 1$) модель невзаємодіючих дифузійних потоків стає незастосовною, а отримувані розподіли є ближчі до знайдених з використанням ефективних характеристик або моделі тіла, у якій домішкові частинки займають тільки одне положення в фізично малому елементі, що відповідає стану 2.

Розглянуто, також, вплив напружено-деформованого стану при чистому згині шару на процеси гетеродифузії домішкової речовини.

У сьомому розділі досліджено напружено-деформований стан кулі за умов її дифузійного насичення та дегазації.

При дифузійному насиченні прийнято, що у початковий момент часу ($\tau = 0$) в області кулі ($r \leq R$) радіуса R відхилення концентрацій нульові $c_1(r,0) = c_2(r,0) = 0$, а на поверхні шару $r = R$, яка вільна від зовнішніх навантажень, з моменту $\tau = 0 + 0$, підтримуються задані постійні значення хімічних потенціалів частинок домішкової речовини у кожному стані $\mu_i(R,\tau) = \mu_i^{\Sigma}$ $\left(i = \overline{1,2}\right)$. Розв'язок рівнянь (4.2),(4.3) при сформульованих умовах подавався у вигляді степеневих рядів за безрозмірним параметром β_2.

У першому наближенні за параметром β_2 маємо

$$c(r,\tau) = c^{\Sigma} + q_c^{*} D^{(0)} h(r)/r + \bar{c}^{(0)}(r,\tau); \qquad (7.1)$$

$$\sigma_{\alpha\alpha} = 2G\xi\beta_2\left[q_c^{*} D^{\beta} h_{\theta}(r) + \sigma_{\theta}^{(1)}(r,\tau)\right], \quad \sigma_{rr} = 2G\xi\beta_2\left[q_c^{*} D^{\beta} h_{r}(r) + \sigma_{r}^{(1)}(r,\tau)\right]. \qquad (7.2)$$

Тут $c^{\Sigma} = c_1^{\Sigma} + c_2^{\Sigma}$ - значення концентрації домішки на границі; $q_c^* = \left(qc_1^{\Sigma} - c_2^{\Sigma}\right)/(1+q)$ - коефіцієнт відхилення розподілу домішок між станами 1 і 2 від рівноважного на поверхні кулі; $h(r) = f(R+r)$, $h_0(r)$, $h_r(r)$ - функції, які визначають асимптотику розв'язку; $\bar{c}^{(0)}$, $\sigma_0^{(1)}$, $\sigma_r^{(1)}$ - відомі функції, що визначають кінетику процесів і при $\tau \to \infty$ прямують до нуля.

Досліджено механодифузійні процеси у моделі з ефективними механодифузійними параметрами та моделі невзаємодіючих дифузійних потоків

На рис.8.1 ($\eta = 0,5$) і рис.8.2 ($\eta = 1$) показана залежність концентрації та відповідних концентраційних напружень від відношення $d = D_2/D_1$ коефіцієнтів дифузії домішкових частинок та кінетичного коефіцієнта k_1 ($r^* = 1,5 \cdot 10^{-2}$).

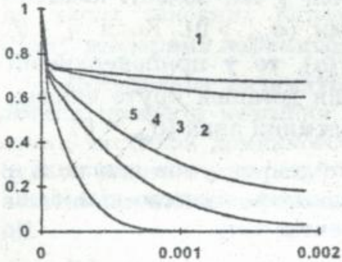

Рис.8.1.*а*.

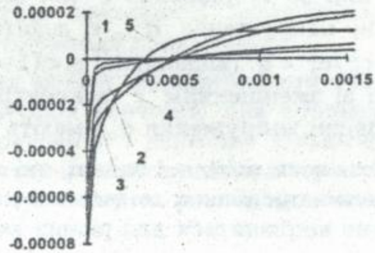

Рис.8.1.*б*.

Тут крива 1 - $d = 5 \cdot 10^{-5}$, 2 - $d = 10^{-4}$, 3 - $d = 5 \cdot 10^{-4}$, 4 - $d = 10^{-3}$, і 5 - $d = 5 \cdot 10^{-3}$ ($k_1 = 10^{-4}$ 1/с, $D_2 = 5 \cdot 10^{-14}\ м^2/с$).

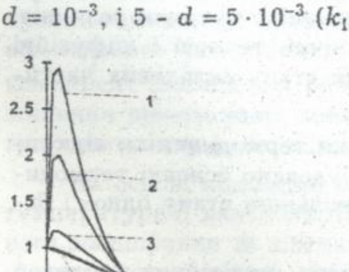

Рис.8.2.*а*.

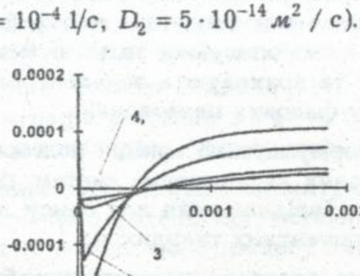

Рис.8.2.*б*.

Тут крива 1 - $q = 2 \cdot 10^3$, 2 - $q = 10^3$, 3 - $q = 2 \cdot 10^2$, 4 - $q = 2 \cdot 10^1$ і 5 - $q = 2$ ($d = 5 \cdot 10^{-3}$). Граничні умови для концентрацій подавались у вигляді $c_1^{(0)}(R,\tau) = \eta c^\Sigma$, $c_2^{(0)}(R,\tau) = (1-\eta)c^\Sigma$, де $1 \ge \eta \ge 0$ - безрозмірний параметр ($c^\Sigma = 10^{-4}$ - сумарна концентрація), і, якщо значення параметрів не вказано безпосередньо, то вони рівні наведеним вище при поясненні рис.7.1. По осі абсцис відкладений радіус кулі, а по осі ординат величина c / c^Σ у рисунках, що ілюструють розподіли концентрацій, або величина $\sigma_{\varphi\varphi} G^{-1}$ у рисунках, які показують розподіли напружень.

Основні якісні відмінності пов'язані з асимптотично нелінійною залежністю від змінної r розв'язків (7.1) і (7.2) при $\tau \to \infty$. Так, якщо $q_c^* > 0$, тобто $c_1^\Sigma / c_2^\Sigma > q$ (або $\eta > (1-\eta)q$), то у приповерхневій області кулі значення концентрації буть більшими ніж на її поверхні. У той же час у цій області концентраційні напруження $\sigma_{\varphi\varphi}$ є додатніми ($\sigma_{\varphi\varphi} > 0$). Коли $q_c^* < 0$, тобто $c_1^\Sigma / c_2^\Sigma < q$ (відповідно $\eta < (1-\eta)q$), то у приповерхневій області зі зменшенням r концентрація домішок круто спадає, а відповідні напруження $\sigma_{\varphi\varphi}$ мають відємний знак ($\sigma_{\varphi\varphi} < 0$).

Розв'язки вихідної задачі, які знайдені за умов дегазації з використанням різних модельних наближень, суттєво кількісно та якісно відрізняться для різних моментів часу.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

Розроблено континуально-темодинамічний підхід до побудови фізико-математичних моделей механіки твердих розчинів, які кількісно описують зв'язані механічні, теплові і дифузійні процеси та враховують локальні зміни стану складових частинок типу фазових перетворень.

Сформульовано вихідні положення термодинаміки відкритих твердих деформівних систем, побудовано основні термодинамічні співвідношення для опису локального стану одно- і багатокомпонентних твердих тіл.

Запропоновано методику побудови нелінійних моделей термомеханіки бінарних систем, обгрунтувано одноконтинуумні наближення, розглянуто моделі механіки пружніх тіл з мікродефектами.

Розроблено основи механіки твердих розчинів з локальними фазовими змінами стану домішковх компонент та методику введення ефективних механодифузійних характеристик.

У результаті проведених досліджень можна зробити наступні висновки.

Запропонований варіант аксіоматизації термодинаміки відкритих твердих деформівних систем дозволяє сформулювати рівняння Ейлера, Гіббса і рівнянь стану для питомих величин або густин макроскопічних параметрів стану, а також, дає можливість записати умову термодинамічної рівноваги твердого та рідкого стану системи з використанням тензорів хімічного потенціалу кожної з підсистем.

Показано, що врахування ефектів відносного пружного зміщення частинок компонент бінарної системи в одноконтинуумному наближенні може бути здійснене шляхом включення до числа основних параметрів локального термодинамічного стану тензорних параметрів пружньої поляризації.

Побудована математична модель механотермогетеродифузійних процесів механіки твердих розчинів, яка враховує два стани частинок домішкової речовини і дозволяє кількісно описувати відомі з літератури експериментальні дані про особливості напружено-деформованого стану та розподілу концентрації.

Сформульовано умови застосовності запропонованих моделей наближеного опису механогетеродифузійних процесів з використанням ефективних характеристик матеріалу та без врахування взаємодії дифузійних потоків. Знайдено вираз для ефективного коефіцієнта дифузії за коефіцієнтами дифузії компонент домішкової речовини, сталою Генрі ($q = c_2^e/c_1^e$ - відношення рівноважних концентрацій у станах 2 і 1) та об'ємною густиною стану 1, що відповідає швидкому шляху дифузії.

На основі кількісної оцінки коефіцієнтів концентраційної і температурної залежності хімічного потенціалу, концентраційного розширення та кінетичного коефіцієнта процесу зміни стану частинок показано, що релаксація напружень або додаткова деформація (може складати до 2,5% своїх вихідних значень), як і зміщення резонансних частот шару і декремент затухання, в основному, визначаються процесом локального переходу домішкових частинок з одного стану в інший.

На прикладі шару і кулі досліджено особливості напружено-деформованого стану твердих розчинів з врахуванням впливу мікроструктури на процеси масопереносу.

Показано, що параметрами, які визначають концентраційні напруження у тілі, є стала Генрі q , характеристика відхилення концентрацій від умови рівноваги на поверхні тіла q^* ($q^* \approx c_2^{v}/c_1^{v} - q$) та відношення коефіцієнтів дифузії $d = D_2/D_1$. У цьому зв'язку вихідні рівняння у просторово-часових змінних $(k_2/D_1)^{1/2}\,\bar{r}$, $k_2\tau$, приводяться до безрозмірної форми з природніми критеріальними характеристиками.

У випадку дифузійного насичення шару і фільтрації домішок розрахункові значення концентраційних напружень є стискуючі і досягають своїх максимальних значень на поверхні для $q_\eta^* < 0$, а коли $q_\eta^* > 0$, то у внутрішніх точках області тіла.

У випадку кулі, якщо $q_c^* < 0$, то концентраційні кільцеві напруження у приповерхневій області є завжди від'ємними і найбільшими на поверхні, а коли $q_c^* > 0$, то на поверхні ці напруження розтягуючі, з віддаленням від поверхні стають від'ємними і досягають найбільшої величини у приповерхневій області.

В умовах дегазації кулі якісні і кількісні особливості концентраційних напруженнь проявляються в початкові моменти часу. При цьому розподіли концентрацій домішкової речовини якісно і кількісно узгоджуються з відомими з експерименту.

Модель з ефективними характеристиками описує стаціонарний стан системи та наближено гетеродифузію при коефіцієнтах k_i близьких до одиниці

Модель невзаємодіючих дифузійних потоків для малих значень кінетичних коефіцієнтів k_i ($q >> 1$, $k_1 < 10^{-3}$ $1/c$), величині $d \le 10^{-2}$ та моментів часу близьких до початкового, задовільно описує розподіли напружень і концентрацій.

РОБОТИ, В ЯКИХ ОПУБЛІКОВАНІ ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ ДИСЕРТАЦІЇ

1 Чапля Є.Я. Влияние поликристалической структуры на диффузию в слое // Физ.-хим. мех. материалов. - 1981. - №3. - С.119-122.

2 Бурак Я.Й., Чапля Є.Я. Вихідні положення математичної моделі гетеродифузного переносу радіонуклідів у приповерхневих шарах Землі//Доп. АН України. - 1993. - №10. - С.59-63.

3 Бурак Я.Й., Чапля Є.Я. Континуальні моделі нелінійної моделі термомеханіки бінарних систем//Фіз.-хім. мех. матеріалів. - 1995. - №4. - С.7-15.

4 Бурак Я.Й., Третьяк В.І., Чапля Є.Я. До континуально-термодинамічного опису деформівних твердих тіл//Доп. НАН України. - 1995. - №9. - С.24-27.

5 Бурак Я.Й., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Про вертикальну міграцію радіонуклідів у грунті//Доп. НАН України. - 1995. - №10. - С.34-37.

6 Савула Я.Г., Кухарський В.П., Чапля Є.Я. Чисельне моделювання теплопереносу через тонкий криволінійний шар//Доп. НАН України. - 1995. - №11. - С.30-33.

7 Burak Ya., Chaplia Ye. Mechanothermodiffusion process in locally heterogeneous multicomponent media//Zeszyty naukowe politechniki Slaskiej. -Seria: Mechanika. -Z.122. -N.1267. -1995. -S. 43-48.

8 Burak Ya., Chaplia Ye. Mechanothermodiffusive processes in local microscopic structure bodies/In mat.: Vth International sympozium on creep and compled processes. - Bialystok: Bialystok technical university, 1995. - P.125-130.

9 Burak Ya., Chaplia Ye., Chernukha O. Problems of mechanothermodiffusive processes modelling and optimization in many-phases continuum systems/In mat.: II Szkola Geomechaniki (miedz. konf.). - Gliwice: Polit. Slaska, 1995. - P.343-351.

10 Burak Ya., Chaplia Ye., Gera B. Thermodynamic models and investigation methods of heterophase multicomponent systems/In mat.: 35 Sympozjon modelowanie w mechanice (Zesz. nauk. kated. mech. tech. Polit. Slaskiej). - Gliwice: Polit. Slaska, 1996. - Z.2. - P.29-34.

11 Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Кінетика переносу домішок при локальній зміні стану частинок (1.Модельні представлення, гетеродифузія двома шляхами). - Львів, 1995. - 44 с. - (Препрінт/ НАН України. Центр матем. моделювання ІППММ; №3-93).

12 Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Кінетика переносу домішок при локальній зміні стану частинок (2. Гетеродифузія двома шляхами у тілі з пастками). - Львів, 1995. - 28 с. - (Препрінт/ НАН України. Центр матем. моделювання ІППММ; №5-93).

13 Чапля Є.Я. Континуально-термодинамічний опис відкритих деформівних систем. Вихідні положення. - Львів, 1995. - 56 с. - (Препрінт/НАН України. Центр матем. моделювання ІППММ; №12-95).

14 Чапля Є.Я. Нелінійні континуальні моделі бінарних систем. - Львів, 1995. - 40 с. - (Препрінт/НАН України. Центр матем. моделювання ІППММ; №13-95).

15 Чапля Є.Я. Теорія твердих розчинів з локальними фазовими змінами. - Львів, 1995. - 59 с. - (Препрінт/НАН України. Центр матем. моделювання ІППММ; №14-95).

16 Чапля Є.Я. Механодифузійні процеси у твердих розчинах. Оцінка коефіцієнтів. - Львів, 1995. - 41 с. - (Препрінт/ НАН України. Центр матем. моделювання ІППММ; №15-95).

17 Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Механодифузійні процеси у твердих розчинах. Дифузійне насичення кулі. - Львів, 1995. - 28 с. - (Препрінт/НАН України. Центр матем. моделювання ІППММ; №19-95).

18 Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Механодифузійні процеси у твердих розчинах. Дифузія в шарі. - Львів, 1995. - 40 с. - (Препрінт/ НАН України. Центр матем. моделювання ІППММ; №20-95).

19 Чапля Е.Я., Бортник Е.Н. Оценка параметров гетеродиффузии примесей в телах мелкодисперсной структуры. - В кн.: Матер. II-ой конф. молод. ученых Ин-та прикл. пробл. мех. и мат. АН УССР. Ч.2, Львов, 1985. - С.187-191 (Рукоп. деп. в ВИНИТИ 17.02.87 №1089-В87Деп).

20 Терентьев А.Д., Третьяк В.И., Чапля Е.Я. К термодинамическому описанию упругих неоднородных тел//Тез. докл. II Всес. конф. по мех. неоднор. структур, Львов, 17-19 сент. 1987г. - Львов, 1987, Ч.1. - С.269-270.

21 Чапля Е.Я. Математическая модель переноса вещества в деформируемых дисперсных телах//Тез. докл. III Всес. конф. по мех. неоднор. структур, Львов, 17-19 сент. 1991 г. - Львов, 1991, Ч.2. - С.381.

22 Burak Ya., Chaplia Ye. Continuum thermodynamics approach to the mathematic modelling of transfer processes in multicomponent finely dispersive media//Summ. of accept. papes Int. AMSE conf. "Appl. modelling and simulation", Lviv, 30 sept.-2 oct. 1993. - Lviv, 1993. - P.108-109.

23 Бурак Я.Й., Чапля Є.Я. Про один варіант теорії багатокомпонентних двохфазних систем//Тез. докл. Укр. конф. "Моделирование и исследование устойчивости систем", Киев, 15-19 мая 1995 г. - Киев, 1995. - С.28.

24 Чапля Є.Я. Континуально-термодинамічний підхід до побудови математичних моделей переносу в багатокомпонентних неоднофазних середовищах//Тез. доп. IV Міжн. конф. з мех. неоднор. структур, Тернопіль, 19-22 вересн. 1995 р. - Тернопіль, 1995. - С.188.

25 Бурак Я.Й., Чапля Е.Я. Термодинамическая модель механики бинарных систем с локальными фазовыми превращениями //Сб. аннот. докл. IX Конф. по прочн. и пластичности, Москва, 22-26 янв. 1996 г. -Киев-Москва, 1996. - С.22.

Chaplia Ye.Ya. Continuum-thermodynamic bases of solid solution mechanics taking into account local changes of component state.

The thesis presented for a Doctor's degree (physics and mathematics); speciality: 01.02.04 - mechanics of deformable solid bodies; Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics of National Academy of Sciences of Ukraine, L'viv, 1996.

The scientific works (37 position) in which continuum-thermodynamic approach to constructing physico-mathematical models of mechanics allowing at quantitative discription of spatial distributed interrelated mechanical, heat and diffusion processes to take into account local changes of state constituent component of phase transformation type are depended. Starting continuum-thermodynamic correlations for open solid deformed systems are formulated. One-continuum approaches for binary system are motivated. On the basis of the local-gradient approach the model for the body with microdefects is suggested. The bases of mechanics of solid solutions with local phase state changes of their components are created. The approach to introducing effective mechano-diffusion characteristics is suggested. Mechanicalheterodiffusion processes in three component solid solution

under two conditions of component admixture particles in the bodies of the simplest geometry configuration are investigated.

The results of this work have both theoretical and practical significance in application to the prediction of functional properties of machine details and construction elements of multicomponent complex structures.

Чапля Е.Я. Континуально-термодинамические основы механики твердых растворов с учетом локальных изменений состояния компонент.

Диссертация на соискание ученой степени доктора 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, 1996.

Защищается 37 научных работ, в которых предложен и разработан континуально-термодинамический подход к построению физико-математических моделей механики, позволяющих при количественном описании пространственно распределенных взаимосвязанных механических, тепловых и диффузионных процессов учитывать локальные изменения состояния составляющих компонент типа фазовых превращений. Сформулированы исходные континуально-термодинамические соотношения для открытых твердых деформируемых систем. Обоснованы одноконтинуумные приближенния для бинарных систем. На основании локально-градиентного подхода предложена модель для тела с микродефектами. Разработаны основы механики твердых растворов с локальными фазовыми изменениями состояния их компонент, предложен подход к введению эффективных механодифузионных характеристик. Исследовано механогетеродиффузионные процессы в трехкомпонентных твердых растворах при двух состояниях частиц примесных компонент в телах простейшей геометрической конфигурации. Результаты работы имеют теоретическое и практическое значение в применении к прогнозированию функциональных свойств деталей машин и элементов конструкций многокомпонентных материалов сложной структуры.

Ключові слова: механіка твердих розчинів; термодинаміка деформівних систем; концентраційні напруження; тіла з мікроструктурою; локальні зміни стану компонент; пружня поляризація; механогетеродифузійні процеси.

Чапля Євген Ярославович

Континуально-термодинамічні основи механіки твердих розчинів з врахуванням локальних змін стану компонент

Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук

Підп. до друку 11.11.1996 Формат 60х84/16 Папір офсет. №2
Друк офс. Ум. друк. арк. 2,0 Ум. ф.-в. 2,0 Обл.-вид. арк. 2,15
Зам. №121 Тираж 100 прим. Ціна: безкоштовно

Ротапринт Львівської наукової бібліотеки ім. В.Стефаника НАН України;
290005, Львів 5, вул. Лермонтова, 15