ПМТФ, № 2, 1965

ДИФФУЗИОННАЯ ТЕОРИЯ НЕУПРУГОСТИ МЕТАЛЛОВ

Я. С. Подстригач

(Львов)

Идея о перераспределении атомов в процессе деформирования металлов была высказана впервые в работах В. С. Горского, которые легли в основу диффузионной теории последействия. Эта идея получила развитие в исследованиях С. Т. Конобеевского, посвященных изучению влияния неравномерности напряженного состояния на диффузию при изотермических процессах. Дальнейшее развитие теории влияния напряженного состояния на процесс диффузии в твердых растворах содержится в работах [1,2]. В ряде исследований Б. Я. Пинеса были развиты основы диффузионной теории ползучести металлов [3]. Общие линейные дифференциальные уравнения, учитывающие взаимодействие между процессами диффузии, теплопроводности и деформации, вытекающие из принципов термодинамики необратимых процессов, выведены в работе [4].

Следует заметить, однако, что во всех известных нам исследованиях диффузионные процессы связывались лишь с градиентом первого инварианта тензора напряжения (среднего давления), благодаря чему все закономерности, обусловленные необратимостью физических процессов, в описываемых твердых телах, по существу не отличались от закономерностей, присущих жидкостям. В частности, диффузионные процессы обусловливали релаксацию только среднего давления, в то время как девиатор тензора напряжения оставался термодинамически устойчивым.

Этот факт объясняется, в частности, тем, что физическое состояние твердого тела, как и жидкости, характеризовалось скалярной величиной — плотностью массы. Между тем, сопротивление твердых тел касательным напряжениям в состоянии механического равновесия существенно отличает их от жидкостей, в которых касательные напряжения, в соответствии с существующими моделями, могут возникать лишь в результате механического движения. Поэтому в общем случае деформации твердого тела изотропия в распределении его массы может быть нарушена. Отсюда следует, что физическое состояние твердого тела должно характеризоваться уже не скалярной величиной плотности ρ, а некоторой тензорной величиной ρ.

Исходя из этих соображений, ниже методами механики сплошной среды и термодинамики необратимых процессов [5,6], выводится система дифференциальных уравнений и краевых условий для определения состояния некоторой теоретической модели металлических тел (последние трактуются как твердые изотропные растворы). Показано, что известные реологические соотношения между тензорами напряжения, деформации и их скоростями, выведенные на основе общих положений термодинамики необратимых процессов без привлечения каких-либо модельных представлений, вытекают из предлагаемой диффузионной теории как частный случай, при условии, что необратимость процессов определяется только наличием потоков через поверхность тела, а необратимость, связанная с потоками внутри тела, не учитывается.

1. Тензор плотности. Исходные уравнения механики сплошной среды. Твердое тело в дальнейшем будем трактовать как сплошную среду, заполняющую часть или все пространство, в котором установлена декартова прямоугольная система координат $x_1x_2x_3$.

Рассмотрим в начальном состоянии две бесконечно близкие малые частицы среды, центры масс которых размещены в точках M и M_1. Полагая в начальном состоянии $MM_1 = dl_0$, построим на этом отрезке как на ребре субстанциональный куб объемом $dV_0 = (dl_0)^3$, содержащий массу dm, и определим плотность ρ_0 и удельный объем v_0 в точке M, как обычно, соотношениями

$$\rho_0 = dm \, / \, dV_0, \qquad v_0 = dV_0 \, / \, dm \tag{1.1}$$

Обозначив через $\mathbf{l}$ единичный вектор в направлении MM_1, назовем элементарным объемом тела в точке M в направлении $\mathbf{l}$ величину $dV_l = {}^1/_3(dl)^3$, где dl — расстояние между рассматриваемыми двумя частицами среды в любом состоянии.

Плотность ρ_l и удельный объем v_l тела в точке M в направлении $\mathbf{l}$ определим соотношениями

$$\rho_l = dm \,/\, dV_l, \qquad v_l = dV_l \,/\, dm \tag{1.2}$$

В силу принятых определений получаем

$$\rho_l = \rho_0 \left({}^1/_3\delta_{ij} - e_{ij}\right) \cos(l, x_i) \cos(l, x_j)$$

$$v_l = \rho_0^{-1} \left({}^1/_3\delta_{ij} + e_{ij}\right) \cos(l, x_i) \cos(l, x_j) \tag{1.3}$$

Здесь компоненты e_{ij} тензора малой деформации связаны с компонентами u_i вектора перемещения соотношениями

$$e_{ij} = {}^1/_2 \left(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i\right) \tag{1.4}$$

Из (1.2) — (1.4) следует, что в рассматриваемом случае плотность и удельный объем тела в точке характеризуются симметричными тензорами второго ранга ρ и $\mathbf{v}$, компоненты которых

$$\rho_{ij} = \rho_0 \left({}^1/_3\delta_{ij} - e_{ij}\right), \qquad v_{ij} = \rho_0^{-1} V_{ij} \qquad \left(V_{ij} = {}^1/_3\,\delta_{ij} + e_{ij}\right) \tag{1.5}$$

где δ_{ij} — символ Кронекера.

Тензоры ρ и $\mathbf{v}$ будем называть соответственно тензором плотности и тензором удельного объема тела в точке M. Величины

$$\rho = \rho_{\alpha\alpha}, \qquad v = v_{\alpha\alpha} = \rho_0^{-1} V_{\alpha\alpha} \tag{1.6}$$

представляют собой среднюю объемную плотность и средний удельный объем тела в точке M. Отметим, что тензор V_{ij} из иных соображений был введен ранее в работе [2].

Поток массы $\mathbf{J}$ определим как тензор третьего ранга, полученный путем диадного умножения вектора скорости $\mathbf{w}$ на тензор плотности ρ

$$\mathbf{J} = \mathbf{w}\rho \qquad (J_{ijk} = w_i \rho_{ik})$$

При этом будем иметь следующее уравнение сохранения массы

$$d\rho \,/\, d\tau + \rho \operatorname{div} \mathbf{w} = 0 \qquad (\tau \text{ — время}) \tag{1.7}$$

В результате свертывания (1.7) в соответствии с (1.6) получаем

$$d\rho \,/\, d\tau + \rho \operatorname{div} \mathbf{w} = 0 \tag{1.8}$$

Для растворов, исходя из уравнений сохранения для каждого из компонентов, легко получить

$$d\mathbf{c}_k \,/\, d\tau + \operatorname{div} \mathbf{J}_k = 0 \quad (k = 1, \ldots n) \qquad (\mathbf{c}_k = \rho_k \,/\, \rho, \ \mathbf{J}_k = (\mathbf{w}_k - \mathbf{w})\,\rho_k) \tag{1.9}$$

Здесь ρ_k — тензор плотности, $\mathbf{w}$ — скорость центра масс, а $\mathbf{w}_k$ — скорость компонента k. Наряду с (1.9) будем пользоваться также двумя другими уравнениями механики сплошной среды, а именно, уравнением движения и уравнением сохранения энергии

$$\operatorname{div} \sigma = \rho \frac{d\mathbf{w}}{d\tau}, \qquad \rho \frac{du}{d\tau} = -\operatorname{div} \mathbf{J} + \sigma_{ij} \frac{de_{ij}}{d\tau} \tag{1.10}$$

Здесь u — внутренняя энергия единицы массы, $\mathbf{J}$ — вектор теплового потока, σ — тензор напряжения с компонентами σ_{ij}.

2. Внутренняя энергия. Уравнения состояния. Изменение внутренней энергии единицы массы жидкой смеси определяют уравнением Гиббса [6]

$$du = Tds - p\,dv + \mu_k\,dc_k \tag{2.1}$$

Здесь T — температура, s — энтропия единицы массы, p — давление, v — средний удельный объем, μ_k — химический потенциал, а c_k — концентрация компонента k.

Если же речь идет о твердом теле, то вместо (2.1) следует записать

$$du = Tds + \sigma_{ij}dv_{ij} + \mu_{ij}^{(k)}dc_{ij}^{(k)} \tag{2.2}$$

В частности, для двукомпонентного раствора, учитывая (1.5), (1.6), получим

$$du = Tds + \rho_0^{-1}\sigma_{ij}de_{ij} + \mu_{ij}dc_{ij} \tag{2.3}$$

Здесь μ_{ij} — компоненты тензора химического потенциала, а c_{ij} — компоненты тензора концентрации растворенного вещества.

Имея уравнения (1.9), (1.10) и (2.3), уже нетрудно, пользуясь теорией, развитой в работах [7,8], получить все необходимые соотношения для определения состояния тела в любой момент времени и в любой точке при малых отклонениях от состояния равновесия.

В силу (2.3) для свободной энергии f единицы массы изотропного раствора можем записать

$$\begin{gathered}\rho_0(f - f_0) = -{}^1/_2 cT^{-1}t^2 - \alpha K e_{\alpha\alpha}t + {}^1/_3\,({}^1/_2\,\beta c_{\alpha\alpha}^2 + \\ + \gamma c_{\alpha\beta}{}^2 - bc_{\alpha\alpha}t) + {}^1/_2\lambda e_{\alpha\alpha}{}^2 + Ge_{\alpha\beta}{}^2 - \lambda' e_{\alpha\alpha}c_{\alpha\alpha} - 2G'e_{\alpha\beta}c_{\alpha\beta}\end{gathered} \tag{2.4}$$

Здесь f_0 — значение свободной энергии в начальном состоянии; t, c_{ij} — изменения температуры и компонент тензора концентрации по отношению к начальному состоянию, c — теплоемкость, α — коэффициент температурной деформации, λ', G' — величины, связанные с коэффициентами концентрационной деформации, λ, G — упругие характеристики Ляме, K — объемный модуль упругости, β, γ, b определяются как первые производные компонент тензора химического потенциала по компонентам тензора концентрации и температуре при постоянной деформации. Значения введенных материальных характеристик зависят, естественно, от вида термодинамического процесса.

Из (2.4) вытекают следующие уравнения состояния:

$$\rho_0 s = cT^{-1}t + {}^1/_3 bc_{\alpha\alpha} + \alpha K e_{\alpha\alpha} \tag{2.5}$$

$$\sigma_{ij} = \lambda e_{\alpha\alpha}\delta_{ij} + 2Ge_{ij} - (\lambda' c_{\alpha\alpha}\delta_{ij} + 2G'c_{ij}) - \alpha K t\delta_{ij} \tag{2.6}$$

$$\rho_0\mu_{ij} = {}^1/_3\,(\beta c_{\alpha\alpha}\delta_{ij} + 2\gamma c_{ij} - bt\delta_{ij}) - (\lambda' e_{\alpha\alpha}\delta_{ij} + 2G'e_{ij}) \tag{2.7}$$

3. Возникновение энтропии. Феноменологические соотношения. Для составления уравнения баланса энтропии воспользуемся уравнениями (1.9), (1.11) и (2.3). Исключая из них u и c_{ij}, после очевидных преобразований получим

$$\rho\,\frac{ds}{d\tau} + \operatorname{div}\mathbf{J}_s = \sigma_s$$

$$\left(T\sigma_s = J_\alpha X_\alpha + J_{\alpha\beta\gamma}X_{\alpha\beta\gamma}, \quad X_i = -\frac{1}{T^2}\nabla_i T, \quad X_{ijk} = -T\,\nabla_i\frac{\mu_{jk}}{T}\right). \tag{3.1}$$

Здесь $\mathbf{J}_s$ — вектор потока энтропии, а σ_s — возникновение энтропии, X_i, X_{ijk} — компоненты термодинамических сил, ∇_i — оператор дифференцирования по x_i.

В случае малых термодинамических потоков, пренебрегая теплотой переноса, для изотропного тела в нашем случае можно записать

$$\sigma_s = {}^1/_2 L_q X_\alpha{}^2 + L_1 X_{\beta\alpha\alpha} X_{\beta\gamma\gamma} + L_2 X^2{}_{\alpha\beta\gamma} \tag{3.2}$$

При этом феноменологические соотношения получаются в виде

$$J_i = L_q X_i, \qquad J_{ijk} = L_1 X_{i\alpha\alpha} \delta_{jk} + 2L_2 X_{ijk} \tag{3.3}$$

Подставляя в (3.3) выражения термодинамических сил из (3.1) и учитывая (2.7), нетрудно получить соотношения, выражающие термодинамические потоки через переменные t, e_{ij}, c_{ij}. После линеаризации эти соотношения примут вид

$$J_i = -\lambda^* \nabla_i t, \qquad J_{ijk} = -\frac{\rho_0 D}{3k} (k \nabla_i c_{\alpha\alpha} - b \nabla_i t - 3K' \nabla_i e_{\alpha\alpha}) \delta_{jk} +$$
$$+ \frac{\rho_0 D^*}{3\gamma} [(\gamma \nabla_i c_{\alpha\alpha} - 3G' \nabla_i e_{\alpha\alpha}) \delta_{jk} - 3\gamma \nabla_i c_{jk} + 9G' \nabla_i e_{jk}] \tag{3.4}$$
$$(K' = \lambda' + {}^2/_3 G', \quad k = \beta + {}^2/_3 \gamma)$$

Здесь D, D^* — коэффициенты диффузии.

Как видим, диффузионный поток вещества связывается здесь не только с градиентом объемного расширения (среднего давления), а вызывается также градиентами каждого из компонент тензора деформации (напряжения) в отдельности, о чем отмечается также в монографии [3].

Свертывая второе равенство (3.4) по индексам j, k, найдем

$$J_{i\alpha\alpha} = -\frac{\rho_0 D}{k} (k \nabla_i c_{\alpha\alpha} - b \nabla_i t - 3K' \nabla_i e_{\alpha\alpha}) \tag{3.5}$$

4. Система дифференциальных уравнений. Краевые условия. Искомую систему дифференциальных уравнений запишем в перемещениях.

Подставляя в уравнение движения (1.10) выражения для напряжений из (2.6) и пользуясь (1.4), после линеаризации получим

$$G \Delta \mathbf{u} + (\lambda + G) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{u} =$$
$$= \rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial \tau^2} + \lambda' \operatorname{grad} c_{\alpha\alpha} + 2G' \operatorname{div} \mathbf{c} + \alpha K \operatorname{grad} t \tag{4.1}$$

Уравнение сохранения (1.9) и соотношения (1.7), (3.4) дают

$$\frac{D}{3k} (k \Delta c_{\alpha\alpha} - b \Delta t - 3K' \operatorname{div} \Delta \mathbf{u}) \delta_{ij} - \frac{D^*}{3\gamma} [(\gamma \Delta c_{\alpha\alpha} - 3G' \operatorname{div} \Delta \mathbf{u}) \delta_{ij} -$$
$$- 3\gamma \Delta c_{ij} + \frac{9}{2} G' \Delta (\nabla_i u_j + \nabla_j u_i)] = \frac{\partial c_{ij}}{\partial \tau} \tag{4.2}$$

Наконец из уравнения сохранения энергии, соотношений (2.3), (2.5) и первого равенства (3.3) имеем

$$\varkappa \Delta t = \frac{\partial t}{\partial \tau} + \frac{b}{3c} \frac{\partial c_{\alpha\alpha}}{\partial \tau} + \frac{\alpha K}{c} \frac{\partial}{\partial \tau} \operatorname{div} \mathbf{u} \tag{4.3}$$

где $\varkappa$ — температуропроводность.

Таким образом, для определения десяти функций u_i, $c_{ij} = c_{ji}$, t имеем систему линейных дифференциальных уравнений (4.1)—(4.3).

Для обеспечения однозначности решения этой системы необходимы дополнительные (начальные и граничные) условия.

В теории теплопроводности поток тепла через границу тела часто подчиняют условию Ньютона

$$J_\alpha \cos(n, x_\alpha) - h(t - t_c) = 0 \qquad (4.4)$$

Здесь n — внешняя нормаль к граничной поверхности, h — коэффициент теплообмена, t_c — температура внешней среды.

Аналогичное условие может быть в ряде случаев принято и в отношении потока массы

$$J_{\alpha ij} \cos(n, x_\alpha) - {}^1/_3 \rho^2 / k \, [H_1 (\mu_{\alpha\alpha} - \mu_{\alpha\alpha}{}^c) \delta_{ij} + 2H_2 (\mu_{ij} - \mu_{ij}{}^c)] = 0 \qquad (4.5)$$

Здесь H_1, H_2 — коэффициенты массообмена, $\boldsymbol{\mu}_c$ — тензор химического потенциала растворенного в теле вещества в окружающей среде.

Что касается граничных условий на механические переменные и начальных условий, то они могут формулироваться обычно, как это принято в линейной механике сплошной среды, в теории диффузии и теплопроводности.

5. Диффузионная теория деформации и реология. Часть из полученных выше уравнений диффузионной теории деформации вытекает из основных принципов термодинамики необратимых процессов. С другой стороны, многие реологические соотношения, представляющие собой связь между компонентами тензоров напряжения, деформации и их скоростями, тоже вытекают, как это теперь установлено, из тех же принципов термодинамики. Естественно поэтому поставить вопрос о выяснении связи между дифференциальными уравнениями диффузионной теории неупругости и упомянутыми реологическими соотношениями.

Для упрощения выкладок остановимся на случае изотермических процессов, поскольку учет конечной теплопроводности не дает здесь каких-либо дополнительных эффектов.

Рассмотрим уравнение (1.9), из которого при помощи феноменологических соотношений (3.4) получено уравнение (4.2). Интегрируя (1.9) по занятому телом объему V, ограниченному поверхностью Σ, находим

$$-\int_V \operatorname{div} \mathbf{J} \, dV = \int_V \rho \mathbf{c}^{\cdot} \, dV \qquad (5.1)$$

где точка означает субстанциональную производную.

Преобразовав объемный интеграл в левой части (5.1) в поверхностный и учитывая граничные условия (4.5), будем иметь

$$-\int_\Sigma \rho^2 \, [H_1 (\mu_{\alpha\alpha} - \mu_{\alpha\alpha}{}^c) \, \delta_{ij} + 2H_2 (\mu_{ij} - \mu_{ij}{}^c)] \, d\Sigma = 3k \int_V \rho c_{ij}{}^{\cdot} \, dV \qquad (5.2)$$

Предположим теперь, что термодинамическое состояние тела, а также окружающей среды каждое в отдельности однородно. При этом вместо (5.2) получим

$$H_1 \mu_{\alpha\alpha} \delta_{ij} + 2H_2 \mu_{ij} + 3 \frac{kd}{\rho} c_{ij}{}^{\cdot} = H_1 \mu_{\alpha\alpha}{}^c \delta_{ij} + 2H_2 \mu_{ij}{}^c \qquad \left(d = \frac{V}{\Sigma}\right) \quad (5.3)$$

где d — средний размер области, занятой телом.

Исключая из (2.6), (2.7) и (5.3) величину c_{ij} и пользуясь общими термодинамическими соотношениями, для шаровой части соответствующих тензоров находим

$$\sigma_{\alpha\alpha} + n \sigma_{\alpha\alpha}{}^{\cdot} = 3K_\mu e_{\alpha\alpha} + 3nK_c e_{\alpha\alpha}{}^{\cdot} - 3 \frac{\rho K_c K_c{}'}{k_e} \mu_{\alpha\alpha}{}^c \qquad (5.4)$$