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 $\boldsymbol{\rho}$.

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

$$\begin{aligned} \rho_l &= \rho_0 \,({}^1/_3\delta_{ij} - e_{ij}) \cos(l, x_i) \cos(l, x_j) \\ v_l &= \rho_0^{-1} \,({}^1/_3\delta_{ij} + e_{ij}) \cos(l, x_i) \cos(l, x_j) \end{aligned} \tag{1.3}$$

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

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

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

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

где δ_{ij} — символ Кронекера.

Тензоры $\boldsymbol{\rho}$ 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 $\boldsymbol{\rho}$

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

При этом будем иметь следующее уравнение сохранения массы

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

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

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

Здесь $\boldsymbol{\rho}_k$ — 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

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

Здесь u — внутренняя энергия единицы массы, $\mathbf{J}$ — вектор теплового потока, $\boldsymbol{\sigma}$ — 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

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

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:

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

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

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

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

$$G\Delta\mathbf{u} + (\lambda + G)\,\mathrm{grad}\,\mathrm{div}\,\mathbf{u} =$$

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

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

$$\frac{D}{3k}(k\Delta c_{\alpha\alpha} - b\Delta t - 3K'\,\mathrm{div}\,\Delta\mathbf{u})\,\delta_{ij} - \frac{D^*}{3\gamma}[(\gamma\Delta c_{\alpha\alpha} - 3G'\,\mathrm{div}\,\Delta\mathbf{u})\,\delta_{ij} -$$

$$-3\gamma\Delta c_{ij} + \frac{9}{2}G'\Delta(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i)] = \frac{\partial c_{ij}}{\partial\tau} \tag{4.2}$$

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

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

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

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

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

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

Здесь H_1, H_2 — коэффициенты массообмена, μ_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

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

где точка означает субстанциональную производную.

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

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

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

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

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

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

Здесь K_μ и K_c — значения объемного модуля упругости при постоянных $\mu_{\alpha\alpha}$ и $c_{\alpha\alpha}$

$$K_\mu = K_c \frac{k_\sigma}{k_e}, \qquad n = \frac{d}{H}\frac{k_\sigma}{k_e}, \qquad H = H_1 + \frac{2}{3} H_2 \tag{5.5}$$

При этом k_σ, k_e — значения коэффициента k при постоянных $\sigma_{\alpha\alpha}$ и $e_{\alpha\alpha}$; наконец, λ_σ', G_σ' — значения коэффициентов λ' и G' при постоянном $\sigma_{\alpha\alpha}$.

Аналогичные зависимости получаются также между компонентами девиаторов тензоров напряжения, деформации и их производными

$$\sigma_{ij}^d + m\,(\sigma_{ij}^d)^{\cdot} = 2G_\mu e_{ij}^d + 2mG_c\,(e_{ij}^d)^{\cdot} - 2\rho G_c G_\sigma' \,/\, \gamma_e \tag{5.6}$$

где G_μ и G_c — значения модуля сдвига при постоянных μ_{ij} и c_{ij} $(i \neq j)$

$$G_\mu = G_c \frac{\gamma_\sigma}{\gamma_e}, \qquad m = \frac{9}{4}\frac{d}{H_2}\frac{k_\sigma}{\gamma_e} \tag{5.7}$$

Соотношения (5.4), (5.6) являются наиболее общими для реологической модели, характеризующейся линейной зависимостью между напряжениями, деформациями и их первыми производными. При этом формулами (5.5), (5.7) устанавливается физический смысл длительных и мгновенных модулей упругости и времени релаксации.

Из изложенного следует, что реологические соотношения (5.4), (5.6) вытекают из уравнений диффузионной теории как частный случай при условии, что термодинамическое состояние тела и окружающей среды в отдельности однородно, а необратимость процесса возникает лишь благодаря разрывному изменению состояния системы при переходе через границу тело — среда. Теоретически это возможно, очевидно, лишь при бесконечно большой проводимости сред и определенном конечном сопротивлении границы их раздела.

Автор благодарен Г. Н. Савину за обсуждение результатов.

Поступила 25 II 1963

ЛИТЕРАТУРА

1. Любов Б. Я., Фастов Н. С. Влияние концентрационных напряжений на процессы диффузии в твердых растворах. Докл. АН СССР, 1952, т. 84, № 5.
2. Фастов Н. С. Термодинамика необратимых процессов деформирования и ее приложение к вязкому течению твердых тел. Сб. «Проблемы металловедения и физики металлов» Ин-та металловед. и физ. металлов и ЦНИИ черной металлургии, Металлургиздат, 1962, вып. 7.
3. Пинес Б. Я. Очерки по металлофизике. Изд. Харьк. ун-та, 1961.
4. Подстригач Я. С. Диференціальні рівняння задачі термодифузії в твердому деформованому ізотропному тілі. Доповіді УРСР, 1961, № 2.
5. Седов Л. И. Введение в механику сплошных сред. Физматгиз, 1962.
6. Де Гроот С. Р. Термодинамика необратимых процессов. Гостехиздат, 1956.
7. Подстригач Я. С. Диференціальні рівняння дифузійної теорії деформації твердого тіла. Доповіді УРСР, 1962, № 11.
8. Подстригач Я. С. Диффузионная теория деформации изотропной сплошной среды. Сб. «Вопросы механики реального твердого тела», 1964, вып. 2.