

ЗОНЫ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ПРИБЛИЖЕНИИ МАЛЫХ ДЕФОРМАЦИЙ

Шаринова Л.Л.

Ключевые слова: фазовые переходы, зоны фазовых переходов, малые деформации.

Аннотация. Фазовые границы в упругих телах рассматриваются как поверхности разрыва деформаций. На равновесной границе в дополнении к обычным условиям непрерывности перемещений и напряжений ставится дополнительное термодинамическое условие. Деформации, которые могут сосуществовать на равновесной границе образуют зону фазовых переходов (ЗФП). Граница зон фазовых переходов играет роль поверхности пластичности в пространстве деформаций. В работе развивается процедура построения в случае малых деформаций. Форма зон фазовых переходов зависит от параметров материала. Используя ЗФП, мы исследуем как деформационное состояние влияет на тип фазовой границы и локализацию деформаций вследствие фазового перехода.

PHASE TRANSITION ZONES IN A SMALL STRAIN APPROACH

Sharipova L.L.

Keywords: phase transitions, phase transition zones, small strains.

Abstract. Phase boundaries in elastic solids are considered as surfaces across which the deformation gradient suffers a jump. On the equilibrium interface a thermodynamic condition has to be put in addition to conventional displacement and traction continuity conditions. The deformations which can coexist on the equilibrium interface form the phase transition zone (PTZ). We develop a procedure to construct the PTZ in a small strain approach. The shape of the PTZ depends on material parameters. Using the PTZ we study how the strain state affect the type of the interface and strain localization due to phase transformation.

1. Введение

В нашем описании фазовых переходов используются следующие идеи.

1. Фазовые границы рассматриваются как поверхности разрыва при непрерывном поле перемещений.

2. На равновесной фазовой границе в дополнении к условиям непрерывности перемещений и напряжений ставится термодинамическое условие [1-5]. Термодинамическое условие служит дополнительным ограничением на возможные разрывные решения.

3. Равновесные фазовые границы могут существовать не в любом материале. Это приводит к ограничениям на определяющие соотношения: двухфазные деформации могут существовать только в материалах с невыпуклой энергией деформации.

4. Система равновесных уравнений на фазовой границе может быть удовлетворена ни при всех деформациях и ни при всех нормалях к фазовой границе. Этот факт ведет к концепции зон фазовых переходов [6].

Определение. Зона фазовых переходов (ЗФП) – область в пространстве деформаций, деформации из которой могут сосуществовать на равновесной границе фаз.

Важность построения ЗФП состоит в следующем:

- Деформации вне ЗФП не могут существовать на равновесной границе ни при каких условиях нагружения. Граница ЗФП определяется исключительно свойствами материала и играет роль фазовой диаграммы или поверхности превращения в пространстве деформаций.

- С одной стороны, различные точки ЗФП связаны с различными деформационными состояниями. С другой стороны, различные точки границы ЗФП соответствуют различной ориентации фазовой границы по отношению к тензору деформаций и различным скачкам деформаций [6-8].

Таким образом, построение ЗФП означает исследование деформационного состояния на тип локализации деформаций вследствие фазовых превращений.

2. Равновесные фазовые границы и зоны фазовых переходов в случае малых деформаций. Исходные соотношения

В случае малых деформаций задача на равновесные двухфазные конфигурации упругих тел может быть сведена к определению фазовой границы Γ и поля перемещений $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ достаточно гладкого в материальных точках $\mathbf{x} \notin \Gamma$, непрерывного на Γ и удовлетворяющего граничным и равновесным условиям [8]:

$$\mathbf{x} \notin \Gamma: \quad \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0, \quad \theta = \text{const}, \quad (2.1)$$

$$\mathbf{x} \in \Gamma: \quad [\mathbf{u}] = 0, \quad (2.2)$$

$$[\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (2.3)$$

$$[f] - \boldsymbol{\sigma} : [\boldsymbol{\varepsilon}] = 0, \quad (2.4)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ и $\boldsymbol{\varepsilon}$ тензоры напряжений и деформаций, θ - температура, $\mathbf{n}$ - единичная нормаль к границе Γ , скобки $[g] = g_+ - g_-$ означают скачок функции g через границу Γ , нижние или верхние индексы «+» и «-» означают значения взятые по одну из сторон границы Γ . В равенствах верхние и нижние индексы соответствуют друг другу. Объемная плотность свободной энергии моделируется квадратичными зависимостями [8]:

$$f(\boldsymbol{\varepsilon}, \theta) = \min_{-,+} \{ f^-(\boldsymbol{\varepsilon}, \theta), f^+(\boldsymbol{\varepsilon}, \theta) \} \quad (2.5)$$

$$f^\pm(\boldsymbol{\varepsilon}, \theta) = f_0^\pm(\theta) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_\pm^p) : \mathbf{C}_\pm : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_\pm^p)$$

Здесь параметры $\mathbf{C}_\pm$, $f_0^\pm$ и $\boldsymbol{\varepsilon}_\pm^p$ - положительно-определенный тензор упругости, плотности свободной энергии и тензор деформаций в ненапряженном состояниях « $\pm$ », соответственно. Если $\boldsymbol{\varepsilon}_+^p = 0$, то $[\boldsymbol{\varepsilon}^p] \equiv \boldsymbol{\varepsilon}^p$ - тензор собственной деформации. Объемные силы, термоупругие эффекты и поверхностная энергия не учитываются. Если $\mathbf{C}_\pm$ и $\boldsymbol{\varepsilon}_\pm^p$ не зависят от температуры, то параметр $\gamma(\theta) = [f_0]$ играет роль температуры.

Условия (2.1)-(2.3) - обычные равновесные условия для композита. Дополнительное термодинамическое условие (2.4) связано с дополнительной степенью свободы, вызванное неизвестной фазовой границей.

Определяющие соотношения принимают вид:

$$\boldsymbol{\sigma}_{\pm}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{C}_{\pm} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\pm}^p). \quad (2.6)$$

Используя (2.2) и (2.3) можно выразить скачки в деформациях или напряжениях через фазовую границу в виде [8]:

$$[\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{K}_m(\mathbf{n}) : \mathbf{q}_{\pm}, \quad \mathbf{q}_{\pm} = -\mathbf{C}_1 : \boldsymbol{\varepsilon}_{\pm} + [\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^p], \quad (2.7)$$

$$\mathbf{K}_{\pm}(\mathbf{n}) = \{\mathbf{n} \otimes \mathbf{G}_{\pm} \otimes \mathbf{n}\}^s, \quad \mathbf{G}_{\pm} = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{n})^{-1}, \quad \mathbf{C}_1 = \mathbf{C}_+ - \mathbf{C}_-$$

$$[\boldsymbol{\sigma}] = \mathbf{S}_m(\mathbf{n}) : \mathbf{m}_{\pm}, \quad \mathbf{m}_{\pm} = -\mathbf{B}_1 : \boldsymbol{\sigma}_{\pm} + [\boldsymbol{\varepsilon}^p], \quad (2.8)$$

$$\mathbf{S}_{\pm}(\mathbf{n}) = \mathbf{C}_{\pm} : \mathbf{K}_{\pm} : \mathbf{C}_{\pm} - \mathbf{C}_{\pm}, \quad \mathbf{B}_1 = \mathbf{B}_+ - \mathbf{B}_-, \quad \mathbf{B} = \mathbf{C}^{-1}$$

означает симметризацию: $K_{ijkl} = n_{(i} G_{j)(k} n_{l)}$. Заметим, что тензор $\mathbf{q}$ может быть ассоциирован с тензором дислокационных моментов, индуцированных новой фазой [9].

Подставляя (2.5), (2.6) и (2.7) в (2.4) получаем, что термодинамическое условие приводится к виду

$$2\gamma + [\boldsymbol{\varepsilon}^p : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^p] + \boldsymbol{\varepsilon}_{\pm} : \mathbf{C}_1 : \boldsymbol{\varepsilon}_{\pm} - 2\boldsymbol{\varepsilon}_{\pm} : [\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^p] \pm \mathbf{q}_{\pm} : \mathbf{K}_m(\mathbf{n}) : \mathbf{q}_{\pm} = 0. \quad (2.9)$$

Таким образом, система уравнений расщепилась. При заданном γ любое из двух уравнений (2.9) определяет однопараметрическое семейство единичных нормалей зависящих от деформаций по одну из сторон границы («+» или «-»). Деформации на другой стороне границы могут быть посчитаны по формулам (2.7). Деформации, для которых уравнение (2.9) может быть разрешено для единичной нормали образуют *зону фазовых переходов*, которая может быть построена в $\boldsymbol{\varepsilon}$ -, $\mathbf{q}$ -, $\boldsymbol{\sigma}$ - или $\mathbf{m}$ - пространствах.

3. Зоны фазовых переходов в случае изотропных фаз

Предполагаем, что обе фазы изотропные:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{\pm} &= \lambda_{\pm} \mathbf{E} \mathbf{E} + 2\mu_{\pm} \mathbf{I}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{+}^p = \frac{\nu^p}{3} \mathbf{E}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{-}^p = 0 \\ \mathbf{K}^{\pm}(\mathbf{n}) &= \frac{1}{\mu_{\pm}} (\mathbf{n} \mathbf{E} \mathbf{n})^s - \frac{1}{2\mu_{\pm}(1-\nu_{\pm})} \mathbf{n} \mathbf{n} \mathbf{n} \mathbf{n} \end{aligned} \quad (3.1)$$

где $\mathbf{E}$ и $\mathbf{I}$ - единичные тензоры второго и четвертого ранга, соответственно, λ и μ - коэффициенты Ляме, ν - коэффициент Пуассона, $K = \lambda + \frac{2}{3}\mu$ - объемный модуль сжатия.

На рисунках 1, 5 представлены сечения ЗФП плоскостью $\varepsilon_3 = 0$, на рисунках 2, 4 плоскостью $\sigma_3 = 0$, на рисунках 3, 7 плоскостью $q_2 = q_3$ и на рисунках 4, 8 плоскостью $m_2 = m_3$ для параметров материала указанных в таблице 1.

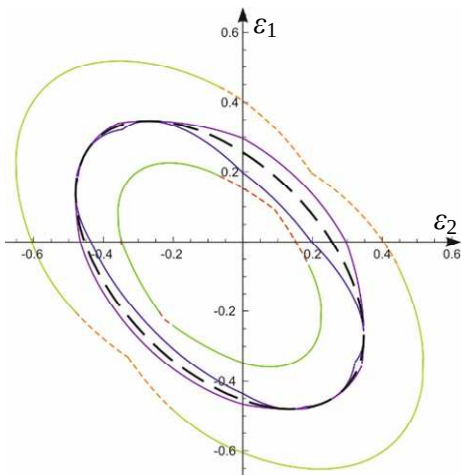


Рис. 1. Сечение 3ФП плоскостью $\varepsilon_3 = 0$

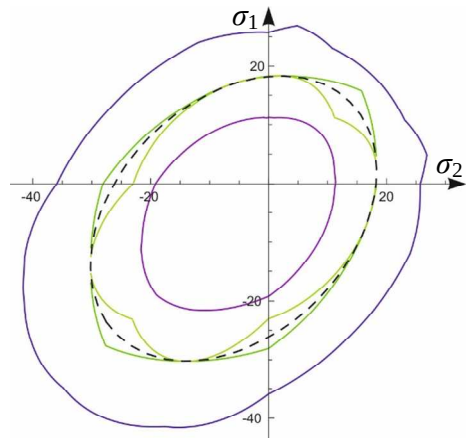


Рис. 2. Сечение 3ФП плоскостью $\sigma_3 = 0$

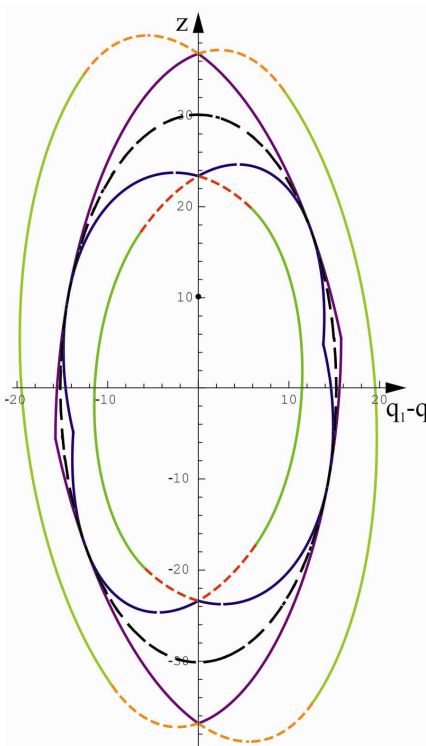


Рис. 3. Сечение 3ФП плоскостью $q = q_2 = q_3, z = \frac{\text{tr } \mathbf{q}}{\sqrt{3}}$

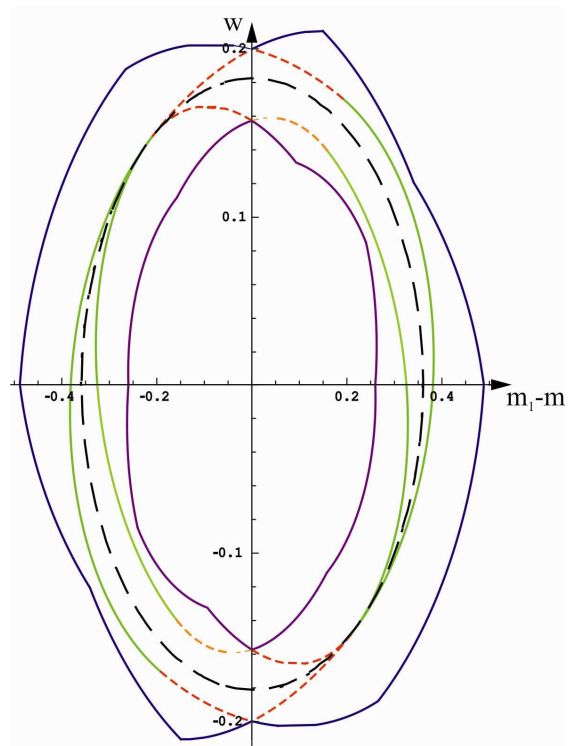


Рис. 4. Сечение 3ФП плоскостью $m = m_2 = m_3, w = \frac{\text{tr } \mathbf{m}}{\sqrt{3}}$

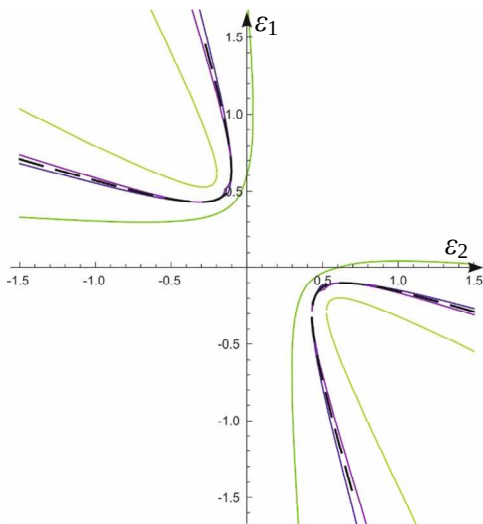


Рис. 5. Сечение 3ФП плоскостью $\varepsilon_3 = 0$

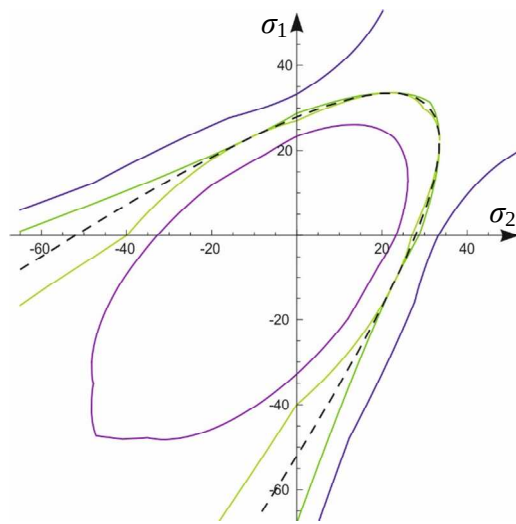


Рис. 6. Сечение 3ФП плоскостью $\sigma_3 = 0$

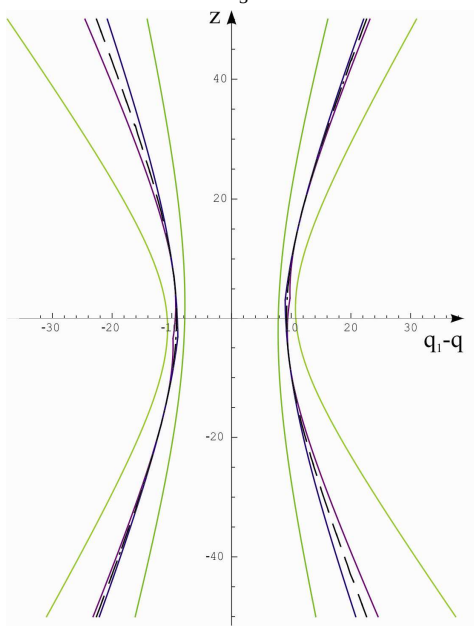


Рис. 7. Сечение 3ФП плоскостью $q = q_2 = q_3, z = \frac{\text{tr } \mathbf{q}}{\sqrt{3}}$

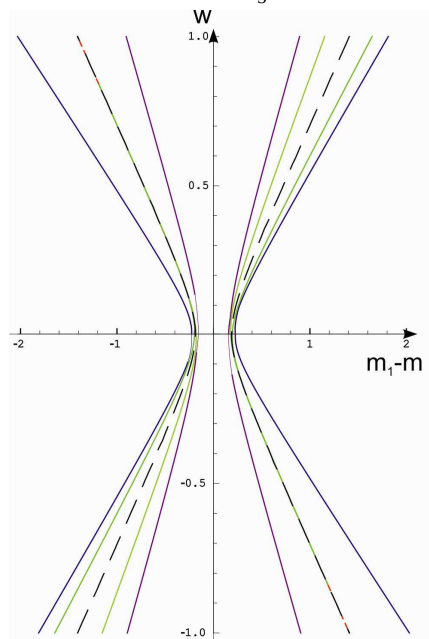


Рис. 8. Сечение 3ФП плоскостью $m = m_2 = m_3, w = \frac{\text{tr } \mathbf{m}}{\sqrt{3}}$

Табл. 1

Рис.	K_+	K_-	μ_+	μ_-	ν^p	γ
1-4	39	78	15	30	0,15	3
5-8	78	39	20	30	0,15	3

В зависимости от соотношения между главными значениями тензора $\mathbf{q}$ внешним границам зоны ФП соответствует граница фаз с нормалью, совпадающей с главным направлением тензора $\mathbf{q}$ (например, если $q_1 > q_2 > q_3$, то $\mathbf{n} = \mathbf{e}_1$)- красные и оранжевые пунктирные линии или с нормалью, лежащей в главной плоскости тензора $\mathbf{q}$ - зеленые и светло-зеленые линии, внутренние границы ($\mathbf{n} = \mathbf{e}_3$) – синие и фиолетовые линии. Пунктирная черная линия соответствует поверхности разрыва производных. Если тензор $\mathbf{C}_1$ - знакоопределенный, то зоны ФП ограничены замкнутыми поверхностями (рис. 1-4). Если тензор $\mathbf{C}_1$ - не знакоопределенный, то зоны ФП – разомкнутые (рис. 5-8).

Список литературы

1. Гринфельд М.А. Об условиях термодинамического равновесия фаз нелинейно-упругого материала // Докл. АН СССР. 1980. Т. 251 №4. С. 824-827.
2. Гринфельд М.А. Методы механики сплошных сред в теории фазовых превращений. М.: Наука, 1990. 312с.
3. Кондауров В.И., Никитин Л.В. О фазовых переходах первого рода в нелинейно-упругих средах // Докл. АН СССР. 1982. Т. 262. №6. С. 1348-1351.
4. Трускиновский Л.М. Равновесные межфазные границы // Докл. АН. СССР. 1982. Т. 265. №2. С. 306-310.
5. Gurtin M.E. Two-phase deformations of elastic solids // Arch. Rat. Mech. Anal. 1983. V. 84. P. 1-20.
6. Фрейдин А.Б., Чискис А.М. Зоны фазовых переходов в нелинейно-упругих изотропных материалах. Ч.1. Основные соотношения. // Изв. РАН. МТТ. 1994. №4. С. 91-109.
7. Freidin A.B., Vilchevskay E.N. and Sharipova L.L. Two-phase deformations within the framework of phase transition zones // Theoretical and Applied Mechanics. 2002. № 28-29. P. 149-172.
8. Фрейдин А.Б. Приближении малых деформаций в теории фазовых превращений при деформировании упругих тел // Прочность и разрушение материалов и конструкций. Межвуз. сб. под ред. Н.Ф. Морозова. (Исследования по упругости и пластичности). 1999. Вып. 18. С. 266-290.
9. Kunin I.A. 1983 Elastic Media with Microstructure II. Springer-Verlag, Berlin, New York, etc.

References

1. Grinfeld M.A. On conditions of thermodynamic equilibrium of the phases of a nonlinear elastic material // Reports of the Academy of Sciences USSR. 1980. V. 251. P. 824-827.
2. Grinfeld M.A. Methods of Continuum Mechanics in the Theory of Phase Transitions. Moscow: Science, 1990. 312p.

3. Kondaurov V.I., Nikitin L.V. Phase transformations of the first kind in nonlinear elastic media // Reports of the Academy of Sciences USSR. 1982. V.262. №6. P. 1348-1351.
4. Truskinovsky L. Equilibrium interphase boundaries // Reports of the Academy of Sciences USSR. 1982. V. 265. P.306-310.
5. Gurtin M.E. Two-phase deformations of elastic solids // Arch. Rat. Mech. Anal. 1983. V. 84. P. 1-20.
6. Freidin A.B., Chiskis A.M. Regions of phase transitions in nonlinear elastic isotropic materials. Part 1: Basic relations // Mechanics of Solids. 1994. V.29. №4. P. 91-109.
7. Freidin A.B., Vilchevskay E.N. and Sharipova L.L. Two-phase deformations within the framework of phase transition zones // Theoretical and Applied Mechanics. 2002. № 28-29. P. 149-172.
8. Freidin A.B. Small strains approach in the theory of strain induced phase transformations // In N.F. Morozov (Ed.) Strength and fracture of materials, studies on elasticity and plasticity. 18 (pp. 260-290). St. Petresburg University.
9. Kunin I.A. 1983 Elastic Media with Microstructure II. Springer-Verlag, Berlin, New York, etc.

Шарипова Лия Львовна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт проблем машиноведения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия, sleah07@gmail.com	Sharipova Leah Lvovna – – candidate of technical sciences, senior researcher, Institute for problems in mechanical engineering of Russian Academy of Sciences, Saint-Petersburg, Russia, sleah07@gmail.com
--	--

Received 14.09.2021