

Кинетика фронта химической реакции в
трехмерных задачах механохимии

Григорьева Полина Михайловна

15 июня 2015 г.

1 Введение и описание проблемы

Проблема термического окисления кремния сегодня является одной из важнейших проблем в химии в связи с широким использованием и значимостью технологии кремниевых интегральных схем. Так как объем молекулы диоксида кремния примерно в 2.3 раза больше атома кремния, окисление кремния сопровождается большим увеличением объема. Это значит, что эта проблема принадлежит области механохимии, которая рассматривает химические реакции под действием механических нагрузок. В этой работе будет изучен простейший аналитический пример, позволяющий понять основные идеи, в котором фронт химической реакции распространяется вдоль одной оси и остается плоским внутри всего трехмерного тела. Несмотря на то, что значения для некоторых численных вычислений были взяты из параметров для Si , O_2 и SiO_2 , полученные теоретические результаты можно использовать для реакций этого типа. Кроме того, базируясь на результатах предшествовавшей работы [1], была решена задача диффузии и были приведены результаты с учетом коэффициента диффузии, зависящего от механических нагрузок.

2 Литературный обзор и необходимые формулы

Теория кинетики химических реакций основана на концепции химических потенциалов и химического сродства, которые являются линейной комбинацией химических потенциалов веществ, принимающих участие в реакции. В классической теории химический потенциал является скаляром. Однако этот подход действителен только для газов и жидкостей, но редко для твердых тел. Если мы хотим исследовать фазовый переход в деформируемых твердых материалах, нам нужно тензорное выражение для химического потенциала. Это также значит, что химическое сродство тоже станет тензором. В связи с проблемой, описанной в предыдущем разделе, мы рассмотрим химическую реакцию между твердой и газовой компонентами:



где B_- и B_+ относятся к деформируемым твердым компонентам, а B_* - к газовой компоненте. Мы считаем, что реакция сконцентрирована около фронта реакции, Γ , который разделяет области, занятые B_- и B_+ . Реакция происходит и продолжается вследствие диффузии газовой компоненты B_* сквозь образующуюся B_+ . Мы считаем, что весь газ, подходящий к фронту, будет израсходован в химической реакции. Как пример такой реакции, мы можем рассмотреть уравнение, описывающее образование диоксида кремния $Si + O_2 \rightarrow SiO_2$. Мы считаем, что область, занятая B_+ , является проницаемой для газовой компоненты, которая может свободно диффузировать через твердую компоненту и не вызывать в ней никаких деформаций. Для простоты мы не учитываем эффекты внутреннего трения, влияние реакции на температуру, т.е. мы не решаем задачу теплопроводности, и считаем температуру T параметром модели. Было показано, что нормальная компонента тензора химического сродства может быть вычислена согласно следующей фор-

муле (см.[1]):

$$A_{nn} = \frac{n_- M_-}{\rho_-} \left(\gamma(T) + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_- : \boldsymbol{\varepsilon}_- - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_+ : (\boldsymbol{\varepsilon}_+ - \boldsymbol{\varepsilon}_{ch}) + \boldsymbol{\sigma}_+ : (\boldsymbol{\varepsilon}_+ - \boldsymbol{\varepsilon}_-) \right) + n_* RT \ln \frac{c(\Gamma)}{c_*} \quad (2)$$

где $\boldsymbol{\sigma}_- = \mathbf{C}_- : \boldsymbol{\varepsilon}_-$ и $\boldsymbol{\sigma}_+ = \mathbf{C}_+ : (\boldsymbol{\varepsilon}_+ - \boldsymbol{\varepsilon}_{ch})$ - тензора напряжений Коши, \mathbf{C}_\pm являются тензорами жесткости упругих компонент, $\boldsymbol{\varepsilon}_\pm$ - тензора деформации, $c(\Gamma)$ - концентрация газа на фронте реакции, c_* - растворимость газовой компоненты в сформированном материале B_+ . Также мы относим все неупругие деформации к $\boldsymbol{\varepsilon}_{ch}$ и считаем, что эти деформации изотропны в объеме, т.е. $\boldsymbol{\varepsilon}_{ch} = \varepsilon_{ch} \mathbf{I}$, где \mathbf{I} - единичный тензор. Параметр $\gamma(T)$ отвечает за отсчетные уровни химических энергий. Если температура T дана, $\gamma(T)$ является параметром модели (более подробно см. [2], [3]). Если мы заменим скалярную величину химического сродства нормальной компонентой тензора химического сродства, скорость на элементе поверхности s нормалью \mathbf{n} будет определяться выражением:

$$\omega_n = \omega \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{A_{nn}}{RT} \right) \right\} \quad (3)$$

где $\omega = k_* c$ - скорость прямой химической реакции, k_* является кинетической константой скорости химической реакции. Тогда из баланса массы на фронте реакции, $n_- M_- \omega = \rho_- V$, V - нормальная компонента скорости распространения химического фронта, следует, что :

$$V = \frac{n_- M_-}{\rho_-} \omega \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{A_{nn}}{RT} \right) \right\} \quad (4)$$

Фронт реакции продвигается, только если $A_{nn} > 0$. Тогда из уравнения $A_{nn} = 0$ мы можем найти равновесную концентрацию c_{eq} на фронте реакции:

$$\frac{n_- M_-}{\rho_-} \left(\gamma(T) + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_- : \boldsymbol{\varepsilon}_- - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_+ : (\boldsymbol{\varepsilon}_+ - \boldsymbol{\varepsilon}_{ch}) + \boldsymbol{\sigma}_+ : (\boldsymbol{\varepsilon}_+ - \boldsymbol{\varepsilon}_-) \right) + n_* RT \ln \frac{c_{eq}}{c_*} = 0 \quad (5)$$

Вводя эту равновесную концентрацию, мы можем переписать A_{nn} вблизи химического равновесия как $A_{nn} = n_* RT \left(\frac{c(\Gamma)}{c_{eq}} - 1 \right)$. Следовательно, мы можем переписать и формулу для скорости распространения реакции:

$$V = \frac{n_- M_-}{\rho_-} k_* n_* (c(\Gamma) - c_{eq}) \quad (6)$$

Концентрация газовой компоненты на фронте химической реакции $c(\Gamma)$ может быть найдено из второго закона Фика для диффузии:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla c) \quad (7)$$

Мы считаем, что процесс диффузии не зависит от времени. Тогда уравнение принимает вид:

$$\nabla \cdot (D \nabla c) = 0 \quad (8)$$

Граничными условиями являются:

$$D \nabla \cdot c|_{\Omega} + \alpha(c_* - c|_{\Omega}) = 0, \quad D \nabla \cdot c|_{\Gamma} + n_*^2 k_* (c(\Gamma) - c_{\text{eq}}) = 0 \quad (9)$$

Первое условие следует из условия баланса массы на внешней границе тела Ω , α - константа скорости растворения молекул газа в новом материале. Второе условие следует из условия баланса массы на фронте реакции Γ . Определение коэффициента диффузии используется согласно [4]. Коэффициент диффузии может быть подсчитан по следующей формуле:

$$D = D_0 e^{-pV_d/kT}, \quad D < D_{\text{max}} \quad (10)$$

где за $p = -\frac{1}{3}(\sigma_{11}^+ + \sigma_{22}^+ + \sigma_{33}^+)$ обозначено давление на фронте реакции, T - температура системы, V_d - объем, занимаемый молекулой, и k - температурная постоянная Больцмана. Кроме того, величина D_{max}/D , варьируется от 1.1 до 2 в зависимости от температуры. Итак, задача сводится к следующим пунктам: сначала мы находим c_{eq} из уравнения (5). Далее, мы находим $c(\Gamma)$ из задачи диффузии (8) и (9) и затем, окончательно, подставляем полученные значения в (6).

3 Аналитическое решение

В этом разделе мы представим аналитическое решение задачи для простейшей геометрии. Станем рассматривать трехмерный прямоугольный параллелепипед: $x_1 \in [-l_1, l_1]$, $x_2 \in [-l_2, l_2]$, $x_3 \in [-0, H]$ (см.1) с реакцией, распространяющейся в направлении оси x_3 и фронтом реакции, представленным плоскостью $x_3 = h$. Считаем, что концентрация не зависит от координат x_1 и x_2 , поэтому $c = c(x_3)$, $c(\Gamma) = c(h)$.

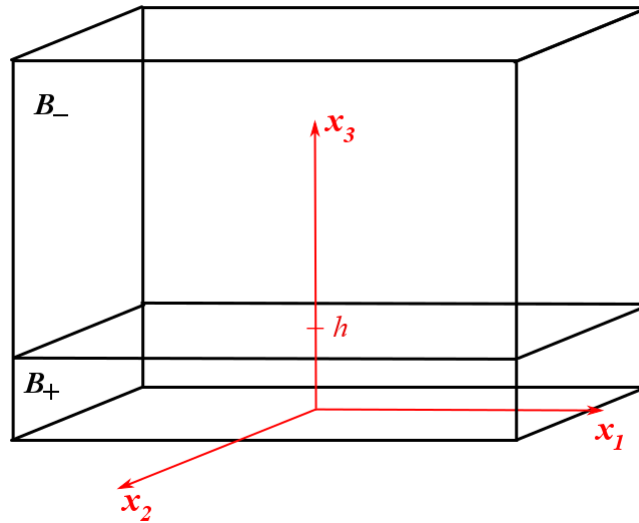


Рис. 1: Модель блока.

Будет изучено два случая механической нагрузки: первый, перемещения на поверхности тела заданы, и второй, напряжения на поверхности заданы.

3.1 Случай с заданными перемещениями на поверхности тела

Считаем, что нам даны перемещения, которые приложены к телу следующим образом:

$$\begin{aligned} u_1^{+/-} \left(x_1 = \pm l_1, \quad x_2 \in [-l_2, l_2], \quad x_3 \in \begin{cases} (0, h) \text{ if } + \\ (h, H) \text{ if } - \end{cases} \right) &= u_1^0 \\ u_2^{+/-} \left(x_1 \in [-l_1, l_1], \quad x_2 = \pm l_2, \quad x_3 \in \begin{cases} (0, h) \text{ if } + \\ (h, H) \text{ if } - \end{cases} \right) &= u_2^0 \end{aligned} \quad (11)$$

Тогда деформации равномерно распределены по всему телу:

$$\varepsilon_{11}^- = \varepsilon_{11}^+ = \varepsilon_{11}^0 = \frac{u_1^0}{l_1}, \quad \varepsilon_{22}^- = \varepsilon_{22}^+ = \varepsilon_{22}^0 = \frac{u_2^0}{l_2} \quad (12)$$

Сдвиговые деформации отсутствуют, т.е. $\varepsilon_{ij}^\pm = 0, i \neq j$. Считаем, что напряжения по оси x_3 отсутствуют, т.е. имеем дело с плосконапряженной задачей. Тогда из закона Гука можем вычислить оставшиеся напряжения и деформации:

$$\varepsilon_{33}^- = -\frac{\lambda^-}{\lambda^- + 2\mu^-} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^- &= \lambda^- \left(\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0 - \frac{\lambda^-}{\lambda^- + 2\mu^-} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) \right) + 2\mu^- \varepsilon_{11}^0 \\ \sigma_{22}^- &= \lambda^- \left(\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0 - \frac{\lambda^-}{\lambda^- + 2\mu^-} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) \right) + 2\mu^- \varepsilon_{22}^0 \end{aligned} \quad (14)$$

Для региона "+":

$$\varepsilon_{33}^+ = \frac{\frac{2}{3}\mu^+ - k^+}{k^+ + \frac{4}{3}\mu^+} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) + \frac{3k^+}{k^+ + \frac{4}{3}\mu^+} \varepsilon_{ch} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^+ &= \lambda^+ \left(\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0 - \frac{\lambda^+}{\lambda^+ + 2\mu^+} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) + \frac{3k^+}{\lambda^+ + 2\mu^+} \varepsilon_{ch} \right) + 2\mu^+ \varepsilon_{11}^0 - 3k^+ \varepsilon_{ch} \\ \sigma_{22}^+ &= \lambda^+ \left(\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0 - \frac{\lambda^+}{\lambda^+ + 2\mu^+} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) + \frac{3k^+}{\lambda^+ + 2\mu^+} \varepsilon_{ch} \right) + 2\mu^+ \varepsilon_{22}^0 - 3k^+ \varepsilon_{ch} \end{aligned} \quad (16)$$

Подробные расчеты приведены в Приложении I. Для удобства расчетов с значениями параметров конкретного материала перейдем к модулю Юнга, E , и коэффициенту Пуассона, ν , и запишем выражение для функции напряжений, входящей в состав (5):

$$\begin{aligned} (\sigma_- : \varepsilon_- - \sigma_+ : \varepsilon_+ + \sigma_+ : \varepsilon_{ch}) &= \\ &= \left(\frac{E_-}{1-\nu_-^2} - \frac{E_+}{1-\nu_+^2} \right) \varepsilon_{11}^0{}^2 + \left(\frac{E_-}{1-\nu_-^2} - \frac{E_+}{1-\nu_+^2} \right) \varepsilon_{22}^0{}^2 + \\ &+ 2 \left(\frac{\nu_- E_-}{1-\nu_-^2} - \frac{\nu_+ E_+}{1-\nu_+^2} \right) \varepsilon_{11}^0 \varepsilon_{22}^0 + \frac{2E_+}{(1-\nu_+)} \varepsilon_{ch} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) - \frac{2E_+}{(1-\nu_+)} \varepsilon_{ch}^2 \end{aligned} \quad (17)$$

Реакция идет только при $A_{nn} > 0$. Следовательно, при отсутствии внешних деформаций $\varepsilon_{11}^0 = 0$, $\varepsilon_{22}^0 = 0$ и при $c_{\text{eq}} = c_*$ реакция может идти только при:

$$\gamma > \gamma_* = \frac{E_+}{1 - \nu_+} \varepsilon_{\text{ch}}^2 \quad (18)$$

В этом случае выражение (10) примет вид :

$$D = D_0 e^{\left(\frac{E_+}{3(1-\nu_+)} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0 - 2\varepsilon_{\text{ch}})\right) V_d / kT} \quad (19)$$

D не зависит от координаты x_3 , поэтому уравнение (8) примет вид:

$$\Delta c = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial^2 c}{\partial x_3^2} = 0 \quad (20)$$

Решением этого уравнения будет линейная функция $c = Ax_3 + B$. Из граничных условий (9) можно найти константы A и B . В итоге, функция концентрации будет выглядеть следующим образом:

$$c = \frac{D\alpha c_* + n_*^2 k_* \alpha h c_* - D n_*^2 k_* c_{\text{eq}} - \alpha n_*^2 k_* (c_* - c_{\text{eq}}) x_3}{(D\alpha + n_*^2 k_* \alpha h - D n_*^2 k_*)} \quad (21)$$

Подставляя полученное выражение в уравнение для скорости распространения реакции (6), окончательно получим:

$$V = \frac{n_- M_- n_* k_* D \alpha c_* \left(1 - \frac{c_{\text{eq}}}{c_*}\right)}{\rho_- (D\alpha + n_*^2 k_* \alpha h - D n_*^2 k_*)} \quad (22)$$

3.2 Случай с заданными напряжениями на поверхности тела

В этом случае на поверхности заданы напряжения $\sigma_{11}^0, \sigma_{22}^0$, отвечающие условиям баланса сил и моментов:

$$\begin{aligned}
\int_0^H \sigma_{11}^0 dx_3 &= \int_0^h \sigma_{11}^+|_{x_1=l_1} dx_3 + \int_h^H \sigma_{11}^-|_{x_1=l_1} dx_3, \\
\int_0^H \sigma_{22}^0 dx_3 &= \int_0^h \sigma_{22}^+|_{x_2=l_2} dx_3 + \int_h^H \sigma_{22}^-|_{x_2=l_2} dx_3 \\
\int_0^H x_3 \sigma_{11}^0 dx_3 &= \int_0^h x_3 \sigma_{11}^+|_{x_1=l_1} dx_3 + \int_h^H x_3 \sigma_{11}^-|_{x_1=l_1} dx_3, \\
\int_0^H x_3 \sigma_{22}^0 dx_3 &= \int_0^h x_3 \sigma_{22}^+|_{x_2=l_2} dx_3 + \int_h^H x_3 \sigma_{22}^-|_{x_2=l_2} dx_3
\end{aligned} \tag{23}$$

Чтобы найти напряжения из закона Гука, сделаем предположение, что $\varepsilon_{11}^{+/-} = A_1^{+/-} x_3 + B_1^{+/-}$, $\varepsilon_{22}^{+/-} = A_2^{+/-} x_3 + B_2^{+/-}$, и что $\sigma_{33} = 0$. Это предположение совпадает с результатами конечно-элементного моделирования (см. Приложение II). Из-за условий неразрывности мы получим, что $A_{1,2}^+ = A_{1,2}^- = A_{1,2}$, $B_{1,2}^+ = B_{1,2}^- = B_{1,2}$. В этом случае напряжения будут выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned}
\sigma_{11}^- &= \frac{E_-}{1-\nu_-^2} ((A_1 + \nu_- A_2) x_3 + B_1 + \nu_- B_2) \\
\sigma_{22}^- &= \frac{E_-}{1-\nu_-^2} ((\nu_- A_1 + A_2) x_3 + \nu_- B_1 + B_2) \\
\sigma_{11}^+ &= \frac{E_+}{1-\nu_+^2} ((A_1 + \nu_+ A_2) x_3 + B_1 + \nu_+ B_2) - \frac{E_+}{1-\nu_+} \varepsilon_{ch} \\
\sigma_{22}^+ &= \frac{E_+}{1-\nu_+^2} ((\nu_+ A_1 + A_2) x_3 + \nu_+ B_1 + B_2) - \frac{E_+}{1-\nu_+} \varepsilon_{ch}
\end{aligned} \tag{24}$$

Константы A_1, A_2, B_1, B_2 можно найти из уравнений (23). Функцию напряжений можно найти, заменив в (17) ε_{11} и ε_{22} на $\varepsilon_{11} = A_1 x_3 + B_1$, $\varepsilon_{22} = A_2 x_3 + B_2$ соответственно. При постоянном коэффициенте диффузии, проводя вычисления, аналогичные предыдущему пункту, получим, что $V \sim (1 - \frac{c_{eq}}{c_*})$. Если коэффициент диффузии зависит от напряжений, то в данном случае он принимает следующий вид:

$$D = D_0 e^{\left(\frac{E_+}{3(1-\nu_+)}((A_1+A_2)x_3+(B_1+B_2-2\varepsilon_{ch}))\right)} V_d/kT \Rightarrow D = D_0 e^{\tilde{A}x_3 + \tilde{B}} \tag{25}$$

Тогда задача (8) запишется следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial x_3} \left(D_0 e^{\tilde{A}x_3 + \tilde{B}} \frac{\partial c}{\partial x_3} \right) = 0 \Rightarrow \frac{d^2 c}{dx_3^2} + \tilde{A} \frac{dc}{dx_3} = 0 \tag{26}$$

Решением этого уравнения будет функция $c = c_1 e^{-\tilde{A}x_3} + c_2$, с граничными условиями (9), которые будут выглядеть как:

$$-D_0 e^{\tilde{B}} \tilde{A} c_1 + \alpha(c_* - c_1 - c_2) = 0, \quad -D_0 e^{\tilde{B}} \tilde{A} c_1 + n_*^2 k_* (c_1 e^{-\tilde{A}h} + c_2 - c_{eq}) = 0 \tag{27}$$

Окончательно, концентрация будет выглядеть следующим образом:

$$c = \frac{\alpha c_* n_*^2 k_* \left(1 - \frac{c_{\text{eq}}}{c_*}\right) e^{-\tilde{A}x_3} + D_0 e^{\tilde{B}} \tilde{A} c_* \left(\alpha + n_*^2 k_* \frac{c_{\text{eq}}}{c_*}\right) + \alpha n_*^2 k_* c_* \left(\frac{c_{\text{eq}}}{c_*} - e^{-\tilde{A}h}\right)}{D_0 e^{\tilde{B}} \tilde{A} (\alpha + n_*^2 k_*) + \alpha n_*^2 k_* (1 - e^{-\tilde{A}h})} \quad (28)$$

Скорость в этом случае запишется согласно следующей формуле:

$$V = \frac{n_- M_-}{\rho_-} \frac{D_0 e^{\tilde{B}} \tilde{A} \alpha c_* k_* n_* \left(1 - \frac{c_{\text{eq}}}{c_*}\right)}{D_0 e^{\tilde{B}} \tilde{A} (\alpha + n_*^2 k_*) + \alpha n_*^2 k_* (1 - e^{-\tilde{A}h})} \quad (29)$$

4 Численные вычисления для Si , O_2 и SiO_2

Дальнейшие вычисления будут проводиться с параметрами, приведенными в таблице (1). Выбор значений отвечает физическим параметрам Si и SiO_2 . Значения модулей Юнга и коэффициентов Пуассона, значение ε_{ch} было выбрано согласно [1] - эти значения были подобраны так, что при моделировании можно было не учитывать вязкость. Значения D_0 , k_* , α были взяты из работы [4] и [5]. Так как численные вычисления проводятся для того, чтобы продемонстрировать возможности модели, приведенные в таблице (1) параметры можно рассматривать как параметры искусственного материала.

Таблица 1: Параметры материалов

Параметры	Постоянная B_-	Постоянная B_+
Модули Юнга E , ГПа	163	60
Коэффициенты Пуассона ν	0,23	0,17
Деформации превращений ε_{ch}	-	0,03
Молярная масса M , г/моль	28,1	60,1
Плотность ρ , кг/м ³	2330	2200
Температура T , К		1173
Коэффициент диффузии D_0 , м ² /с		0,183e-7
Кинетическая константа реакции k_* , м/с		0,25e-7
Скорость растворимости молекул газа в новом материале α , м/с		0,028

4.1 Случай с заданными перемещениями на поверхности тела

Для начала рассмотрим случай с постоянным коэффициентом диффузии. В этом случае, согласно (22), $V \sim (1 - \frac{c_{eq}}{c_*})$. Построим зависимость $\frac{c_{eq}}{c_*}$ от различных деформаций. Отметим, что когда $\frac{c_{eq}}{c_*} > 1$, реакция не идет.

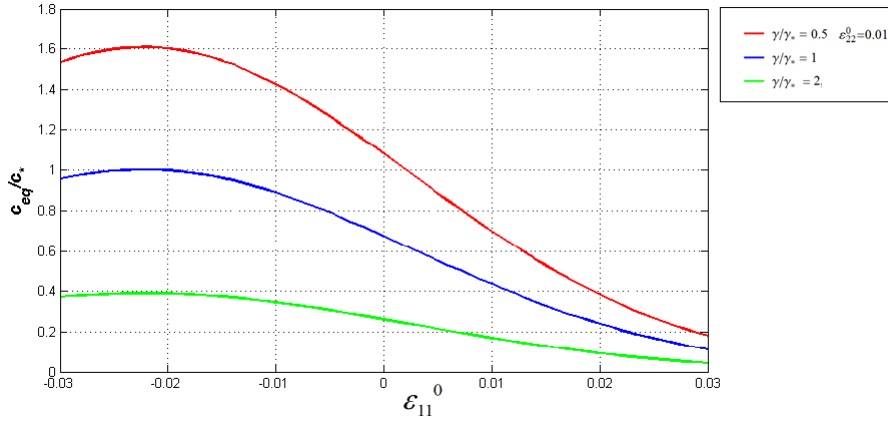


Рис. 2: Зависимость $\frac{c_{eq}}{c_*}$ от деформации ε_{11}^0 при разных значениях энергетического параметра γ .

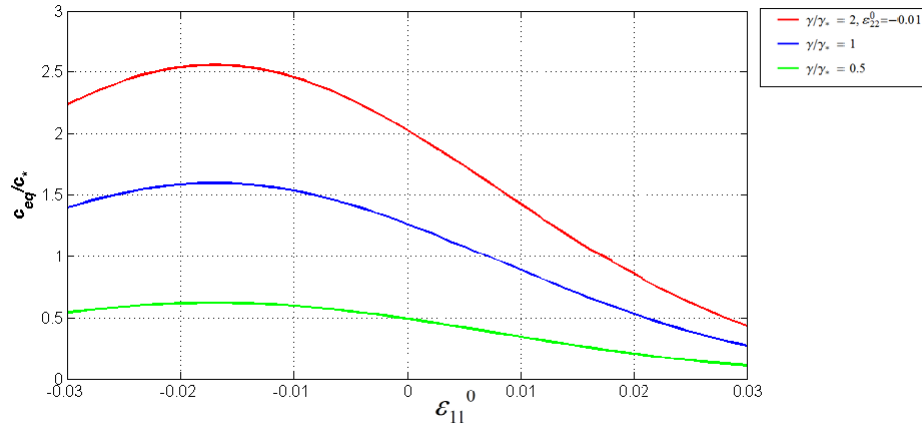


Рис. 3: Зависимость $\frac{c_{eq}}{c_*}$ от деформации ε_{11}^0 при разных значениях энергетического параметра γ .

Зависимость отношения $\frac{c_{eq}}{c_*}$ от деформаций немонотонна; максимального своего значения $\frac{c_{eq}}{c_*}$ достигает при

$$\varepsilon_{11}^0 = \varepsilon_{22}^0 = -\varepsilon_{ch} \left(\frac{(1 - \nu_+)E_-}{(1 - \nu_-)E_+} - 1 \right)^{-1} \quad (30)$$

Если одна из деформаций зафиксирована, то выражение для экстремума становится сложнее. Из этих графиков можно заметить, что, увеличивая энергетический параметр, не меняя при этом внешние нагрузки, реакция будет ускоряться ($\frac{c_{eq}}{c_*}$ уменьшается). Сравнивая Рис. 2, Рис. 3, Рис. 4, мы можем сказать, что если мы оставляем энергетический параметр γ постоянным и меняем деформации, то при уменьшении деформаций скорость распространения фронта реакции замедляется. Более наглядно это можно заметить из Рис. 5.

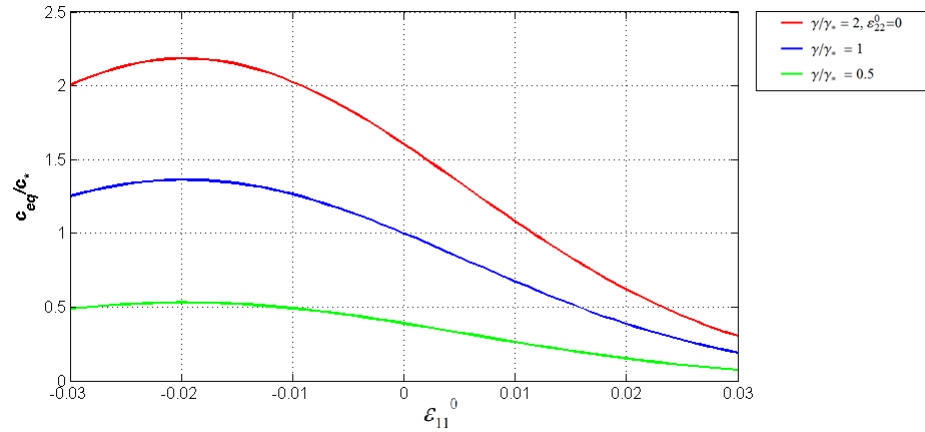


Рис. 4: Зависимость $\frac{c_{eq}}{c_*}$ от деформации ε_{11}^0 при разных значениях энергетического параметра γ .

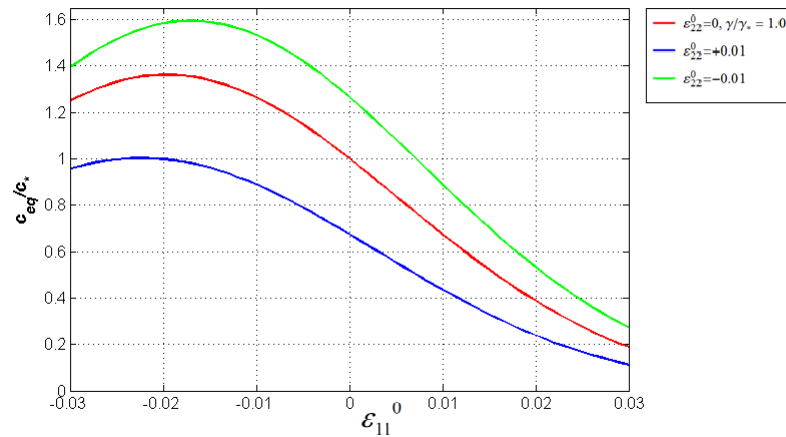


Рис. 5: Зависимость $\frac{c_{eq}}{c_*}$ от деформации ε_{11}^0 при разных значениях деформации ε_{22}^0

Рассмотрим теперь случай, когда коэффициент диффузии зависит от деформаций. Деформации постоянны и не зависят от координаты, поэтому профиль концентрации остается линейным, согласно выражению (21). Для сравнения того, как зависимость коэффициента диффузии влияет на скорость роста слоя нового материала, построим графики зависимости толщины слоя от нормированного времени $t_* = \frac{tH\rho_-}{n-M-n_*k_*D_0\alpha c_*}$ для разных деформаций. Из графиков мы можем увидеть, что реакция продвигается быстрее при растяжении, медленнее при сжатии. Это может быть объяснено тем, что с растяжением увеличивается расстояние между молекулами, поэтому диффузия протекает быстрее. Если же мы имеем нагрузку разных знаков, но одинаковую по модулю, мы получаем кривую, которая лежит близко к кривой с нулевыми деформациями: эффекты растяжения и сжатия взаимоуничтожаются. Полное взаимоуничтожение происходит при величинах

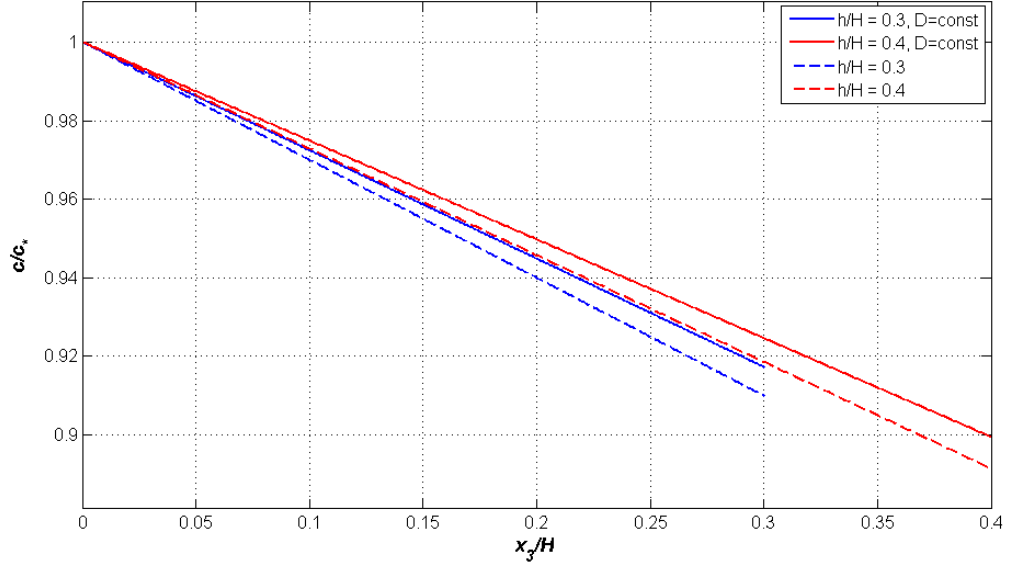


Рис. 6: Профили концентрации для постоянного и переменного коэффициента диффузии, $\varepsilon_{11}^0 = \varepsilon_{22}^0 = 0.01$.

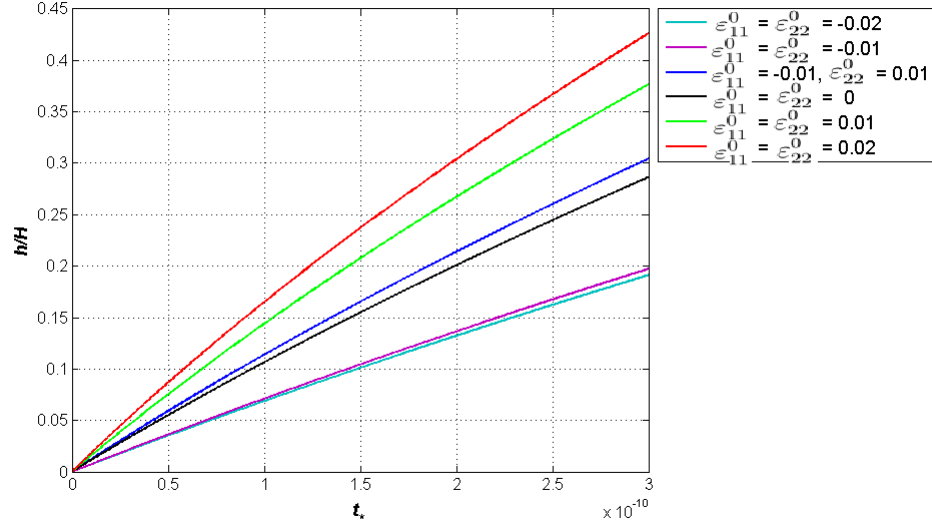


Рис. 7: Зависимость толщины слоя нового материала h/H от времени t_* при разных значениях деформаций, $\gamma/\gamma_* = 2$, коэффициент диффузии постоянный

деформаций, связанных следующим соотношением (полученным из (17)):

$$\begin{aligned} & \left(\frac{E_-}{1-\nu_-^2} - \frac{E_+}{1-\nu_+^2} \right) \varepsilon_{11}^0{}^2 + \left(\frac{E_-}{1-\nu_-^2} - \frac{E_+}{1-\nu_+^2} \right) \varepsilon_{22}^0{}^2 + \\ & + 2 \left(\frac{\nu_- E_-}{1-\nu_-^2} - \frac{\nu_+ E_+}{1-\nu_+^2} \right) \varepsilon_{11}^0 \varepsilon_{22}^0 + \frac{2E_+}{(1-\nu_+)} \varepsilon_{ch} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) = 0 \end{aligned} \quad (31)$$

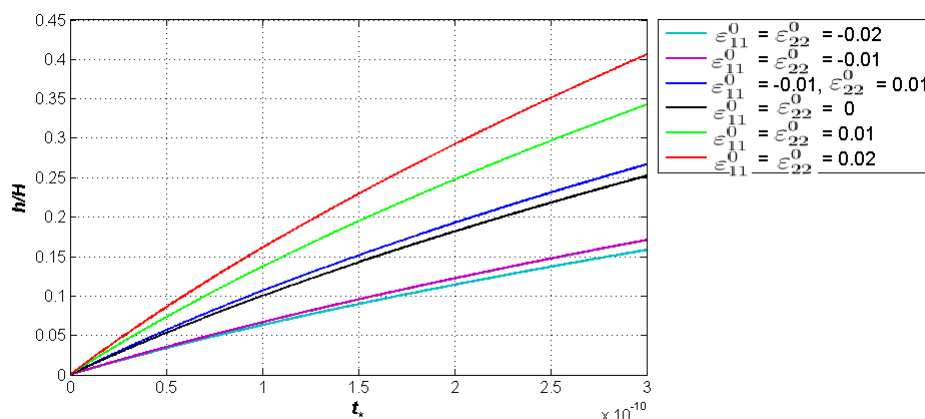


Рис. 8: Зависимость толщины слоя нового материала h/H от времени t_* при разных значениях деформаций, $\gamma/\gamma_* = 2$, коэффициент диффузии переменный

Построим разницу между двумя кривыми в зависимости от нормированного времени в процентном соотношении: $\frac{\frac{h}{H}(D(\varepsilon_{11}^0, \varepsilon_{22}^0)) - \frac{h}{H}(D_0)}{\frac{h}{H}(D_0)}$ Из Рис.(9) видно, что

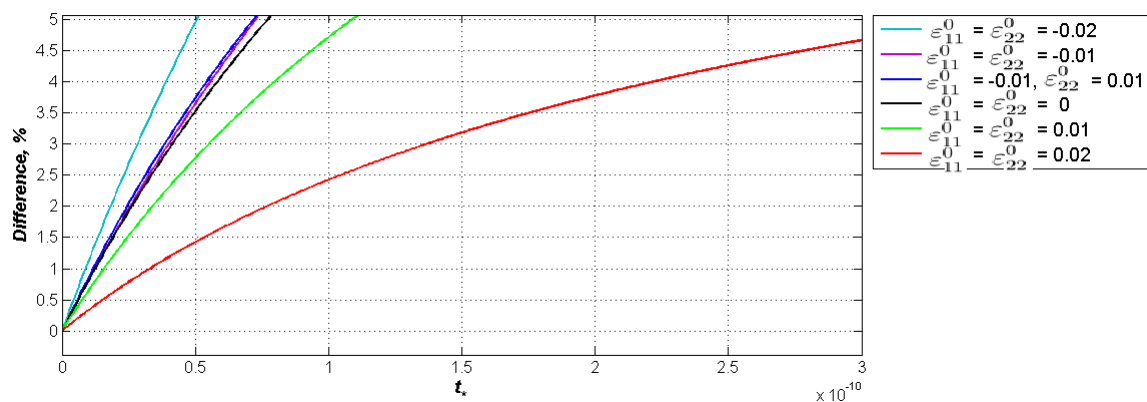


Рис. 9: Зависимость разницы между толщинами нового материала h/H с различным учетом коэффициента диффузии от времени t_* при разных значениях деформаций, $\gamma/\gamma_* = 2$

разница тем больше, чем меньше деформации. При положительных деформациях скорость роста разницы также меньше, чем при отрицательных деформациях. Это говорит о том, что при растяжении можно пренебречь зависимостью коэффициента диффузии от деформаций. Если не требуется абсолютная точность при вычислениях, то переменным коэффициентом диффузии можно пренебречь и в случае сжатия: разница между результатами в этом случае составит не более 15%.

4.2 Случай с заданными напряжениями на поверхности тела

Для удобства вычислений перейдем к $\overline{\sigma_{11}^0} = \sigma_{11}^0 / \frac{E_{+}}{1-\nu_{+}^2}$, $\overline{\sigma_{22}^0} = \sigma_{22}^0 / \frac{E_{+}}{1-\nu_{+}^2}$. Рассмотрим случай с постоянным коэффициентом диффузии. Тогда, как и в случае с заданными перемещениями, скорость будет зависеть только от $(1 - \frac{c_{eq}}{c_*})$. Построим зависимость $\frac{c_{eq}}{c_*}$ от различных напряжений. Напомним, что когда $\frac{c_{eq}}{c_*} > 1$, реакция не идет. Зависимость отношения $\frac{c_{eq}}{c_*}$ от толщины слоя монотонна; чем толще слой

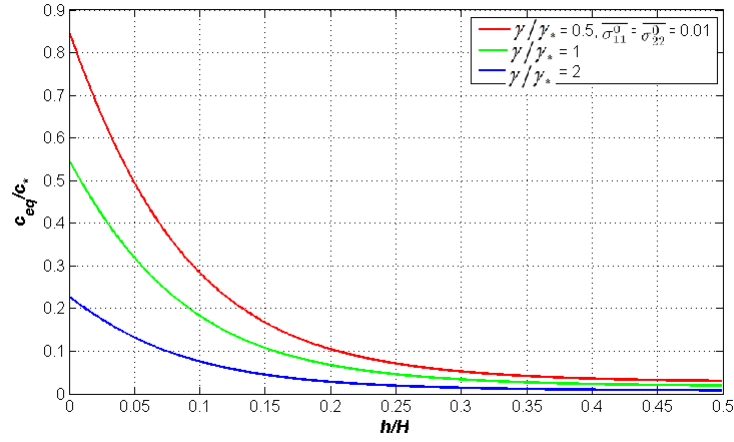


Рис. 10: Зависимость $\frac{c_{eq}}{c_*}$ от толщины h/H при разных значениях энергетического параметра γ , $\overline{\sigma_{11}^0} = \overline{\sigma_{22}^0} = 0,01$.

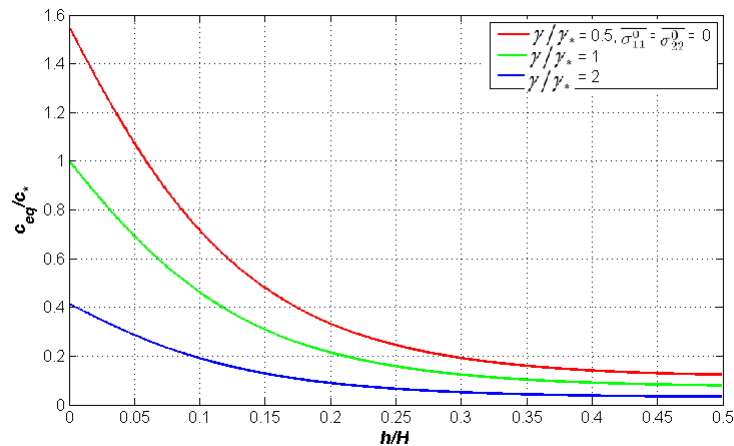


Рис. 11: Зависимость $\frac{c_{eq}}{c_*}$ от толщины h/H при разных значениях энергетического параметра γ , $\overline{\sigma_{11}^0} = \overline{\sigma_{22}^0} = 0$.

образовавшегося материала, тем больше значение $\frac{c_{eq}}{c_*}$. Сравнивая Рис. 10, Рис. 11, Рис. 12, мы можем сказать, что если мы оставляем энергетический параметр γ и значение толщины слоя h/H постоянными, меняя одни напряжения, то при умень-

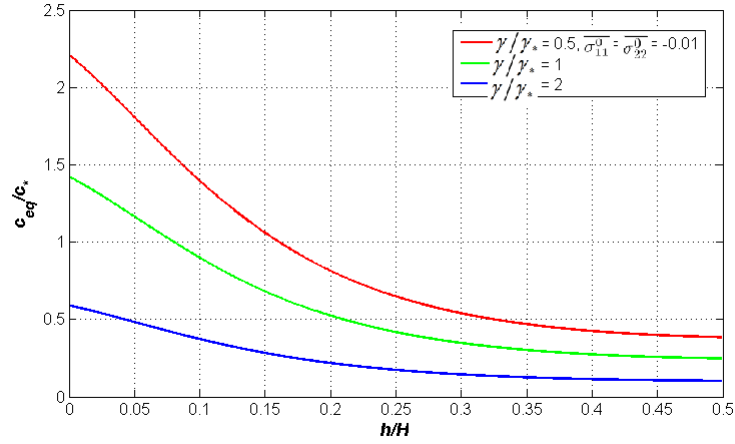


Рис. 12: Зависимость $\frac{c_{eq}}{c_*}$ от толщины h/H при разных значениях энергетического параметра γ , $\overline{\sigma_{11}^0} = \overline{\sigma_{22}^0} = -0,01$.

шении напряжений скорость распространения фронта реакции замедляется ($\frac{c_{eq}}{c_*}$ увеличивается). Более наглядно это можно заметить из Рис. 13.

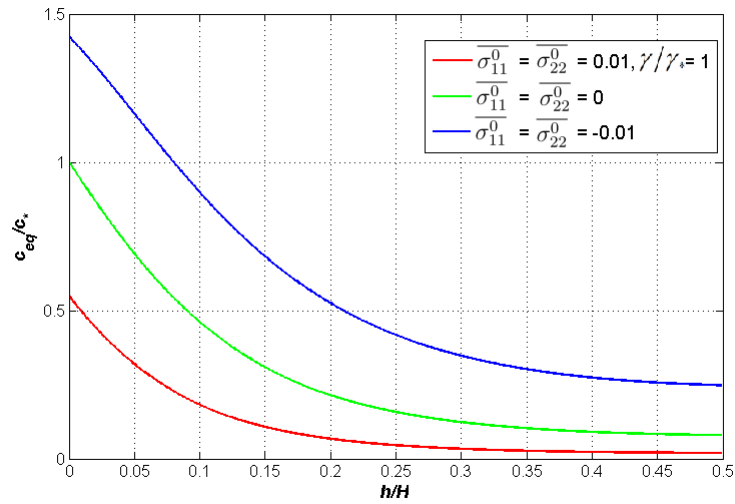


Рис. 13: Зависимость $\frac{c_{eq}}{c_*}$ от толщины h/H при разных значениях напряжений $\overline{\sigma_{11}^0}, \overline{\sigma_{22}^0}$

Рассмотрим теперь случай, когда коэффициент диффузии зависит от деформаций. Деформации зависят от координаты линейно, поэтому профиль концентрации определяется согласно выражению (28). Для сравнения того, как зависимость

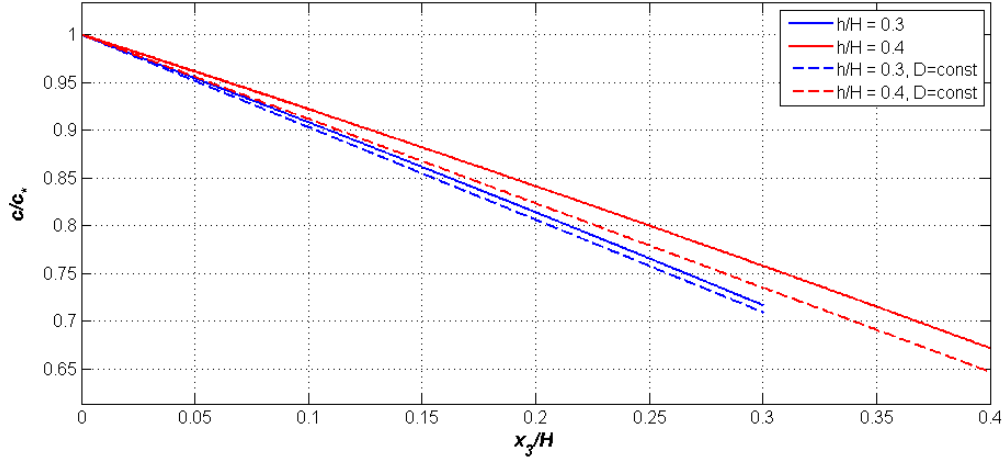


Рис. 14: Профили концентрации при различных коэффициентах диффузии, $\overline{\sigma_{11}^0} = \overline{\sigma_{22}^0} = 0.01$.

коэффициента диффузии влияет на скорость роста слоя нового материала, построим графики зависимости толщины слоя от времени для разных деформаций. Как и в случае заданных перемещений, при сжатии новый слой растет медлен-

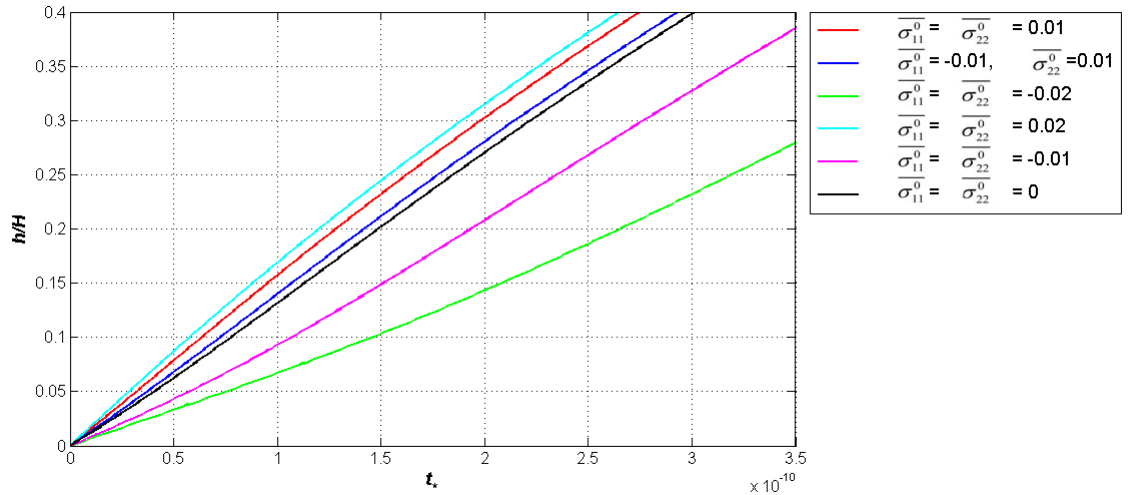


Рис. 15: Зависимость толщины h/H от времени t_* при разных значениях $\overline{\sigma_{11}^0}$ и $\overline{\sigma_{22}^0}$, $\gamma/\gamma_* = 2$, коэффициент диффузии постоянен.

нее, чем при растяжении. Однако в случае заданных напряжений разница между вычислениями с постоянным коэффициентом диффузии больше. В этом случае аналитическое решение дифференциального уравнения (6) не удалось, поэтому

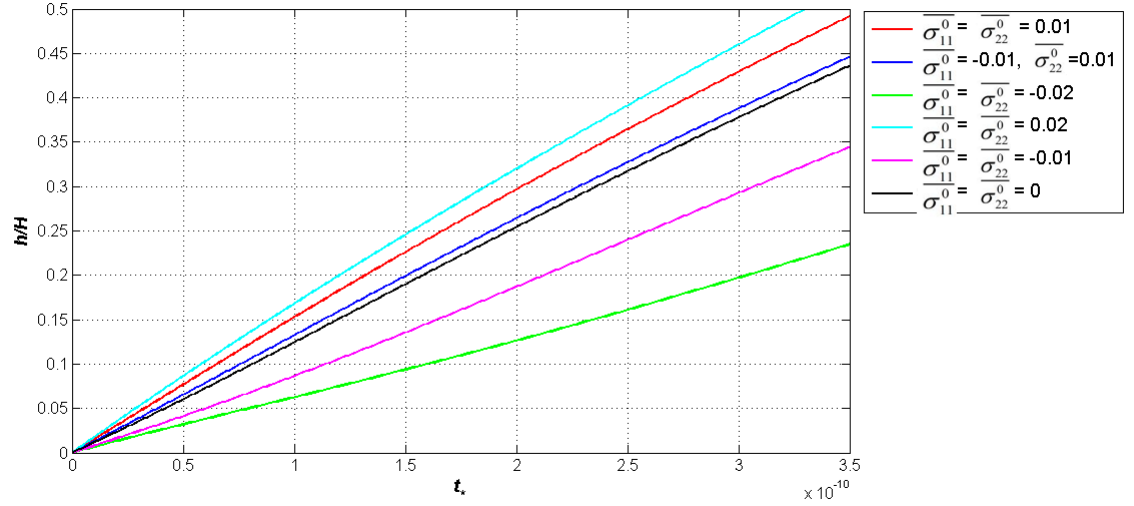


Рис. 16: Зависимость толщины h/H от времени t_* при разных значениях $\overline{\sigma_{11}^0}$ и $\overline{\sigma_{22}^0}$, $\gamma/\gamma_* = 2$, коэффициент диффузии переменный.

количественно оценить разницу не представляется возможным. Рассмотрим более подробно разницу между кривыми, построенной с постоянным коэффициентом диффузии, и кривыми, построенными с учетом переменного коэффициента диффузии.

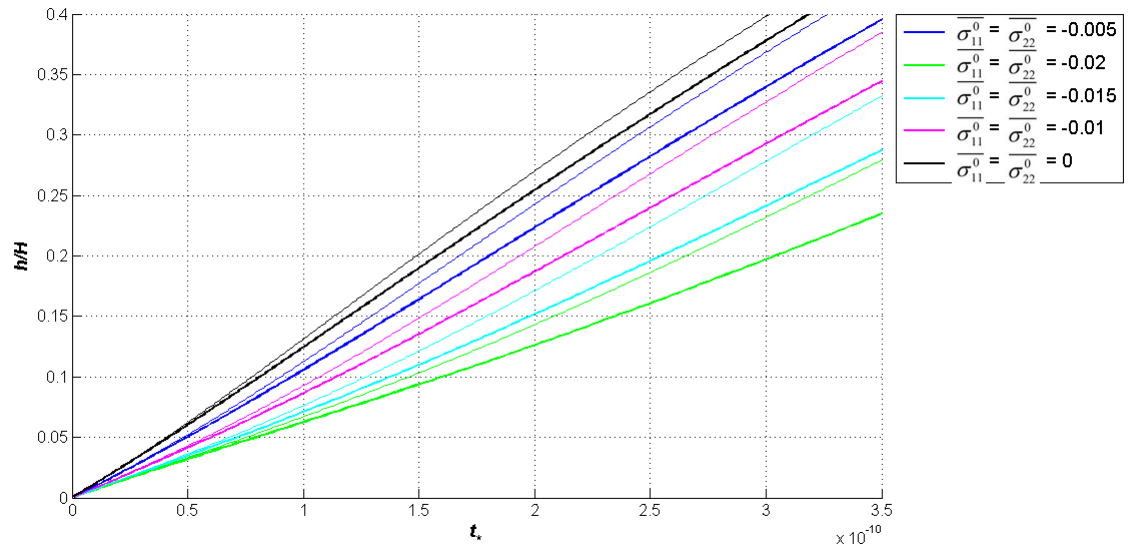


Рис. 17: Зависимость толщины h/H от времени t_* при разных значениях $\overline{\sigma_{11}^0}$ и $\overline{\sigma_{22}^0}$, $\gamma/\gamma_* = 2$, жирные линии - коэффициент диффузии переменный.

Из рис.(17), (18),(19) видно, что учет переменного коэффициента диффузии затормаживает реакцию. Кроме того, можно заметить, что при уменьшении величин напряжений растет разница между кривыми, особенно велика она в случае отрицательных напряжений (Рис.(17)), поэтому зависимостью коэффициента диффузии

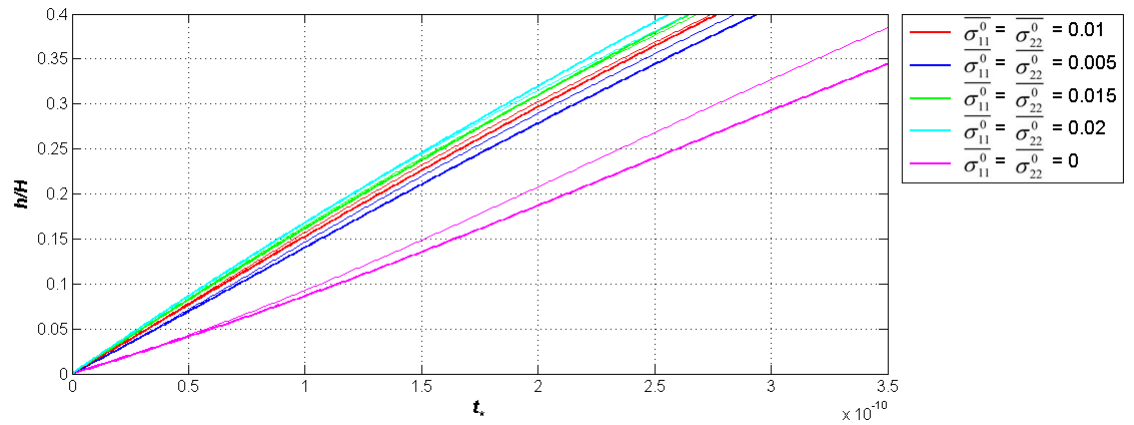


Рис. 18: Зависимость толщины h/H от времени t_* при разных значениях $\overline{\sigma_{11}^0}$ и $\overline{\sigma_{22}^0}$, $\gamma/\gamma_* = 2$, жирные линии - коэффициент диффузии переменный.

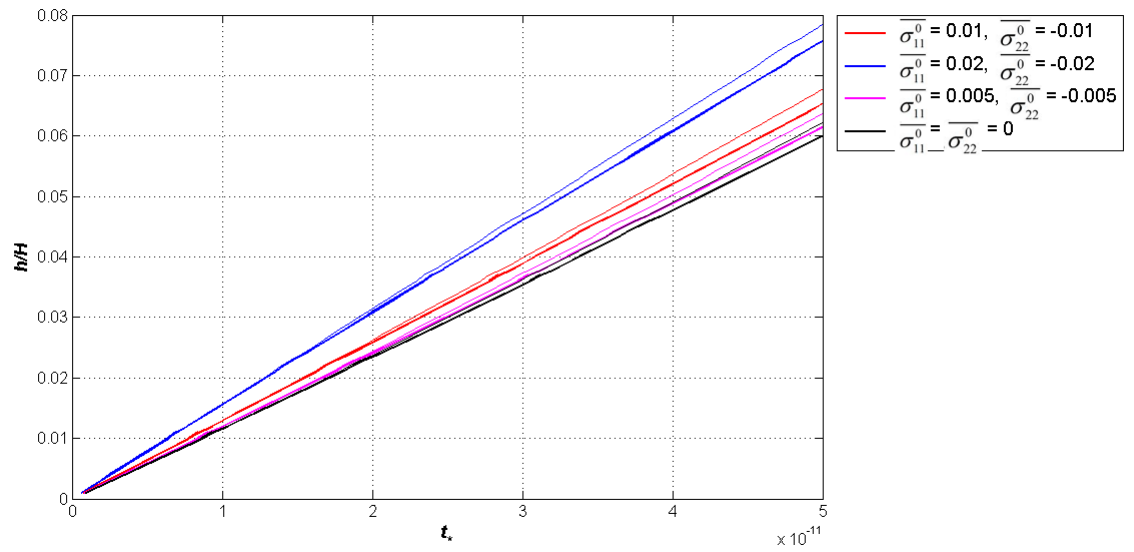


Рис. 19: Зависимость толщины h/H от времени t_* при разных значениях $\overline{\sigma_{11}^0}$ и $\overline{\sigma_{22}^0}$, $\gamma/\gamma_* = 2$, жирные линии - коэффициент диффузии переменный.

от напряжений пренебрегать нельзя. В случае напряжений разных знаков кривые, как и в случае заданных перемещений, лежат близко к кривой с нулевыми напряжениями (Рис.(19)).

5 Заключение

Мы проанализировали подход Фрейдина и Вильчевской [1] к моделированию химических реакций под действием механических нагрузок между газовой и твердой компонентой, основывающийся на тензорном представлении химического средства. Был изучен простейший пример: твердые компоненты - линейно-упругие, фронт реакции является плоскостью и распространяется вдоль одной из осей. Что немаловажно, модель была изучена аналитически, поэтому этот пример может быть полезным для понимания общей проблемы. В этой работе был получен широкий ассортимент поведения реакции, от ускорения до блокировки реакции при некоторых значениях энергетического параметра и механических нагрузок. Мы также рассмотрели модель диффузии, зависящей от внешних напряжений, и сравнили результаты с результатами, полученными при расчете модели с постоянным коэффициентом диффузии. Мы получили набор параметров, при которых мы можем не учитывать зависимость диффузии от механических нагрузок. Новыми результатами являются:

1. Были проанализированы две аналитические трехмерные модели, блок со сторонами, на которых заданы (i) перемещения и (ii) напряжения. В обоих случаях было проанализировано влияние постоянного и зависящего от напряжений коэффициента диффузии. Стоит заметить, что эта проблема не исследовалась ранее вкуче с задачей о скорости распространения химического фронта.
2. Для случая (i) было получено:
 - Различные комбинации деформаций могут кардинально ускорить или замедлить реакцию. Зависимость скорости фронта химической реакции от деформаций является немонотонным. В общем, можно сказать, что реакция продвигается быстрее при растяжении тела (см. Рис. 2 - 4)
 - Ускорить реакцию может также увеличение энергетического параметра, и наоборот, его уменьшение ведет к замедлению реакции.
 - Для случая непостоянного коэффициента диффузии мы получили, что реакция распространяется быстрее с растяжением и медленнее с сжатием. Это можно объяснить тем, что напряжения влияют на путь молекул диффундирующего газа, этот эффект в этой работе впервые был оценен количественно. Если же тело находится под действием деформаций, одинаковых по модулю, но разных знаков, кривая роста слоя нового материала в этом случае очень близка к кривой роста без внешних нагрузок: эффекты от сжатия и растяжения взаимоуничтожаются. (см Рис.8).
 - Говоря о разнице между кривыми, полученными с учетом переменного и постоянного коэффициента диффузии, можно заметить, что коэффициент диффузии оказывает более сильное влияние при сжатии материала. В общем случае можно пренебречь постоянным коэффициентом диффузии (см Рис.9)

3. Для случая (ii) было получено:

- Существует сходство со случаем (i): реакция замедляется при сжатии и ускоряется при растяжении.
- В этом случае скорость фронта реакции также зависит и от толщины нового материала. Мы можем заметить, что реакция ускоряется с ростом слоя. При некоторых значениях толщины слоя при сжатии реакция блокируется, поэтому тонкий слой материала может играть роль защитного слоя.
- Для случая переменного коэффициента диффузии мы получили, что реакция распространяется быстрее с растяжением и медленнее с сжатием, как и в случае для заданных перемещений.
- В случае заданных напряжений разница между кривыми роста для постоянного и переменного коэффициента диффузии очень велика, так что расчеты с постоянным коэффициентом диффузии должны быть использованы только для общей оценки процесса.

Также было получены следующие результаты:

- Строгий вывод аналитического решения (см. Приложение I, Приложение III)
- Подход с использованием линейных деформаций в случае (ii) (см. Приложение III)
- Проверка подхода путем сравнения результатов с результатами конечно-элементного моделирования для случая (ii) (см. Приложение II)

Дальнейшие исследования могут учитывать вязкость и эффекты релаксации напряжений; депланированный фронт химической реакции и более сложные геометрические формы материала.

Список литературы

- [1] Freidin, A.B., Vilchevskaya, E. N., Korolev, I. K.: Stress-assist chemical reactions front propagation in deformable solids. International Journal of Engineering Science, 83 (2014), pp. 57-75.
- [2] Prigogine, I., Defay, R.: Chemical thermodynamics. London: Longmans, Green, 1954.
- [3] Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuation. Wiley Interscience, London, 1971, pg. 50.
- [4] Ming-Tzer Lin.: Stress effects and oxidant diffusion in the planar oxidation. (1999). Thesis and Dissertation, Lehigh University. Paper 594
- [5] B.E.Deal, A.S. Grove: General relationship for the thermal oxidation of Silicon. Journal of Applied Physics, vol.36(12), December 1965.

6 Приложение I. Вывод формул для случая заданных перемещений

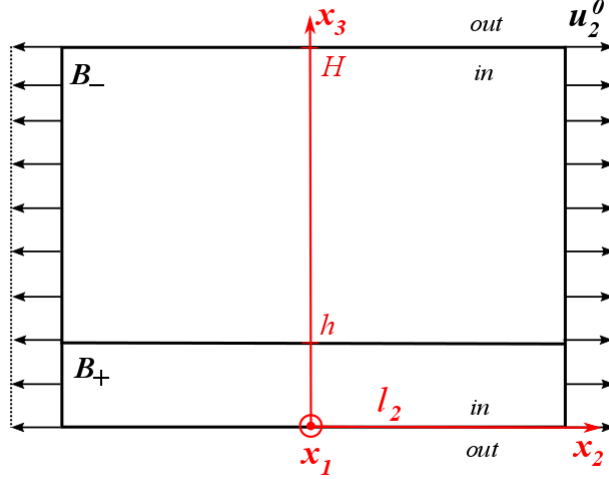


Рис. 20: Модель блока.

Рассматриваем трехмерный прямоугольный блок: $x_1 \in [-l_1, l_1]$, $x_2 \in [-l_2, l_2]$, $x_3 \in [-0, H]$ (см. рис(20)), с фронтом реакции, распространяющимся вдоль оси x_3 и представляющим собой плоскость $x_3 = h$. Перемещения на внешней поверхности тела заданы следующим образом:

$$\begin{aligned} u_1^{+/-} \left(x_1 = \pm l_1, x_2 \in [-l_2, l_2], x_3 \in \begin{cases} (0, h) \text{ if } + \\ (h, H) \text{ if } - \end{cases} \right) &= u_1^0 \\ u_2^{+/-} \left(x_1 \in [-l_1, l_1], x_2 = \pm l_2, x_3 \in \begin{cases} (0, h) \text{ if } + \\ (h, H) \text{ if } - \end{cases} \right) &= u_2^0 \end{aligned} \quad (1)$$

Считаем, что вне блока - вакуум, поэтому $\sigma^{\text{out}} = 0$. Следовательно, внизу блока ($x_1 \in [-l_1, l_1]$, $x_2 \in [-l_2, l_2]$, $x_3 = 0$) имеем: $\mathbf{n} \cdot \llbracket \sigma \rrbracket = 0$, откуда:

$$\llbracket \sigma_{3i} \rrbracket = 0, i = \overline{1, 3} \Rightarrow \sigma_{i3}^+(x_1 \in [-l_1, l_1], x_2 \in [-l_2, l_2], x_3 = 0) = 0, i = \overline{1, 3} \quad (2)$$

Аналогично получаем и для верха блока ($x_1 \in [-l_1, l_1]$, $x_2 \in [-l_2, l_2]$, $x_3 = H$):

$$\sigma_{i3}^-(x_1 \in [-l_1, l_1], x_2 \in [-l_2, l_2], x_3 = H) = 0, i = \overline{1, 3} \quad (3)$$

На фронте реакции $x_3 = h$ помимо условий отсутствия скачка напряжений $\mathbf{n} \cdot \llbracket \sigma \rrbracket = 0$ имеем также условие непрерывности поля напряжений, $\mathbf{t} \cdot \llbracket \sigma \rrbracket = 0$, где \mathbf{t} - касательный вектор к плоскости фронта реакции. Будем иметь следующие условия:

$$\begin{aligned} \sigma_{i3}^+(x_1 \in [-l_1, l_1], x_2 \in [-l_2, l_2], x_3 = h) &= \sigma_{i3}^-(x_1 \in [-l_1, l_1], x_2 \in [-l_2, l_2], x_3 = h) \\ \varepsilon_{1i}^+(x_1 \in [-l_1, l_1], x_2 \in [-l_2, l_2], x_3 = h) &= \varepsilon_{1i}^-(x_1 \in [-l_1, l_1], x_2 \in [-l_2, l_2], x_3 = h) \\ \varepsilon_{2i}^+(x_1 \in [-l_1, l_1], x_2 \in [-l_2, l_2], x_3 = h) &= \varepsilon_{2i}^-(x_1 \in [-l_1, l_1], x_2 \in [-l_2, l_2], x_3 = h) \end{aligned} \quad (4)$$

В теле нет объемных сил, поэтому уравнение равновесия будут выглядеть следующим образом:

$$\nabla \cdot \sigma^{+/-} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \sigma_{ji}^{+/-}}{\partial x_j} = 0, \quad i = \overline{1,3} \quad (5)$$

$$\sigma_{ij}^- = \lambda^- \text{tr} \varepsilon \delta_{ij} + 2\mu^- \varepsilon_{ij}^-, \quad \sigma_{ij}^+ = \lambda^+ \text{tr} \varepsilon \delta_{ij} + 2\mu^+ \varepsilon_{ij}^+ - 3k^+ \varepsilon_{\text{ch}} \delta_{ij} \quad (6)$$

где δ_{ij} - дельта Кронекера. Считаем, что $\varepsilon_{\text{ch}} = \text{const}$, $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^{+/-}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^{+/-}}{\partial x_i} \right)$.

Комбинируя (5) и (6), получим:

$$\lambda^{+/-} \frac{\partial^2 u_k^{+/-}}{\partial x_i \partial x_k} + \mu^{+/-} \frac{\partial^2 u_i^{+/-}}{\partial x_j \partial x_j} = 0 \quad (7)$$

Для того, чтобы удовлетворить граничным условиям и уравнениям (7), полагаем $u_1^{+/-} = u_1^{+/-}(x_1)$, $u_2^{+/-} = u_2^{+/-}(x_2)$, $u_3^{+/-} = u_3^{+/-}(x_3)$. Тогда $\varepsilon_{11}^{+/-} = \frac{du_1^{+/-}}{dx_1}$, $\varepsilon_{22}^{+/-} = \frac{du_2^{+/-}}{dx_2}$, $\varepsilon_{33}^{+/-} = \frac{du_3^{+/-}}{dx_3}$, $\varepsilon_{ij}^\pm = 0, i \neq j$. Уравнения (7) запишутся следующим образом:

$$\lambda^{+/-} \frac{du_i^{+/-}}{dx_i} = 0, \quad i = \overline{1,3} \quad \Rightarrow \quad u_i^{+/-} = A_i^{+/-} x_i + B_i^{+/-} \quad (8)$$

Считаем, что

$$u_1^{+/-}(x_1 = 0) = 0, \quad u_2^{+/-}(x_2 = 0) = 0, \quad u_3^+(x_3 = 0) = 0, \quad u_3^+(x_3 = h) = u_3^-(x_3 = h) \quad (9)$$

откуда

$$B_1^{+/-} = 0, \quad B_2^{+/-} = 0, \quad B_3^+ = 0, \quad B_3^- = (A_3^+ - A_3^-) h \quad (10)$$

Из (6) имеем:

$$\begin{aligned} \sigma_{ii}^- &= \lambda^- (A_1^- + A_2^- + A_3^-) + 2\mu^- A_i^- \\ \sigma_{ii}^+ &= \lambda^+ (A_1^+ + A_2^+ + A_3^+) + 2\mu^+ A_i^+ - 3k^+ \varepsilon_{\text{ch}}, \quad i = \overline{1,3} \\ \sigma_{ji}^{+/-} &= 0, \quad i \neq j \end{aligned} \quad (11)$$

Из (1) получаем:

$$\begin{aligned} A_1^+ l_1 = u_1^0 &\Rightarrow A_1^+ = \frac{u_1^0}{l_1} \stackrel{\text{def.}}{=} \varepsilon_{11}^0, & A_1^- l_1 = u_1^0 &\Rightarrow A_1^- = \frac{u_1^0}{l_1} = \varepsilon_{11}^0 \\ A_2^+ l_2 = u_2^0 &\Rightarrow A_2^+ = \frac{u_2^0}{l_2} \stackrel{\text{def.}}{=} \varepsilon_{22}^0, & A_2^- l_2 = u_2^0 &\Rightarrow A_2^- = \frac{u_2^0}{l_2} = \varepsilon_{22}^0 \end{aligned} \quad (12)$$

Из (2):

$$\begin{aligned} A_2^+ l_2 = u_2^0 &\Rightarrow A_2^+ = \frac{u_2^0}{l_2} \stackrel{\text{def.}}{=} \varepsilon_{22}^0, & A_2^- l_2 = u_2^0 &\Rightarrow A_2^- = \frac{u_2^0}{l_2} = \varepsilon_{22}^0 \\ \varepsilon_{33}^+ = A_3^+ &= -\frac{\lambda^+}{\lambda^+ + 2\mu^+} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) + \frac{3k^+}{\lambda^+ + 2\mu^+} \varepsilon_{\text{ch}} \end{aligned} \quad (13)$$

Аналогично из (3):

$$\lambda^- (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0 + A_3^-) + 2\mu^- A_3^- = 0 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_{33}^- = A_3^- = -\frac{\lambda^-}{\lambda^- + 2\mu^-} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) \quad (14)$$

Условия (4) выполняются тождественно, никаких противоречий не возникает ($A_1^+ = A_1^- = \varepsilon_{11}^0, A_2^+ = A_2^- = \varepsilon_{22}^0$), значит, все предположения были сделаны верно. Итак, напряжения запишутся следующим образом:

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^+ &= \lambda^+ \left(\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0 - \frac{\lambda^+}{\lambda^+ + 2\mu^+} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) + \frac{3k^+}{\lambda^+ + 2\mu^+} \varepsilon_{\text{ch}} \right) + 2\mu^+ \varepsilon_{11}^0 - 3k^+ \varepsilon_{\text{ch}} \\ \sigma_{22}^+ &= \lambda^+ \left(\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0 - \frac{\lambda^+}{\lambda^+ + 2\mu^+} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) + \frac{3k^+}{\lambda^+ + 2\mu^+} \varepsilon_{\text{ch}} \right) + 2\mu^+ \varepsilon_{22}^0 - 3k^+ \varepsilon_{\text{ch}} \\ \sigma_{11}^- &= \lambda^- \left(\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0 - \frac{\lambda^-}{\lambda^- + 2\mu^-} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) \right) + 2\mu^- \varepsilon_{11}^0 \\ \sigma_{22}^- &= \lambda^- \left(\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0 - \frac{\lambda^-}{\lambda^- + 2\mu^-} (\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0) \right) + 2\mu^- \varepsilon_{22}^0 \end{aligned} \quad (15)$$

7 Приложение II. Проверка линейности деформаций конечно-элементным моделированием

Моделирование проводится в пакете ANSYS. Рассмотрим прямоугольный блок, разбитый на две области, отвечающие областям, которые занимают материалы B_- и B_+ соответственно. Поскольку в пакете не предусмотрено специфическое задание деформации химических превращений, на часть блока, отвечающего материалу B_+ , подается температурное условие так, чтобы температурные деформации максимально соответствовали значению из Табл.1. Рассмотрим деформации

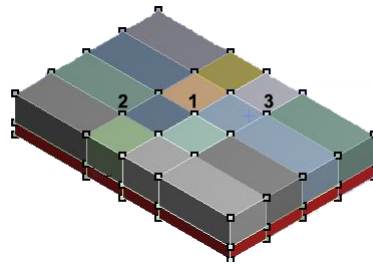


Рис. 21: Общий вид блока. Нижняя выделенная область отвечает области, занятой материалом B_+ .

в точках 1, 2, 3, чтобы убедиться, что деформации зависят только от координаты x_3 . Видим, что деформации совпадают для точек с разными координатами x_1 и

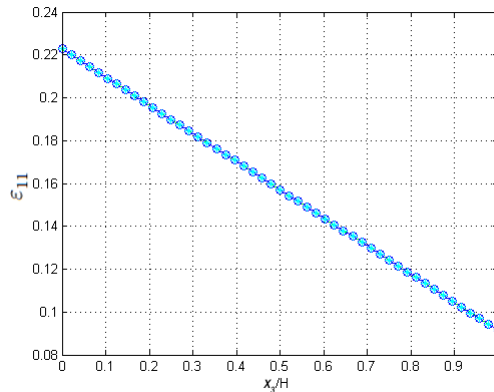


Рис. 22: Зависимость ϵ_{11} от x_3 в точках 1, 2, 3.

x_2 , поэтому, действительно, ϵ_{11} и ϵ_{22} не зависят от этих координат. Далее станем рассматривать деформации в точке 1. Во всех этих случаях деформация линейна. Построим теперь зависимость деформаций от координаты при ином соотношении h/H и сравним с теоретическими результатами. Жирными линиями показаны кривые, полученные в результате моделирования, узкими - теоретические результаты для аналогичных нагрузок. Видим, что, во-первых, зависимость деформаций остается линейной и для другого соотношения h/H , во-вторых, разница с теоретическими показаниями мала и обусловлена в первую очередь неточно сов-

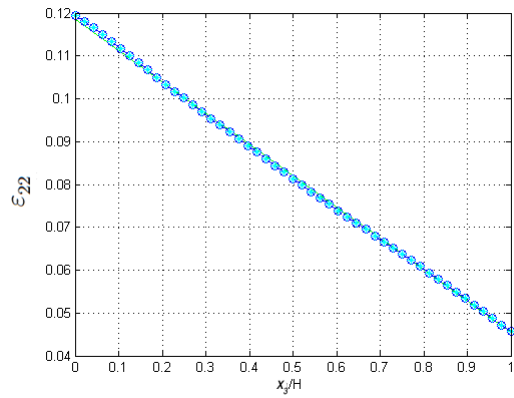


Рис. 23: Зависимость ϵ_{22} от x_3 в точках 1, 2, 3.

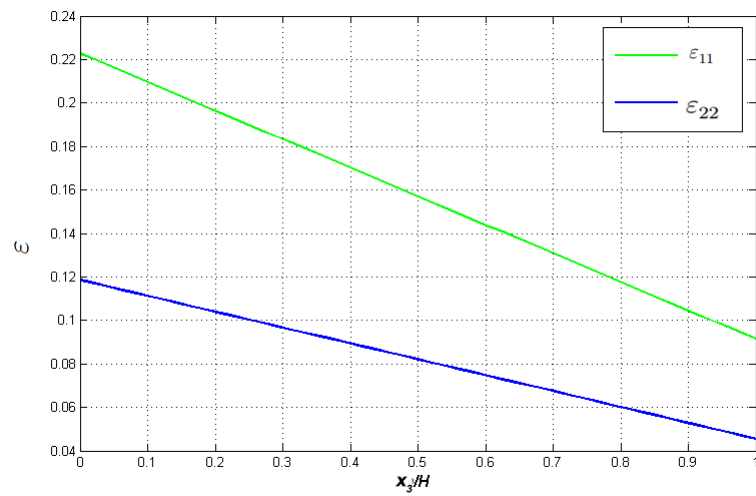


Рис. 24: Зависимость ϵ_{11} и ϵ_{22} от x_3 при силах, работающих на растяжение, $h/H = 0.2$.

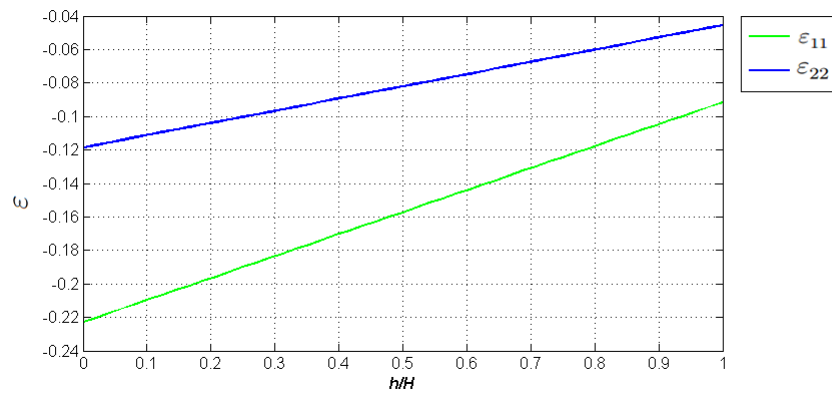


Рис. 25: Зависимость ϵ_{11} и ϵ_{22} от x_3 при силах, работающих на сжатие, $h/H = 0.2$.

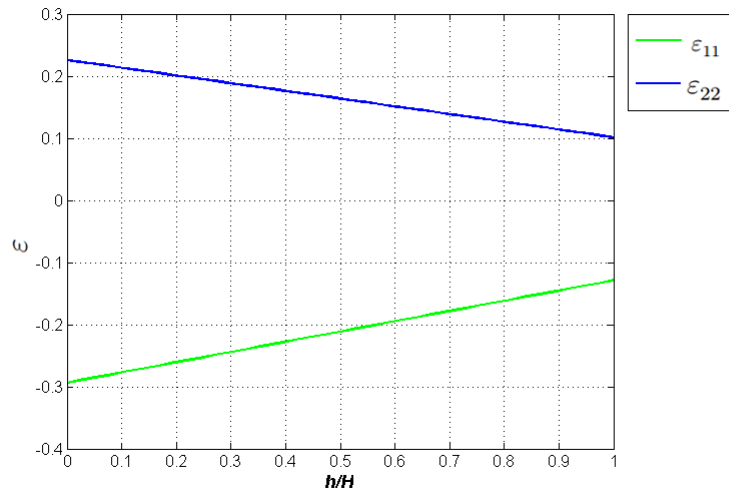


Рис. 26: Зависимость ϵ_{11} и ϵ_{22} от x_3 при силах разного знака, $h/H = 0.2$.

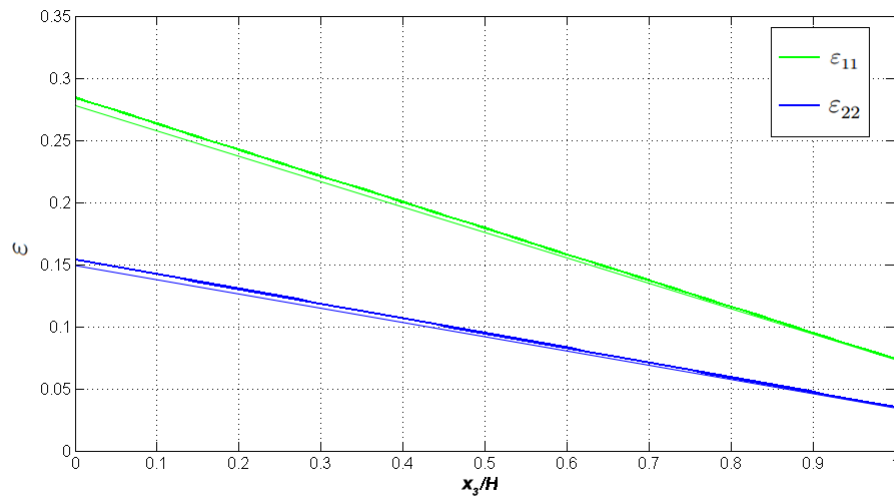


Рис. 27: Зависимость ϵ_{11} и ϵ_{22} от x_3 при силах, работающих на растяжение, $h/H = 0.3$.

падающими начальными условиями. Предположение о линейности деформаций можно считать верным.

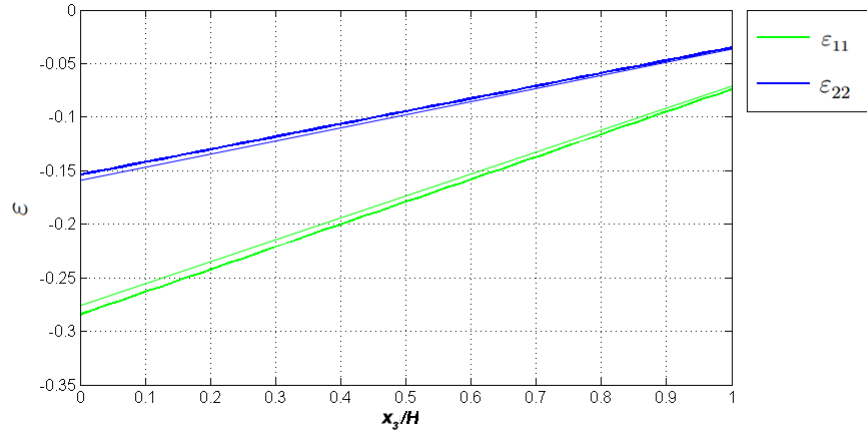


Рис. 28: Зависимость ϵ_{11} и ϵ_{22} от x_3 при силах, работающих на сжатие, $h/H = 0.3$.

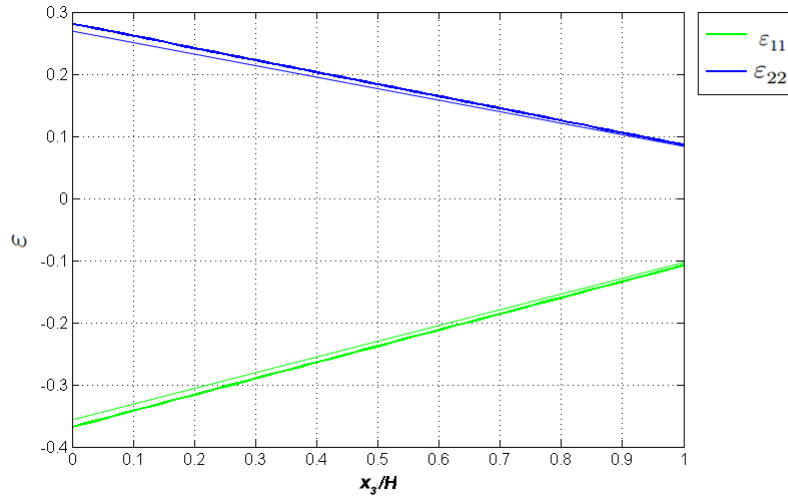


Рис. 29: Зависимость ϵ_{11} и ϵ_{22} от x_3 при силах разного знака, $h/H = 0.3$.

8 Приложение III. Вывод формул для случая заданных напряжений

Рассматриваем трехмерный прямоугольный блок: $x_1 \in [-l_1, l_1]$, $x_2 \in [-l_2, l_2]$, $x_3 \in [-0, H]$ (см. рис(30)), с фронтом реакции, распространяющимся вдоль оси x_3 и представляющим собой плоскость $x_3 = h$. На поверхности заданы напряжения

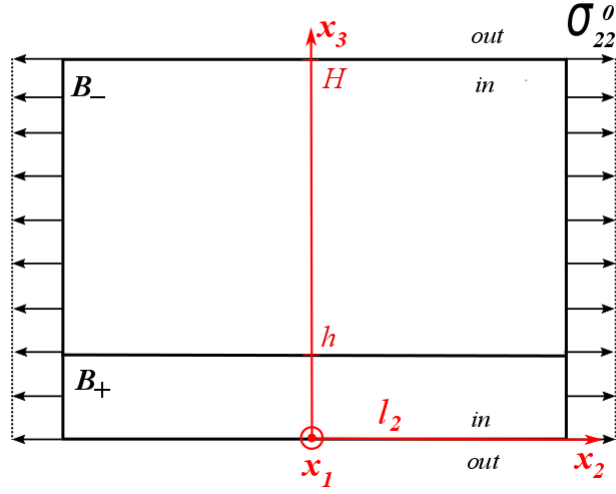


Рис. 30: Модель блока.

$\sigma_{11}^0, \sigma_{22}^0$, отвечающие условиям баланса сил и моментов:

$$\begin{aligned}
\int_0^H \sigma_{11}^0 dx_3 &= \int_0^h \sigma_{11}^+|_{x_1=l_1} dx_3 + \int_h^H \sigma_{11}^-|_{x_1=l_1} dx_3, \\
\int_0^H \sigma_{22}^0 dx_3 &= \int_0^h \sigma_{22}^+|_{x_2=l_2} dx_3 + \int_h^H \sigma_{22}^-|_{x_2=l_2} dx_3 \\
\int_0^H x_3 \sigma_{11}^0 dx_3 &= \int_0^h x_3 \sigma_{11}^+|_{x_1=l_1} dx_3 + \int_h^H x_3 \sigma_{11}^-|_{x_1=l_1} dx_3, \\
\int_0^H x_3 \sigma_{22}^0 dx_3 &= \int_0^h x_3 \sigma_{22}^+|_{x_2=l_2} dx_3 + \int_h^H x_3 \sigma_{22}^-|_{x_2=l_2} dx_3
\end{aligned} \tag{1}$$

Считаем, что деформации в теле могут быть найдены как

$$\varepsilon_{11}^{+/-} = A_1^{+/-} x_3 + B_1^{+/-}, \quad \varepsilon_{22}^{+/-} = A_2^{+/-} x_3 + B_2^{+/-} \tag{2}$$

Перемещения могут быть найдены путем интегрирования формулы (2).

$$\begin{aligned}
u_1^{+/-} &= A_1^{+/-} x_3 x_1 + B_1^{+/-} x_1 + C_1^{+/-}(x_2, x_3) \\
u_2^{+/-} &= A_2^{+/-} x_3 x_2 + B_2^{+/-} x_2 + C_2^{+/-}(x_1, x_3)
\end{aligned} \tag{3}$$

Из условий симметрии перемещений имеем:

$$u_1^{+/-}(x_1, x_2, x_3) = -u_1^{+/-}(-x_1, x_2, x_3) \Rightarrow C_1^{+/-}(x_2, x_3) = -C_1^{+/-}(x_2, x_3) \tag{4}$$

откуда $C_1^{+/-}(x_2, x_3) = 0$. Аналогично и $C_2^{+/-}(x_1, x_3) = 0$. Итак, окончательно, имеем:

$$u_1^{+/-} = A_1^{+/-} x_3 x_1 + B_1^{+/-} x_1, \quad u_2^{+/-} = A_2^{+/-} x_3 x_2 + B_2^{+/-} x_2 \tag{5}$$

Отсюда мы можем получить значения деформаций:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{12}^{+/-} &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_1^{+/-}}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2^{+/-}}{\partial x_1} \right] = 0 \\ \varepsilon_{13}^{+/-} &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_1^{+/-}}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3^{+/-}}{\partial x_1} \right] = \frac{1}{2} \left[A_1^{+/-} x_1 + \frac{\partial u_3^{+/-}}{\partial x_1} \right] \\ \varepsilon_{23}^{+/-} &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_3^{+/-}}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2^{+/-}}{\partial x_3} \right] = \frac{1}{2} \left[A_2^{+/-} x_2 + \frac{\partial u_3^{+/-}}{\partial x_1} \right]\end{aligned}\quad (6)$$

Считаем, что везде в теле $\sigma_{13}^{+/-} = 0, \sigma_{23}^{+/-} = 0$. Тогда, по закону Гука, $\varepsilon_{13}^{+/-} = 0, \varepsilon_{23}^{+/-} = 0$. Отсюда можем получить, что:

$$A_1^{+/-} x_1 + \frac{\partial u_3^{+/-}}{\partial x_1} = 0 \Rightarrow u_3^{+/-} = -A_1^{+/-} \frac{x_1^2}{2} + C_3^{+/-}(x_2, x_3) \quad (7)$$

$$A_2^{+/-} x_2 + \frac{\partial u_3^{+/-}}{\partial x_2} = 0 \Rightarrow u_3^{+/-} = -A_2^{+/-} \frac{x_2^2}{2} + D_3^{+/-}(x_1, x_3) \quad (8)$$

Из (7):

$$\frac{\partial u_3^{+/-}}{\partial x_2} = \frac{\partial C_3^{+/-}(x_2, x_3)}{\partial x_2} = (\text{согласно (8)}) = -A_2^{+/-} x_2 \Rightarrow C_3^{+/-}(x_2, x_3) = -A_2^{+/-} \frac{x_2^2}{2} + f^{+/-}(x_3)$$

$$\frac{\partial u_3^{+/-}}{\partial x_1} = \frac{\partial D_3^{+/-}(x_1, x_3)}{\partial x_1} = (\text{согласно (7)}) = -A_1^{+/-} x_1 \Rightarrow D_3^{+/-}(x_1, x_3) = -A_1^{+/-} \frac{x_1^2}{2} + g^{+/-}(x_3)$$

$$\begin{aligned}u_3^{+/-} &= -A_1^{+/-} \frac{x_1^2}{2} - A_2^{+/-} \frac{x_2^2}{2} + f^{+/-}(x_3) = -A_1^{+/-} \frac{x_1^2}{2} - A_2^{+/-} \frac{x_2^2}{2} + g^{+/-}(x_3) \Rightarrow \\ &f^{+/-}(x_3) = g^{+/-}(x_3)\end{aligned}\quad (9)$$

Окончательно:

$$u_3^{+/-} = -A_1^{+/-} \frac{x_1^2}{2} - A_2^{+/-} \frac{x_2^2}{2} + f^{+/-}(x_3) \quad (10)$$

Из условия непрерывности перемещений в точке $x_3 = h$ получаем:

$$\begin{aligned}u_3^+(x_3 = h) &= u_3^-(x_3 = h) \Rightarrow \\ -A_1^+ \frac{x_1^2}{2} - A_2^+ \frac{x_2^2}{2} + f^+(h) &= -A_1^- \frac{x_1^2}{2} - A_2^- \frac{x_2^2}{2} + f^-(h), \forall x_1, x_2\end{aligned}\quad (11)$$

Положив $x_1 = x_2 = 0$, получим

$$f^+(h) = f^-(h) \Rightarrow -A_1^+ \frac{x_1^2}{2} - A_2^+ \frac{x_2^2}{2} = -A_1^- \frac{x_1^2}{2} - A_2^- \frac{x_2^2}{2}, \forall x_1, x_2 \quad (12)$$

откуда

$$A_1^+ = A_1^- = A_1, A_2^+ = A_2^- = A_2 \quad (13)$$

Аналогично

$$\begin{aligned}u_1^+(x_3 = h) &= u_1^-(x_3 = h) \Rightarrow B_1^+ = B_1^- = B_1 \\ u_2^+(x_3 = h) &= u_2^-(x_3 = h) \Rightarrow B_2^+ = B_2^- = B_2\end{aligned}\quad (14)$$

Окончательно, имеем:

$$u_1^{+/-} = A_1 x_3 x_1 + B_1 x_1, u_2^{+/-} = A_2 x_3 x_2 + B_2 x_2, u_3^{+/-} = -A_1 \frac{x_1^2}{2} - A_2 \frac{x_2^2}{2} + f^{+/-}(x_3) \quad (15)$$

$$\varepsilon_{11}^+ = \varepsilon_{11}^- = \varepsilon_{11} = A_1 x_3 + B_1, \varepsilon_{22}^+ = \varepsilon_{22}^- = \varepsilon_{22} = A_2 x_3 + B_2, \varepsilon_{33}^{+/-} = \frac{\partial f^{+/-}(x_3)}{\partial x_3} \quad (16)$$

Дополнительно потребуем, что

$$\begin{aligned} \sigma_{33}^+ &= \lambda^+ (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}^+) + 2\mu^+ \varepsilon_{33}^+ - 3k^+ \varepsilon_{ch} = 0 \\ \sigma_{33}^- &= \lambda^- (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}^-) + 2\mu^- \varepsilon_{33}^- = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

Отсюда, переходя к обозначениям в модулях Юнга, E , и коэффициентах Пуассона, ν , получим выражения для ε_{33}^+ и ε_{33}^- :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{33}^+ &= -\frac{\nu_+}{1-\nu_+} ((A_1 + A_2) x_3 + B_1 + B_2) - \frac{1+\nu_+}{1-\nu_+} \varepsilon_{ch} \\ \varepsilon_{33}^- &= -\frac{\nu_-}{1-\nu_-} ((A_1 + A_2) x_3 + B_1 + B_2) \end{aligned} \quad (18)$$

Окончательно, для всех напряжений получаем:

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^- &= \frac{E_-}{1-\nu_-^2} ((A_1 + \nu_- A_2) x_3 + B_1 + \nu_- B_2) \\ \sigma_{22}^- &= \frac{E_-}{1-\nu_-^2} ((\nu_- A_1 + A_2) x_3 + \nu_- B_1 + B_2) \\ \sigma_{11}^+ &= \frac{E_+}{1-\nu_+^2} ((A_1 + \nu_+ A_2) x_3 + B_1 + \nu_+ B_2) - \frac{E_+}{1-\nu_+} \varepsilon_{ch} \\ \sigma_{11}^+ &= \frac{E_+}{1-\nu_+^2} ((\nu_+ A_1 + A_2) x_3 + \nu_+ B_1 + B_2) - \frac{E_+}{1-\nu_+} \varepsilon_{ch} \\ \sigma_{12}^{+/-} &= 0, \sigma_{i3}^{+/-} = 0, i = \overline{1, 3} \end{aligned} \quad (19)$$

Последние уравнения автоматически гарантируют выполнение условий $[\sigma_{i3}] = 0, i = \overline{1, 3}$ сверху и снизу тела, а также условий непрерывности на фронте реакции. Константы A_1, A_2, B_1, B_2 могут быть подсчитаны из условий равновесия (1). Если мы переобозначим величины:

$$\begin{aligned} \overline{\sigma}_{11}^0 &= \sigma_{11}^0 / \frac{E_+}{1-\nu_+^2}, \overline{\sigma}_{22}^0 = \sigma_{22}^0 / \frac{E_+}{1-\nu_+^2}, \xi = \frac{h}{\beta} \\ \overline{A}_1 &= A_1 H, \overline{A}_2 = A_2 H, \beta = \frac{E_-}{E_+} \frac{1-\nu_+^2}{1-\nu_-^2} \end{aligned} \quad (20)$$

то получим систему уравнений для нахождения констант:

$$\overline{\sigma}_{11}^0 = (\overline{A}_1 + \nu_+ \overline{A}_2) \frac{\xi^2}{2} + (B_1 + \nu_+ B_2) \xi - (1 + \nu_+) \varepsilon_{ch} \xi + \beta \left[(\overline{A}_1 + \nu_- \overline{A}_2) \frac{1}{2} (1 - \xi^2) + (B_1 + \nu_- B_2) (1 - \xi) \right] \quad (21)$$

$$\overline{\sigma}_{11}^0 = (\overline{A}_1 + \nu_+ \overline{A}_2) \frac{2\xi^3}{3} + (B_1 + \nu_+ B_2) \xi^2 - (1 + \nu_+) \varepsilon_{ch} \xi^2 + \beta \left[(\overline{A}_1 + \nu_- \overline{A}_2) \frac{2}{3} (1 - \xi^3) + (B_1 + \nu_- B_2) (1 - \xi^2) \right] \quad (22)$$

$$\overline{\sigma}_{22}^0 = (\overline{A}_1 \nu_+ + \overline{A}_2) \frac{\xi^2}{2} + (\nu_+ B_1 + B_2) \xi - (1 + \nu_+) \varepsilon_{ch} \xi + \beta \left[(\overline{A}_1 \nu_- + \overline{A}_2) \frac{1}{2} (1 - \xi^2) + (\nu_- B_1 + B_2) (1 - \xi) \right] \quad (23)$$

$$\overline{\sigma}_{22}^0 = (\overline{A}_1 \nu_+ + \overline{A}_2) \frac{2\xi^3}{3} + (\nu_+ B_1 + B_2) \xi^2 - (1 + \nu_+) \varepsilon_{ch} \xi^2 + \beta \left[(\overline{A}_1 \nu_- + \overline{A}_2) \frac{2}{3} (1 - \xi^3) + (\nu_- B_1 + B_2) (1 - \xi^2) \right] \quad (24)$$