

5. Подстригач Я. С. О влиянии термоупругого рассеяния на напряженное состояние деформируемого тела.— Изв. АН СССР. ОТН. Механика и машиностроение, 1969, № 4, с. 73—78.

Институт прикладных проблем механики
и математики АН УССР

Поступила в редколлегию
19.07.78

УДК 539.3 : 532.72

Я. И. Бурак, Б. П. Галапац, Е. Я. Чапля

**ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ ПРОЦЕССА ДЕФОРМАЦИИ
ЭЛЕКТРОПРОВОДНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ С УЧЕТОМ
РАЗЛИЧНЫХ ПУТЕЙ ДИФфуЗИИ ПРИМЕСНЫХ ЧАСТИЦ**

В известных из литературы макроскопических моделях деформируемых твердых растворов процесс диффузии примесных частиц обычно описывается введением усредненных по физически малому объему параметров и характеристик материала модели без конкретизации путей диффузии [6, 7, 9]. В то же время многочисленные экспериментальные исследования диффузии в поликристаллических телах показали, что примесные частицы могут одновременно перемещаться по границам и объему зерен, а также переходить из одного пути перемещения на другой, определяя ряд особенностей процесса диффузии [1, 3, 11]. При этом коэффициенты диффузии на границах зерен на несколько порядков больше, чем внутри их, а энергия активации приблизительно в два раза меньше. В работах [10, 12], исходя из уравнений модели твердых растворов [6, 7, 9], выполнены исследования по оценке влияния границы зерна на процесс диффузии. При этом граница и объем зерна наделялись различными физическими характеристиками.

Целесообразно дальнейшее развитие модельных представлений о процессе деформации электропроводных твердых растворов с учетом различных путей диффузии заряженных частиц примеси применительно к телам мелкозернистой структуры.

Рассмотрим неполяризованное электропроводное упругое тело, которое находится под воздействием внешних силовых нагрузок, температурного и электромагнитного полей. В начальном состоянии тело изотропно, однородно, макроскопически электронейтрально и состоит из ионной подсистемы, коллективизированных электронов проводимости, заряженных частиц примеси. Частицы примеси в пределах физически бесконечно малого объема могут находиться в двух различных состояниях, обозначаемых в дальнейшем посредством a и b . В соответствии с этим наряду с процессами деформации, теплопроводности, диффузии и электропроводности будем учитывать также процесс активации, т. е. переход атомов примеси из состояния a в b и наоборот.

Для термодинамического описания упомянутых процессов необходимо выбрать параметры локального термодинамического состояния системы. Сопоставим, как обычно [2, 7, 8], процессам теплопроводности, деформации, электропроводности и диффузии параметры T — S ; $\hat{\sigma}$ — \hat{e} ; Φ — ω ; M'_k — C_k ($k = \overline{1, 4}$) соответственно, где T — абсолютная температура; S — удельная энтропия; $\hat{\sigma} = \{\sigma_{ij}\}$, $\hat{e} = \{e_{ij}\}$ — тензор напряжений и деформаций; Φ — термодинамический электрический потенциал (ТЭП); ω — удельный электрический заряд; $C_k = \frac{\rho_k}{\rho}$ — концентрация компонента k ; ρ_k — плотность этого компонента; $\rho = \sum_{k=1}^4 \rho_k$ — суммарная плотность; M'_k — химический потенциал компонента k . Примем в дальнейшем, что $k = 1$ — сопоставляются коллективизированные электроны, обозначаемые также индекс-

сом e ; $k = 2, 3$ — частицы примеси в состоянии a и b соответственно; $k = 4$ — ионная подсистема тела.

Параметры состояния, соответствующие процессу активации, выберем исходя из следующих предположений. Примем, что электрические заряды z'_a и z'_b частиц примеси в состояниях a и b в расчете на единицу массы примеси различны. Поэтому переход частиц примеси из состояния a в b или наоборот сопровождается соответствующим изменением количества коллективизированных электронов в пределах рассматриваемого физически малого объема. Обозначим через $\tilde{E}'_e, \tilde{E}'_a, \tilde{E}'_b$ энергии, необходимые для образования единицы массы электронов и частиц примеси в состояниях a и b посредством процесса активации. Энергии \tilde{E}'_v ($v = e, a, b$) зависят от структуры материала системы и изменяются с изменением параметров термодинамического состояния. Пусть $\Delta\rho_v$ — приращение плотности компонента v , обусловленное процессом активации. Тогда $\tilde{\xi}_v = \frac{\Delta\rho_v}{\rho}$ — возникшее количество массы компонента v из расчета на единицу массы раствора. Введенные параметры $\tilde{E}'_v, \tilde{\xi}_v$ естественно принять в качестве параметров термодинамического состояния, соответствующих процессу активации.

В качестве начального (естественного) состояния рассматриваемой термодинамической системы примем равновесное $T = T_0$; $S = S_0$; $\sigma_{ij} = 0$; $e_{ij} = 0$; $\Phi = \Phi_0$; $\omega = 0$; $M'_k = M'_k{}^0$; $\tilde{E}'_v = \tilde{E}'_v{}^0$; $\tilde{\xi}_v = \tilde{\xi}_v{}^0$ в неограниченном теле.

Изменение удельной внутренней энергии U ($S, e_{ij}, \omega, C'_k, \tilde{\xi}_v$) для физически бесконечно малого объема определяется обобщенным уравнением Гиббса

$$dU = TdS + \frac{1}{\rho} \sigma_{ij} de_{ij} + \Phi d\omega + M'_v dC'_v + \tilde{E}'_\alpha d\tilde{\xi}_\alpha, \quad (1)$$

где предполагается суммирование по повторяющимся индексам; $i, j = \overline{1, 3}$; $\tilde{E}'_\alpha = \tilde{E}'_a - \tilde{E}'_e$ ($\alpha = a, b$); $M'_v = M'_v - M'_4$; $C'_v = C'_v - \tilde{\xi}_v$.

Для дальнейшего более удобно ввести в рассмотрение удельную свободную энергию F , определяемую посредством соотношения $F = U - TS - \Phi\omega$. В этом случае имеем

$$dF = -SdT + \frac{1}{\rho} \sigma_{ij} de_{ij} - \omega d\Phi + M'_v dC'_v + \tilde{E}'_\alpha d\tilde{\xi}_\alpha. \quad (2)$$

При малых отклонениях от начального равновесного состояния функцию F представим в виде степенного ряда, ограничиваясь квадратичными членами в разложении

$$\begin{aligned} F - F_0 = & -S_0 t + M'_v c'_v d + \tilde{E}'_\alpha \tilde{\xi}_\alpha - \frac{1}{2} \frac{c}{T_0} t^2 - \frac{1}{2} C \Phi^2 + d_{v1} c'_v d^2 + \vartheta_{\alpha\beta} \tilde{\xi}_\alpha \tilde{\xi}_\beta + \\ & + \gamma C t \Phi + a_v c'_v t + b_\alpha \tilde{\xi}_\alpha t + \eta_v c'_v \Phi + h_\alpha \tilde{\xi}_\alpha \Phi + r_{v\alpha} c'_v \tilde{\xi}_\alpha + \frac{G}{\rho} e_{ij} e_{ij} + \\ & + \frac{1}{2\rho} \left(K - \frac{2}{3} G \right) e^2 - \frac{\alpha K}{\rho} t e - \frac{\beta K}{\rho} \Phi e - \frac{K}{\rho} \beta_v c'_v e + \frac{K}{\rho} \lambda_\alpha \tilde{\xi}_\alpha e \quad (l = a, b). \quad (3) \end{aligned}$$

Тогда из соотношения Гиббса (2), используя выражение (3), находим в линейном приближении уравнения состояния рассматриваемой модели

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & K (e - \alpha t - \beta \Phi - \beta_v c'_v + \lambda_\alpha \tilde{\xi}_\alpha) \delta_{ij} + 2G \left(e_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} e \right); \\ s = S - S_0 = & \frac{c}{T_0} t + \frac{\alpha K}{\rho} e - \gamma C \Phi + d_v c'_v - b_\alpha \tilde{\xi}_\alpha; \\ \rho \omega = & K \beta e + \rho C (\Phi - \gamma t) - \rho \eta_v c'_v - \rho h_\alpha \tilde{\xi}_\alpha; \quad (4) \end{aligned}$$

$$\mu_v = M_v - M_v^0 = d_{v\alpha} c_\alpha^d - \frac{K}{\rho} \beta_{v\alpha} e + d_{v\alpha} t + \eta_{v\alpha} \varphi + r_{v\alpha} \xi_\alpha;$$

$$E_\alpha = \tilde{E}_\alpha - \tilde{E}_\alpha^0 = \frac{\lambda_\alpha K}{\rho} e + \vartheta_{\alpha\beta} \xi_\beta + b_\alpha t + h_\alpha \varphi + r_{v\alpha} c_\alpha^d.$$

Здесь приняты следующие обозначения: $t = T - T_0$; $\varphi = \Phi - \Phi_0$; $c_\alpha^d = C_\alpha^d - C_\alpha^{d_0} = c_\alpha^d - \xi_\alpha$; $\xi_\alpha = \tilde{\xi}_\alpha - \tilde{\xi}_\alpha^0$; $e = e_{ii}$. Коэффициенты в уравнениях состояния отображают теплофизические, механические и другие свойства материала.

Сформулируем балансовые соотношения модели, которые соответствуют законам сохранения массы, заряда, импульса и энергии. Исходим из известного положения о том, что изменение во времени произвольной экстенсивной величины A , распределенной в произвольном фиксированном объеме (V) материальной среды, связано с потоком этой величины через поверхность (Σ) и действием источников и стоков.

Плотность массы компонента k с учетом процесса активации удовлетворяет уравнению

$$\frac{d\rho_k}{d\tau} = -\operatorname{div} \vec{J}_k - \rho_k \operatorname{div} \vec{v} + f_k, \quad (5)$$

где $\vec{v} = \frac{1}{\rho} \rho_k \vec{v}_k$ — скорость движения центра масс выбранного элемента тела; f ($k = 1, 3$) — мощность производства массы компонента k в связи с процессом активации; $\vec{J}_k = \rho_k (\vec{v}_k - \vec{v})$ (суммирование по k отсутствует) — диффузионный поток и \vec{v}_k — скорость частиц компонента k .

Суммируя уравнение (5) по k , получаем закон сохранения полной массы

$$\frac{d\rho}{d\tau} = -\rho \operatorname{div} \vec{v}. \quad (6)$$

Используя это, из соотношения (5) получаем уравнение для концентраций:

$$\rho \frac{dC_k}{d\tau} = -\operatorname{div} \vec{J}_k + f_k. \quad (7)$$

Умножая уравнение (7) на величину удельного электрического заряда z_k компонента k и суммируя по всем k , получаем уравнение сохранения электрических зарядов

$$\rho \frac{d\omega}{d\tau} = -\operatorname{div} \vec{j}, \quad (8)$$

где $\rho\omega = \rho_k z_k$ — объемная плотность электрических зарядов; $\vec{j} = z_k \vec{J}_k$.

Так как $\sum_{k=1}^4 \vec{J}_k = 0$, плотность тока проводимости представим в виде $\vec{j} =$

$$= (z'_v - z'_a) \vec{J}_v = z'_v \vec{J}_v \quad (v = e, a, b).$$

Учитывая уравнение (5) баланса массы компонента v , производство массы f_v компонента v можно связать с изменением величин $\tilde{\xi}_v$ следующим соотношением:

$$\rho \frac{d\tilde{\xi}_v}{d\tau} = f_v. \quad (9)$$

Изменение во времени величин c_α^d определяется соотношением

$$\rho \frac{dc_\alpha^d}{d\tau} = -\operatorname{div} \vec{J}_v, \quad (10)$$

которое следует из балансовых уравнений (7), (9).

Закон сохранения импульса для материальной системы в электромагнитном поле можно записать в форме уравнения движения [4]

$$\rho \frac{d\vec{v}}{d\tau} = \nabla \hat{\sigma} + \rho \omega \vec{E} + \mu_0 \vec{J} \times \vec{H} + \rho_k \vec{F}'_k. \quad (11)$$

Здесь $\rho \omega \vec{E} + \mu_0 \vec{J} \times \vec{H}$ — сила Лоренца, отнесенная к единице объема тела; \vec{F}'_k — консервативная сила $\left(\vec{F}'_k = -\nabla \Psi'_k, \frac{\partial \Psi'_k}{\partial \tau} = 0 \right)$, действующая на единицу массы компонента k ; $\vec{I} = \rho_k \vec{v}_k z'_k = \vec{j} + \rho \omega \vec{v}$ — полная плотность электрического тока.

Напряженности электрического \vec{E} и магнитного \vec{H} полей определяются уравнениями Максвелла как в области тела (V_0):

$$\text{rot } \vec{H} = \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial \tau} + \vec{I}; \quad \text{rot } \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial \tau}; \quad \text{div } \vec{H} = 0; \quad \epsilon_0 \text{div } \vec{E} = \rho \omega, \quad (12a)$$

так и в области внешней неполяризованной неэлектропроводной среды (V_c):

$$\text{rot } \vec{H}_c = \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}_c}{\partial \tau} + \vec{j}_c; \quad \text{rot } \vec{E}_c = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}_c}{\partial \tau}; \quad \text{div } \vec{H}_c = 0; \quad \epsilon_0 \text{div } \vec{E}_c = \rho \omega_c, \quad (12b)$$

где j_c, ω_c — заданные функции в области (V_c), удовлетворяющие условию $\text{div } \vec{j}_c = -\frac{\partial \omega_c}{\partial \tau}$.

Из закона сохранения полной энергии следует, что плотность энергии вещества и поля ϵ должна сохраняться:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial \tau} = -\text{div } \vec{J}_\epsilon. \quad (13)$$

Плотность полной энергии состоит из плотностей внутренней ρU , потенциальной $\rho \psi$, кинетической $\rho_k \frac{v_k^2}{2} = \rho \frac{v^2}{2} + \frac{1}{2} \rho_k (\vec{v}_k - \vec{v})^2$ энергий, а также плотности энергии электромагнитного поля $\frac{1}{2} (\epsilon_0 E^2 + \mu_0 H^2)$ и энергии активации $\rho \tilde{E}_\alpha \tilde{\xi}_\alpha$. В последующем рассмотрении, следуя работам [4, 5], пренебрегаем кинетической энергией диффузии $\frac{1}{2} \rho_k (\vec{v}_k - \vec{v})^2$, что позволяет получить уравнение баланса внутренней энергии, используя только соотношение для кинетической энергии центра масс.

Учитывая сказанное, записываем

$$\epsilon = \rho \left(U + \psi + \frac{v^2}{2} + \tilde{\xi}_\alpha \tilde{E}_\alpha \right) + \frac{1}{2} (\epsilon_0 E^2 + \mu_0 H^2). \quad (14)$$

Полный поток энергии \vec{J}_ϵ состоит из конвективной составляющей $\rho \left(U + \psi + \frac{v^2}{2} + \tilde{\xi}_\alpha \tilde{E}_\alpha \right) \vec{v}$, потока тепла \vec{J}_Q , потока электромагнитной энергии $\vec{E} \times \vec{H}$, потока энергии $-\hat{\sigma} \cdot \vec{v}$, связанного с механической работой, выполненной системой, потока энергии $\Phi \vec{j}$, обусловленного диффузией электрических зарядов в поле электрического потенциала, потока энергии $M'_k \vec{J}'_k$, вызванного диффузией различных компонент в поле их химических потенциалов, а также потока потенциальной энергии $\psi'_k \vec{J}'_k$, возникающего вследствие диффузии различных компонент в поле внешних консервативных сил, т. е.

$$\vec{J}_\epsilon = \rho \left(U + \psi + \frac{v^2}{2} + \tilde{\xi}_\alpha \tilde{E}_\alpha \right) \vec{v} + \vec{J}_Q + \vec{E} \times \vec{H} - \hat{\sigma} \cdot \vec{v} + \Phi \vec{j} + M'_k \vec{J}'_k + \psi'_k \vec{J}'_k. \quad (15)$$

Из уравнений Максвелла для области тела (V_0) и соотношений (11), (5) следуют законы сохранения электромагнитной энергии (уравнение Умова — Пойтинга):

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \tau} (\epsilon_0 E^2 + \mu_0 H^2) = -\operatorname{div} (\vec{E} \times \vec{H}) - \vec{J} \cdot \vec{E}, \quad (16)$$

а также кинетической энергии центра масс и потенциальной энергии:

$$\rho \frac{d}{d\tau} \left(\frac{v^2}{2} \right) = \vec{v} \cdot \nabla \cdot \hat{\sigma} + \{ \rho \omega \vec{E} + \mu_0 \vec{J} \times \vec{H} \} \vec{v} + \rho_k \vec{F}'_k \cdot \vec{v}; \quad (17)$$

$$\frac{\partial \rho \psi}{\partial \tau} = -\operatorname{div} (\rho \psi \vec{v} + \psi'_k \vec{J}_k) - (\rho_k \vec{v} + \vec{J}_k) \vec{F}'_k, \quad (18)$$

где введено обозначение $\rho \psi = \rho_k \psi_k$.

Подставляя соотношения (14), (15) в уравнение сохранения энергии (13) и используя формулы (16) — (18), а также уравнение баланса энергии диссоциации

$$\frac{\partial \rho \tilde{\xi}_v \tilde{E}'_v}{\partial \tau} = -\operatorname{div} (\rho \tilde{\xi}_v \tilde{E}'_v \vec{v}) - \tilde{E}'_v f_v \quad (19)$$

(суммирование по v отсутствует), получаем уравнение баланса внутренней энергии

$$\begin{aligned} \rho \frac{dU}{d\tau} = & -\operatorname{div} (\vec{J}_Q + \Phi \vec{j} + M'_k \vec{J}_k) + \hat{\sigma} : \nabla \vec{v} - \{ \rho \omega \vec{E} + \mu_0 \vec{J} \times \vec{H} \} \vec{v} + \\ & + \vec{J}_k \vec{F}'_k + \vec{E}_\alpha f_\alpha + \vec{I} \cdot \vec{E}. \end{aligned} \quad (20)$$

Из соотношения Гиббса (1), записанного вдоль пути движения центра масс элемента тела

$$\rho T \frac{dS}{d\tau} = \rho \frac{dU}{d\tau} - \sigma_{ij} \frac{d}{d\tau} e_{ij} - \rho \Phi \frac{d\omega}{d\tau} - \rho M_v \frac{dv_v}{d\tau} - \rho \vec{E}_\alpha \frac{d\tilde{e}_{\alpha}}{d\tau}, \quad (21)$$

используя балансовые соотношения (8) — (11), (20), уравнение баланса энтропии представляем в виде

$$\rho \frac{dS}{d\tau} = -\operatorname{div} \vec{J}_s + \frac{1}{T} \vec{J}_Q \vec{X}_Q + \frac{1}{T} \vec{J}_v \vec{X}_v. \quad (22)$$

Здесь $\vec{J}_s = \frac{\vec{J}_Q}{T}$ — поток энтропии; $\vec{X}_Q = -\frac{\nabla T}{T}$ — термодинамическая сила,

сопряженная с потоком тепла; $\vec{X}_v = z_v (\vec{E} + \mu_0 \vec{v} \times \vec{H} - \nabla \Phi) - \nabla (\psi_v + M_v)$ — термодинамическая сила, сопряженная с диффузным потоком компонента; $\psi_v = \psi'_v - \psi'_i$; $v = e, a, b$.

Для малых отклонений от положения равновесия примем линейную зависимость между обобщенными потоками и сбалансированными силами. Тогда кинетические уравнения модели имеют вид

$$\vec{J}_Q = L_{QQ} \vec{X}_Q + L_{Qv} \vec{X}_v; \quad \vec{J}_v = L_{vQ} \vec{X}_Q + L_{vv} \vec{X}_v, \quad (23)$$

где L_{QQ} , L_{Qv} , L_{vQ} , L_{vv} — коэффициенты пропорциональности, являющиеся функциями параметров состояния. В соответствии со вторым законом термодинамики в локальной формулировке из положительной определенности квадратичной формы, выражающей производство энтропии, следует, что $L_{QQ} \geq 0$; $L_{vv} \geq 0$ и $L_{vv} L_{vv} \geq \frac{1}{4} (L_{vv} + L_{vv})^2$. При этом также имеют место соотношения взаимности, являющиеся следствием симметрии микроскопических уравнений относительно преобразования инверсии во времени. В частном случае, если считать, что коэффициенты не зависят от векторов напряженности магнитного поля и определяются парными степенями скоростей молекул, то $L_{vQ} = L_{Qv}$; $L_{vv} = L_{vv}$.

Кинетические уравнения (21) с учетом выражений для термодинамических сил и уравнений состояния (4) приведем к форме

$$\begin{aligned} \vec{J}_v = & -\rho [D_v^T \nabla t + D_v^E (\vec{E} + \mu_0 \vec{v} \times \vec{H}) + D_v^\Phi \nabla \varphi + \vec{\Psi}_v + \\ & + D_{v\gamma} \nabla c_\gamma^d + D_v^e e + D_{v\alpha}^{\xi} \nabla \xi_\alpha]; \end{aligned} \quad (24)$$

$$\vec{J}_Q = -\kappa \nabla t + q_v \vec{J}_v,$$

где $\kappa = \frac{1}{T} (L_{QQ} - q_v L_{Qv})$ — коэффициент теплопроводности; q_v , введенное соотношением $L_{Qv} = q_v L_{v\gamma}$, можно трактовать [9] как теплоту переноса компонента v в процессе диффузии; $D_v^T = \frac{1}{\rho} (L_{v\gamma} d_\gamma + \frac{L_{vQ}}{T})$, $D_v^E = -\frac{1}{\rho} L_{v\gamma} z_\gamma$, $D_v^\Phi = \frac{1}{\rho} L_{v\gamma} (z_\gamma + \eta_\gamma)$, $D_{v\gamma} = \frac{1}{\rho} L_{v\gamma} d_{l\gamma}$, $D_v^e = -\frac{K}{\rho^2} L_{v\gamma} \beta_\gamma$ и $D_{v\alpha}^{\xi} = \frac{1}{\rho} L_{v\gamma} r_{\gamma\alpha}$ — соответствующие коэффициенты диффузии компонента v ; $\vec{\Psi}_v = \frac{1}{\rho} L_{v\gamma} \nabla \psi_\gamma$. Учитывая определение тока проводимости посредством $\vec{j} = z_v \vec{J}_v$, находим

$$\vec{j} = \lambda (\vec{E} - \nabla \varphi + \mu_0 \vec{v} \times \vec{H}) - \frac{z_v L_{vQ}}{T} \nabla t - z_v L_{v\gamma} \nabla (\psi_\gamma + M_\gamma). \quad (25)$$

Здесь $\lambda = z_v z_\gamma L_{v\gamma}$ — коэффициент электропроводности.

Уравнения состояния, балансовые соотношения, уравнения Максвелла и кинетические соотношения составляют замкнутую систему уравнений модели.

При постоянных характеристиках материала балансовые уравнения (8), (10), (11), (19), (22) с учетом соотношений (4), (9), (24), (25) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\omega}{d\tau} = & -\lambda [\operatorname{div} \vec{E} - \Delta \varphi + \mu_0 \operatorname{div} (\vec{v} \times \vec{H})] - \\ & - \frac{z_v L_{vQ}}{T} \Delta t - z_v L_{v\gamma} \Delta (\psi_\gamma + M_\gamma); \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \frac{dc_\gamma^d}{d\tau} = & D_v^T \Delta t + D_v^E [\operatorname{div} \vec{E} + \mu_0 \operatorname{div} (\vec{v} \times \vec{H})] + D_v^\Phi \Delta \varphi + \nabla \cdot \vec{\Psi}_v + \\ & + D_{v\gamma} \Delta c_\gamma^d + D_v^e \Delta e + D_{v\alpha}^{\xi} \Delta \xi_\alpha; \end{aligned} \quad (27)$$

$$\rho \frac{d^2 \vec{u}}{d\tau^2} = \nabla \cdot \hat{\sigma} + \rho \omega \vec{E} + \mu_0 (\vec{j} + \rho \omega \vec{v}) \times \vec{H} + \rho_k \vec{F}_k; \quad (28)$$

$$2 \frac{1}{\tilde{\xi}_v} \frac{d\tilde{\xi}_v}{d\tau} + \frac{1}{\tilde{E}'_v} \frac{d\tilde{E}'_v}{d\tau} = 0; \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{c}{T_0} \frac{dt}{d\tau} + \alpha K \frac{de}{d\tau} - \rho \gamma C \frac{d\gamma}{d\tau} + \rho \frac{dc_\gamma^d}{d\tau} \left(d_\gamma + \frac{q_\gamma}{T} \right) - \rho b_\alpha \frac{d\xi_\alpha}{d\tau} = \\ = \frac{\kappa}{T} \Delta t + \frac{1}{T} \vec{J}_v \cdot \vec{X}_v; \end{aligned} \quad (30)$$

где \vec{u} — вектор перемещений. При этом тензор деформаций \hat{e} определяется соотношением Коши $\hat{e} = \operatorname{Def} \vec{u}$.

Интегрируя уравнение (29) по времени, определяем

$$\tilde{E}'_v = \frac{1}{A_v \tilde{\xi}_v^2}, \quad (31)$$

где A_v — постоянная интегрирования. Учитывая, что значение величины $\tilde{\xi}_v$, как правило, значительно меньше единицы, найденное решение (31) можно для некоторого интервала изменения $\tilde{\xi}_v$ с достаточной точностью аппроксимировать выражением

$$\tilde{E}'_v = a'_v \tilde{\xi}_v + \rho'_v. \quad (32)$$

Отметим, что в формулах (31), (32) суммирование по v отсутствует. Поскольку $\tilde{\xi}_a + \tilde{\xi}_b + \tilde{\xi}_c = 0$, то формулы (32) относительно отклонений записываются так:

$$E_\alpha = a_\alpha \xi_\alpha + \rho_\alpha. \quad (33)$$

Здесь a'_v , ρ'_v , a_α , ρ_α — постоянные, связанные с интервалом изменения $\tilde{\xi}_v$, постоянной A_v , а также с начальными значениями параметров \tilde{E}'_v и $\tilde{\xi}_v$.

Подставляя приближенное решение (33) уравнения (29) в последнее из уравнений состояния (4), находим

$$\xi_\alpha = \frac{\lambda_\alpha^* K}{\rho} e + b_\alpha^* t + h_\alpha^* \varphi + r_{v\alpha}^* c_v^d, \quad (34)$$

где учтено, что при $e = t = \varphi = c_v^d = 0$ также $\xi_\alpha = 0$, а коэффициенты λ_α^* , b_α^* , h_α^* , $r_{v\alpha}^*$ выражаются через a_α , ρ_α , λ_α , $V_{\alpha\beta}$, b_α , h_α , $r_{v\alpha}$ и не приведены ввиду их громоздкости. При этом нетрудно показать, что в пределах принятых допущений первые четыре уравнения состояния (4), кинетические соотношения (24), (25), а также уравнения (26) — (28), (30) с точностью до коэффициентов можно привести к виду, соответствующему уравнениям модели деформируемого электропроводного четырехкомпонентного твердого раствора [2]. Это обстоятельство может быть использовано при построении решений для конкретных задач.

Отметим, что записанные уравнения применимы также к исследованию взаимосвязи рассматриваемых процессов в монокристаллах, где перемещение примесных частиц определяется двумя механизмами диффузии.

1. Бокштейн Б. С., Бокштейн С. З., Жуховицкий А. А. Термодинамика и кинетика диффузии в твердых телах. — М.: Metallurgia, 1974. — 280 с.
2. Бурак Я. И., Галапац Б. П., Гнидець Б. М. Фізико-механічні процеси в електропровідних тілах. — К.: Наук. думка, 1978. — 230 с.
3. Гольцов В. А. Водород в металлах. — Вопр. атом. науки и техники, 1977, вып. 1, с. 65—100.
4. Де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. — М.: Мир, 1964. — 456 с.
5. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика. — М.: Мир, 1974. — 304 с.
6. Любов Б. Я., Фастов Н. С. Влияние концентрационных напряжений на процессы диффузии в твердых растворах. — Докл. АН СССР, 1952, № 5, с. 939—941.
7. Подстригач Я. С. Диференціальні рівняння задачі термодифузії в твердому деформованому тілі. — Доп. АН УРСР, 1961, № 2, с. 169—173.
8. Подстригач Я. С., Бурак Я. И., Галапац Б. П., Гнидець Б. М. Исходные уравнения теории деформации электропроводных твердых растворов. — Мат. методы и физ.-мех. поля, 1975, № 1, с. 22—29.
9. Подстригач Я. С., Павлина В. С. Дифференциальные уравнения термодинамических процессов в n -компонентном растворе. — ФХММ, 1965, № 4, с. 383—389.
10. Подстригач Я. С., Шевчук П. Р. О влиянии поверхностных слоев на процесс диффузии и на обусловленное им напряженное состояние в твердых телах. — ФХММ, 1967, 3, № 5, с. 575—583.
11. Сидорак И. И. Изучение влияния границ зерен на процесс диффузии водорода в металлах: Автореф. дис. ... канд. техн. наук. — Львов, 1977. — 16 с.
12. Fisher J. C. Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion. — J. Appl. Phys., 1951, 22, N 1, p. 74—77.