

## МЕХАНИКА

УДК 531:536-12  
DOI 10.17223/19988621/63/6

М.А. Анисимова, А.Г. Князева

**ОЦЕНКА НАПРЯЖЕНИЙ И ДЕФОРМАЦИЙ  
В ПРОЦЕССЕ ФОРМИРОВАНИЯ ПЕРЕХОДНОГО СЛОЯ  
МЕЖДУ ЧАСТИЦЕЙ И МАТРИЦЕЙ<sup>1</sup>**

Представлена модель для оценки напряжений и деформаций в процессе формирования переходного слоя между сферической частицей и матрицей в процессе синтеза композита. Модель включает в себя задачу реакционной диффузии с подвижными границами в квазистационарном приближении. Подзадача о нахождении положения границ раздела фаз решается численно. Далее находится распределение концентрации. Задача о механическом равновесии решается аналитически. Результат зависит от положения границ и распределения концентраций.

**Ключевые слова:** *переходный слой, новая фаза, композит, подвижная граница, напряжения, деформации, концентрация.*

При получении композитов состав и ширина переходного слоя между включениями и матрицей изменяются в процессе синтеза и зависят от многочисленных технологических параметров процесса (температуры, давления, времени синтеза и т.п.). Используя подходящую модель формирования переходного слоя, можно изучить эволюцию размеров переходной зоны и свойств получаемых материалов в динамике в зависимости от условий синтеза [1, 2]. В общем случае такие модели могут быть реализованы лишь численно, в особенности для многокомпонентных сред и при условии формирования нескольких фаз.

Один из вариантов постановки задачи о росте новых фаз – задача реакционной диффузии, когда граница раздела движется вследствие роста новой фазы [3]. В этом случае явно принимается, что скорость собственно реакции много выше скорости диффузии, что позволяет заменить зону реакции поверхностью раздела [4].

Кроме того, процесс образования новой фазы и движение границы сопровождаются диффузией, приводящей к перераспределению концентраций. Эти процессы приводят к появлению диффузионных (концентрационных) напряжений из-за разницы в подвижности диффузанта в фазах и различия свойств фаз. В работах [5, 6] представлены примеры моделей с аналитическими решениями для описания реакционной диффузии в сферической и цилиндрической неоднородных оболочках. Там же продемонстрировано влияние напряжений на реакционную диффузию, следовательно, и на процесс формирования переходного слоя.

В данной работе предложена модель, которая позволяет исследовать влияние условий синтеза композита на ширину формируемого переходного слоя между

<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы, направление III.23.

матрицей и включением и оценить возникающие при этом напряжения в динамике.

### Задача о росте новой фазы

#### Постановка задачи

Рассмотрим задачу в следующей постановке (рис. 1). Полагаем, что синтез композита осуществляется при заданных значениях температуры и давления. Включения имеют сферическую форму. Между материалами частицы и матрицы возможно образование переходной зоны (а) диффузионного типа или (б) в виде новой фазы (или последовательности новых фаз). Ширина этой переходной зоны зависит от условий синтеза и изменяется во времени. В случае (а) мы имеем диффузионную задачу вида [1]. В случае (б) мы должны учесть формирование новых химических соединений, опираясь, например, на диаграммы состояния. Примем для простоты, что между материалами может образоваться лишь одна новая фаза. Рост размеров фазы опишем на основе теории реакционной диффузии [4].

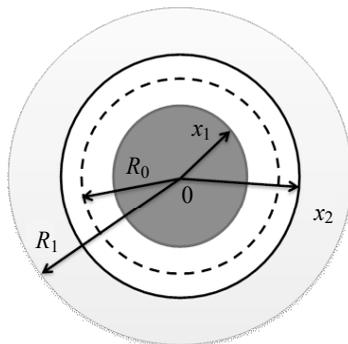


Рис. 1. Иллюстрация к постановке задачи  
 Fig. 1. Illustration for the problem formulation

Тогда задача о росте новой фазы между сферическими включениями и матрицей примет вид

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = \frac{D_k}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial C_k}{\partial r}, \quad (1)$$

где  $C_k$  – концентрация материала частицы в разных областях: в материале включения ( $0 \leq r < x_1$ ) –  $C_p$ , в материале матрицы ( $x_1 \leq r < x_2$ ) –  $C_m$  и в материале образовавшейся фазы ( $x_2 \leq r < R_0$ ) –  $C_f$ ;  $D_k$  – коэффициент диффузии;  $x_1$  и  $x_2$  – положения подвижных границ, которые отделяют новую фазу от исходных и являются функциями времени  $x_1(t)$  и  $x_2(t)$ .

Граничные и начальные условия имеют следующий вид:

$$r = 0: \frac{\partial C_p}{\partial r} = 0; \quad (2)$$

$$r = x_1(t): C_f = C_1; (1 - C_1) \frac{dx_1}{dt} = D_f \frac{\partial C_f}{\partial r}; \quad (3)$$

$$r = x_2(t) : C_f = C_2, C_m = C_3; (C_2 - C_3) \frac{dx_2}{dt} = D_m \frac{\partial C_m}{\partial r} - D_f \frac{\partial C_f}{\partial r}; \quad (4)$$

$$r = R_1 : \frac{\partial C_m}{\partial r} = 0; \quad (5)$$

$$t = 0 : C_p = 1, C_m = 0, C_f = 0; x_1 = x_{10} < R_0; x_2 = x_{20} > R_0. \quad (6)$$

Здесь  $C_1, C_2, C_3$  – пределы растворимости материала частицы в материале матрицы, которые известны из диаграммы состояния. Условие (2) есть условие симметрии; (3) и (4) учитывают наличие пределов растворимости и разрыв в диффузионных потоках, связанный с движением межфазных границ. Условие (5) – условие непроницаемости внешней границы выделенной мезоячейки, размер которой  $R_1$  определяется количеством матрицы, приходящимся на одну частицу;  $R_0$  – начальный радиус частицы. Начальные значения положений границ раздела близки к  $R_0$ .

### Метод решения

Чтобы решить задачу, можно использовать какой-либо численный метод, которых для задач с подвижными границами существует достаточно много. Однако для качественных оценок удобно применить приближенный подход, основанный на предположении о квазистационарности распределения концентраций на уровне мезоячейки. Аналогично [7], примем

$$\frac{\partial C_p}{\partial t} = 0; \quad \frac{\partial C_m}{\partial t} = 0; \quad \frac{\partial C_f}{\partial t} = 0.$$

Тогда диффузионная задача разделится на две. Первая – о нахождении распределения концентрации в областях заданных размеров, вторая – об определении положения границ раздела фаз.

Примем  $C_3 = 0$ . Это означает, что материалы частицы и матрицы нерастворимы друг в друге. Тогда первая задача примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dC_f}{dr} \right) &= 0, \\ r = x_1(t) : C_f &= C_1, \\ r = x_2(t) : C_f &= C_2. \end{aligned} \quad (7)$$

Концентрация материала частицы в области частицы  $C_p = 1$ , в области матрицы  $C_m = 0$ .

Задача (7) решается простым интегрированием; решение имеет вид

$$C_f(r) = -\frac{1}{r} \frac{(C_2 - C_1)(x_1 x_2) - r(C_2 x_2 - C_1 x_1)}{x_2 - x_1}. \quad (8)$$

Следующий шаг – определение положения границ. Подставляя (8) в условия (3) и (4) для потоков, приходим к системе уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= D_f \frac{x_2}{x_1} \frac{(C_2 - C_1)}{(x_2 - x_1)} \frac{1}{(1 - C_1)}, \\ \frac{dx_2}{dt} &= -D_f \frac{x_1}{x_2} \frac{(C_2 - C_1)}{(x_2 - x_1)} \frac{1}{C_2}, \end{aligned}$$

с условиями

$$t = 0: x_1 = x_{10}; x_2 = x_{20}.$$

Для удобства представления результатов перейдем к безразмерным переменным. Тогда распределение концентрации в области новой фазы и задача для подвижных границ примет вид

$$C_f(\xi) = -\frac{1}{\xi} \frac{(C_2 - C_1)(\xi_1 \xi_2) - \xi(C_2 \xi_2 - C_1 \xi_1)}{\xi_2 - \xi_1}; \quad (9)$$

$$\frac{d\xi_1}{d\tau} = \frac{\xi_2}{\xi_1} \frac{(C_2 - C_1)}{(\xi_2 - \xi_1)} \frac{1}{(1 - C_1)},$$

$$\frac{d\xi_2}{d\tau} = -\frac{\xi_1}{\xi_2} \frac{(C_2 - C_1)}{(\xi_2 - \xi_1)} \frac{1}{C_2}, \quad (10)$$

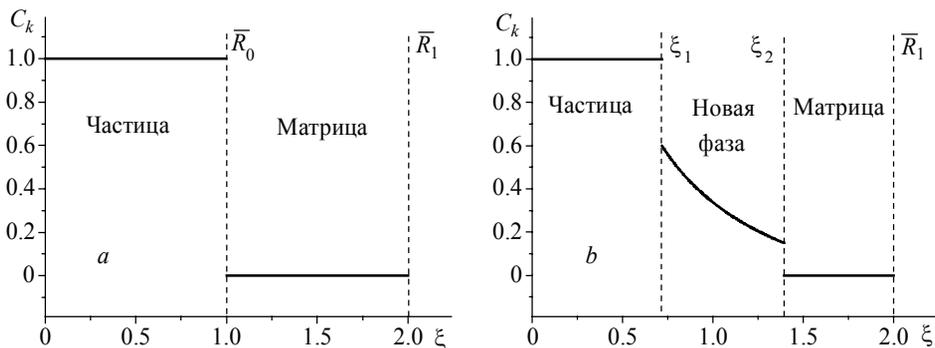
$$\tau = 0: \xi_1 = \xi_{10}; \xi_2 = \xi_{20},$$

где

$$\xi = \frac{r}{R_0}, \bar{R}_0 = \frac{R_0}{R_0} = 1, \bar{R}_1 = \frac{R_1}{R_0};$$

$$\xi_{10} = \frac{x_{10}}{R_0}; \xi_{20} = \frac{x_{20}}{R_0}; \xi_{10} < 1; \xi_{20} > 1; \tau = \frac{t}{R_0^2} D_f.$$

Полученные уравнения решаем численно методом Эйлера. На рис. 2 представлено распределение концентраций в начальный момент времени (а) и в процессе формирования новой фазы (b).



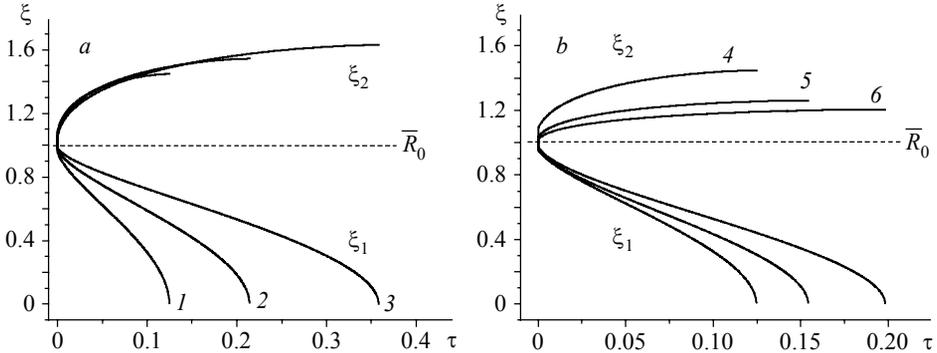
**Рис. 2.** Распределение концентраций материала частицы и положение границ новой фазы в процессе роста переходного слоя для значений пределов растворимости  $C_1 = 0.6$  и  $C_2 = 0.15$  в моменты времени  $\tau$ :  $a - 0$ ,  $b - 0.05$

**Fig. 2.** Distribution of the particles' concentration and the position of new phase boundaries during a transition layer growth for solubility limits of  $C_1 = 0.6$  and  $C_2 = 0.15$  at time instants  $\tau$ : (a) 0 and (b) 0.05

Таким образом, ширина сформировавшегося переходного слоя  $h$  может быть рассчитана как разность между положениями границ в данный момент времени:

$$h = \xi_2 - \xi_1.$$

Очевидно, что скорость движения границ зависит от значений пределов растворимости. Из рис. 3 видно, что изменение предела растворимости на границе с материалом частицы (рис. 3, а) более интенсивно влияет на скорость роста новой фазы, чем изменение предела на границе с материалом матрицы (рис. 3, б).



**Рис. 3.** Движение границ новой фазы в процессе роста переходного слоя относительно начального положения при разных значениях пределов растворимости: а –  $C_2 = 0.15$ ;  $C_1 = 1 - 0.7$ ; 2 – 0.6; 3 – 0.5; б –  $C_1 = 0.7$ ;  $C_2 = 4 - 0.15$ ; 5 – 0.3; 6 – 0.4

**Fig. 3.** The movement of the new phase boundaries during the transition layer growth relative to the initial position at various solubility limits: а)  $C_2 = 0.15$ ;  $C_1 = (1) 0.7$ , (2) 0.6, and (3) 0.5; б)  $C_1 = 0.7$ ;  $C_2 = (4) 0.15$ , (5) 0.3, and (6) 0.4

### Задача об оценке напряжений и деформаций

Для оценки напряжений и деформаций рассмотрим частицу как «упругий» шар с неоднородным распределением концентраций, симметричным относительно центра шара, так что  $C_k = C_k(r)$  (поскольку диффузия и рост новой фазы – процессы необратимые, то напряжения называем упругими, так как их приращения линейно связаны с изменением концентрации) [8].

Обобщенные соотношения между компонентами тензоров напряжений и деформаций и концентрацией имеют вид

$$\sigma_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij} + \delta_{ij} [\lambda\varepsilon_{kk} - K\omega], \quad (11)$$

где  $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$ ,  $\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$  – коэффициенты Ламе;  $E$  – модуль Юнга;  $\nu$  –

коэффициент Пуассона;  $K = \frac{E}{3(1-2\nu)}$  – объемный модуль;  $\omega = 3\sum_{k=1}^n \alpha_k (C_k - C_{k0})$

– объемное изменение состава вследствие изменения концентраций;

$\alpha_k = \frac{1}{3V} \left( \frac{\partial V}{\partial C_k} \right)$  – коэффициент концентрационного расширения;  $\delta_{ij}$  – символ

Кронекера ( $\delta_{ij} = 1$ , если  $i = j$ ;  $\delta_{ij} = 0$ , если  $i \neq j$ ).

Массовые силы отсутствуют, и условия симметрии позволяют считать, что

$$\sigma_{\theta r} = \sigma_{\theta\phi} = \sigma_{\phi r} = 0,$$

$$\varepsilon_{\theta r} = \varepsilon_{\theta\phi} = \varepsilon_{\phi r} = 0,$$

а остальные компоненты тензоров напряжений и деформаций являются функциями только радиальной координаты и времени как параметра. В этих условиях

$$\varepsilon_{rr} = \frac{du}{dr}, \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{u}{r}. \quad (12)$$

С учетом соотношений (11) и (12) получим уравнения, связывающие напряжения и перемещения:

$$\sigma_{rr} = \frac{E}{1+\nu} \frac{du}{dr} + \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left( \frac{du}{dr} + 2\frac{u}{r} \right) - \frac{E}{3(1-2\nu)} \omega; \quad (13)$$

$$\sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\varphi\varphi} = \frac{E}{1+\nu} \frac{u}{r} + \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left( \frac{du}{dr} + 2\frac{u}{r} \right) - \frac{E}{3(1-2\nu)} \omega. \quad (14)$$

В сферической системе координат уравнение равновесия имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{2\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta} - \sigma_{\varphi\varphi}}{r} = 0. \quad (15)$$

Подставляем (13) и (14) в уравнение равновесия (15). Полагая, что свойства не зависят от координаты, приходим к уравнению равновесия в перемещениях в сферической системе координат

$$\frac{d}{dr} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d(r^2 u)}{dr} \right] = \frac{1}{3} \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{d\omega}{dr}. \quad (16)$$

Последующее интегрирование дает

$$u = \frac{1+\nu}{3} \frac{1}{1-\nu} \frac{1}{r^2} \int_x^r \omega(r) r^2 dr + \frac{A}{3} r + \frac{B}{r^2}, \quad (17)$$

где  $A$  и  $B$  – константы интегрирования.

Так как в предыдущем разделе было принято, что концентрация в частице и в матрице постоянная, то объемное изменение состава в этих областях равно нулю. В области переходного слоя концентрация задана функцией (9), в этом случае объемное изменение состава отлично от нуля и имеет вид [9]

$$\omega_f = 3(\alpha_p - \alpha_f)(C_f - C_{f0}).$$

В безразмерных переменных  $\bar{u}_1 = \frac{u_1}{R_0}$ ;  $\bar{\sigma}_{rr} = \frac{\sigma_{rr}}{E_1}$ ,  $\bar{\sigma}_{\theta\theta} = \bar{\sigma}_{\varphi\varphi} = \frac{\sigma_{\theta\theta}}{E_1} = \frac{\sigma_{\varphi\varphi}}{E_1}$  задача

имеет следующее решение:

- в частице:

$$\bar{u}_1 = \frac{\bar{A}_1}{3} \xi + \frac{\bar{B}_1}{\xi^2},$$

$$\bar{\sigma}_{rr,1} = \frac{1}{3} \frac{1}{1-2\nu_1} \frac{\bar{A}_1}{\xi} - 2 \frac{\bar{B}_1}{\xi^3} \frac{1}{1+\nu_1},$$

$$\bar{\sigma}_{\theta\theta,1} = \bar{\sigma}_{\varphi\theta,1} = \frac{1}{3} \frac{1}{1-2\nu_1} \frac{\bar{A}_1}{\xi} + \frac{\bar{B}_1}{\xi^3} \frac{1}{1+\nu_1},$$

$$\bar{\varepsilon}_{rr,1} = \frac{\bar{A}_1}{3} - 2 \frac{\bar{B}_1}{\xi^3}; \quad \bar{\varepsilon}_{\theta\theta,1} = \bar{\varepsilon}_{\varphi\varphi,1} = \frac{\bar{A}_1}{3} + \frac{\bar{B}_1}{\xi^3};$$

- в матрице:

$$\bar{u}_3 = \frac{\bar{A}_3}{3} \xi + \frac{\bar{B}_3}{\xi^2},$$

$$\bar{\sigma}_{rr,3} = \frac{1}{3} \frac{E_3/E_1}{1-2\nu_3} \bar{A}_3 - 2 \frac{\bar{B}_3}{\xi^3} \frac{E_3/E_1}{1+\nu_3},$$

$$\bar{\sigma}_{\theta\theta,3} = \bar{\sigma}_{\varphi\varphi,3} = \frac{1}{3} \frac{E_3/E_1}{1-2\nu_3} \bar{A}_3 + \frac{\bar{B}_3}{\xi^3} \frac{E_3/E_1}{1+\nu_3},$$

$$\bar{\varepsilon}_{rr,3} = \frac{\bar{A}_3}{3} - 2 \frac{\bar{B}_3}{\xi^3}; \quad \bar{\varepsilon}_{\theta\theta,3} = \bar{\varepsilon}_{\varphi\varphi,3} = \frac{\bar{A}_3}{3} + \frac{\bar{B}_3}{\xi^3};$$

- в переходном слое:

$$\bar{u}_2 = \frac{1}{3} \frac{1+\nu_2}{1-\nu_2} \frac{1}{\xi^2} \int_{\xi_1}^{\xi} \omega_f(\xi) \xi^2 d\xi + \frac{\bar{A}_2}{3} \xi + \frac{\bar{B}_2}{\xi^2},$$

$$\bar{\sigma}_{rr,2} = -\frac{2}{3} \frac{E_2/E_1}{1-\nu_2} \frac{1}{\xi^3} \int_{\xi_1}^{\xi} \omega_f(\xi) \xi^2 d\xi + \frac{1}{3} \frac{E_2/E_1}{1-2\nu_2} \bar{A}_2 - 2 \frac{\bar{B}_2}{\xi^3} \frac{E_2/E_1}{1+\nu_2},$$

$$\bar{\sigma}_{\theta\theta,2} = \bar{\sigma}_{\varphi\varphi,2} = \frac{1}{3} \frac{E_2/E_1}{1-\nu_2} \left[ \frac{1}{\xi^3} \int_{\xi_1}^{\xi} \omega_f(\xi) \xi^2 d\xi - \omega_f(\xi) \right] + \frac{1}{3} \frac{E_2/E_1}{1-2\nu_2} \bar{A}_2 + \frac{\bar{B}_2}{\xi^3} \frac{E_2/E_1}{1+\nu_2},$$

$$\bar{\varepsilon}_{rr,2} = \frac{1+\nu_2}{1-\nu_2} \left( -\frac{2}{3} \frac{1}{\xi^3} \int_{\xi_1}^{\xi} \omega_f(\xi) \xi^2 d\xi + \frac{1}{3} \omega_f(\xi) \right) + \frac{\bar{A}_2}{3} - 2 \frac{\bar{B}_2}{\xi^3},$$

$$\bar{\varepsilon}_{\theta\theta,2} = \bar{\varepsilon}_{\varphi\varphi,2} = \frac{1}{3} \frac{1+\nu_2}{1-\nu_2} \frac{1}{\xi^3} \int_{\xi_1}^{\xi} \omega_f(\xi) \xi^2 d\xi + \frac{\bar{A}_2}{3} + \frac{\bar{B}_2}{\xi^3}.$$

Так как границы раздела фаз – функции времени, а время в этой задаче – внешний параметр, то интегралы от концентраций легко берутся

$$\int_{\xi_1}^{\xi} C_f(\xi) \xi^2 d\xi = - \left[ \frac{(C_2 - C_1)(\xi_1 \xi_2)(\xi^2 - \xi_1^2)}{2(\xi_2 - \xi_1)} - \frac{(C_2 \xi_2 - C_1 \xi_1)(\xi^3 - \xi_1^3)}{3(\xi_2 - \xi_1)} \right].$$

Константы интегрирования определяются с помощью граничных условий:

$$\xi = 0: \quad \bar{u}_1 = 0;$$

$$\xi = \xi_1: \quad \bar{u}_1 = \bar{u}_2 \quad \text{и} \quad \bar{\sigma}_{rr,1} = \bar{\sigma}_{rr,2};$$

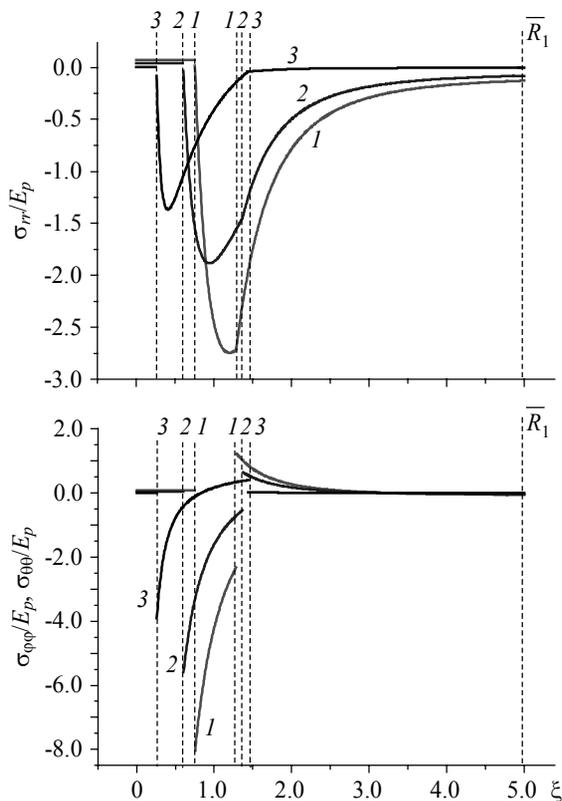
$$\xi = \xi_2: \quad \bar{u}_2 = \bar{u}_3 \quad \text{и} \quad \bar{\sigma}_{rr,2} = \bar{\sigma}_{rr,3};$$

$$\xi = \bar{R}_1: \quad \bar{u}_3 = 0.$$

Подставив полученное решение в граничные условия, получим систему шести алгебраических уравнений относительно постоянных интегрирования:  $\bar{A}_1$ ,  $\bar{B}_1$ ,  $\bar{A}_2$ ,  $\bar{B}_2$ ,  $\bar{A}_3$ ,  $\bar{B}_3$ . Окончательный результат не приводим в силу его громоздкости.

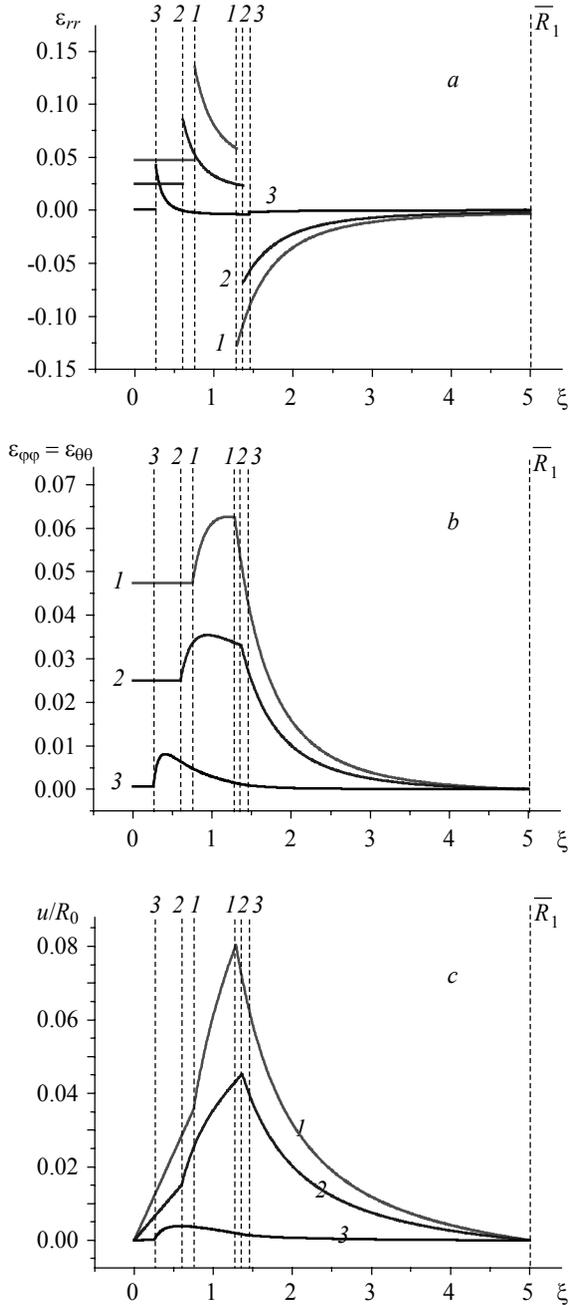
### Анализ результатов

На рис. 4 представлено изменение напряжений в рассматриваемых областях относительно модуля упругости частицы. Из рисунка видно, что при увеличении ширины переходного слоя напряжения уменьшаются. Аналогичный результат наблюдается при расчете деформаций (рис. 5). При малой ширине образующейся фазы, деформации на границах раздела велики и они уменьшаются с ростом фазы. Это позволяет утверждать, что напряжения могут привести к локальным повреждениям на начальной стадии роста переходного слоя.



**Рис. 4.** Отношение напряжений к модулю упругости частицы (сплошная) и положение границ (пунктиром) в моменты времени  $\tau$ : 1 – 0.05,  $h = 0.53$ ; 2 – 0.1,  $h = 0.76$ ; 3 – 0.2,  $h = 1.18$

**Fig. 4.** The ratio of the stress to the elastic modulus of the particle (solid lines) and the position of the boundaries (dotted line) at time instants  $\tau$ : (1) 0.05,  $h = 0.53$ ; (2) 0.1,  $h = 0.76$ ; and (3) 0.2,  $h = 1.18$



**Рис. 5.** Деформации (a, b) и отношение перемещений к начальному радиусу частицы (c) в моменты времени  $\tau$ : 1 – 0.05,  $h = 0.53$ ; 2 – 0.1,  $h = 0.76$ ; 3 – 0.2,  $h = 1.18$

**Fig. 5.** (a, b) Strains and (c) the ratio of displacements to the initial radius of the particle at time instants  $\tau$ : (1) 0.05,  $h = 0.53$ ; (2) 0.1,  $h = 0.76$ ; and (3) 0.2,  $h = 1.18$

### Заключение

Таким образом, в работе предложена модель формирования поля напряжений в окрестности индивидуального включения, окруженного растущим слоем новой фазы. Показано, что максимальные значения напряжений наблюдаются в начальной стадии роста.

Предложенная модель может быть использована в задачах с многоуровневым подходом при исследовании механических свойств композитов [10, 11], в том числе при описании процесса синтеза композита из порошковых смесей, когда реальный материал заменяется эффективным с выделением реакционной ячейки [12, 13]. В зависимости от исходного состава композита, переходный слой может содержать несколько фаз, последовательность формирования которых зависит от условий синтеза. Усовершенствование модели возможно за счет учета динамики изменения температуры и условий нагружения.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Kryukova O.N., Knyazeva A.G., Pogrebenkov V.M., Kostikov K.S., and Sevostianov I. Effective thermal expansion coefficient of a sintered glass–eucryptite composite // *J. Mater. Sci.* 2017. V. 52. P. 11314–11325. DOI: 10.1007/s10853-017-1298-9.
2. Knyazeva A.G., Kryukova O.N., Lurie S.A., Solyaev Y.O., and Shavnev A.A. Intermediate layer formation between inclusion and matrix during synthesis of unidirectional fibrous composite // *AIP Conference Proceedings*. 2014. V. 1623. P. 263–266. DOI: 10.1063/1.4898932.
3. Wagner C.Z. Beitrag zur theorie des anlaufvorgangs // *Phys. Chem.* 1933. V. 21. P. 25–36.
4. Dybkov V.I. Solid state reaction kinetics. Kyiv: IPMS publications, 2013. 400 p.
5. Erde'lyi Z., Schmitz G. Reactive diffusion and stresses in spherical geometry // *Acta Materialia*. 2012. V. 60. P. 1807–1817. DOI: 10.1016/j.actamat.2011.12.006.
6. Roussel M., Erde'lyi Z., Schmitz G. Reactive diffusion and stresses in nanowires or nanorods // *Acta Materialia*. 2017. V. 131. P. 315–322. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.04.001.
7. Ковалев О.Б., Беляев В.В. Математическое моделирование металлохимических реакций в двухкомпонентной реагирующей дисперсной смеси // *Физика горения и взрыва*. 2013. Т. 49. № 5. С. 64–76.
8. Назаренко Н.Н., Князева А.Г. Механические напряжения в сферолитах в процессе растворения кальций-фосфатов в биологических жидкостях // *Физическая мезомеханика*. 2010. Т. 13. № 3. С. 95–99.
9. Князева А.Г. Введение в локально-равновесную термодинамику физико-химических превращений в деформируемых средах: монография. Томск: Изд-во Том. ун-та, 146 с.
10. Советова Ю.В., Сидоренко Ю.Н., Скрипняк В.А. Многоуровневый подход к определению эффективных свойств композита с учетом повреждаемости // *Физическая мезомеханика*. 2013. Т. 16. № 5. С. 59–65.
11. Советова Ю.В., Сидоренко Ю.Н., Скрипняк В.А. Многоуровневый подход к исследованию влияния объемного соотношения компонентов волокнистого однонаправленного углепластика на его механические характеристики // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2014. № 2(28). С. 77–89.
12. Некрасов Е.А., Смоляков В.К., Максимов Ю.М. Математическая модель горения системы титан–углерод // *Физика горения и взрыва*. 1981. Т. 17. № 5. С. 39–46.
13. Лапишин О.В., Овчаренко В.Е. Математическая модель высокотемпературного синтеза интерметаллического соединения  $Ni_3Al$  на стадии воспламенения // *Физика горения и взрыва*. 1996. Т. 32. № 2. С. 46–54.

Статья поступила 25.06.2019 г.

Anisimova M.A., Knyazeva A.G. (2020) EVALUATION OF THE STRESS AND STRAIN DURING TRANSITION LAYER FORMATION BETWEEN A PARTICLE AND A MATRIX. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 63. pp. 60–71

DOI 10.17223/19988621/63/6

Keywords: transition layer, new phase, composite, moving boundary, stresses, strains, concentration.

When manufacturing composites, a transition layer is formed between a particle and a matrix. The composition and width of the layer both depend on technological parameters of the process. Application of the appropriate model of transition layer formation makes it possible to study in dynamics the evolution of transition zone size and the properties of obtained materials depending on the synthesis conditions. In addition, a new phase formation and boundary movement are accompanied by diffusion resulting in the redistribution of concentrations. These processes cause diffusion (concentration) stresses due to a difference in the phases' properties and a difference in the diffusant mobility in the phases.

The paper presents a model for estimating the stresses and strains during the transition layer formation between a spherical particle and a matrix. The model includes the problem of the reaction diffusion with the boundaries moving due to a new phase growth. In a quasi-steady-state approximation, the diffusion problem involves finding the concentration distribution in the regions of given sizes and the determining of the phase boundaries' position. The latter subproblem is solved numerically. It is followed by finding the concentration distribution. The problem of mechanical equilibrium is solved analytically. The resulting data depend on the position of the boundaries and distribution of the concentrations.

**Financial support.** This work was performed within the frame of the Fundamental Research Program of the State Academies of Sciences for 2013–2020, line of research III.23.

*Mariia A. ANISIMOVA* (Institute of Strength Physics and Materials Science of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Tomsk, Russian Federation). E-mail: anisimova\_mawa@mail.ru

*Anna G. KNYAZEVA* (Doctor of Physics and Mathematics, Institute of Strength Physics and Materials Science of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Tomsk, Russian Federation). E-mail: anna-knyazeva@mail.ru

#### REFERENCES

1. Kryukova O.N., Knyazeva A.G., Pogrebenkov V.M., Kostikov K.S., Sevostianov I. (2017) Effective thermal expansion coefficient of a sintered glass–eucryptite composite. *Journal of Materials Science*. 52. pp. 11314–11325. DOI: 10.1007/s10853-017-1298-9.
2. Knyazeva A.G., Kryukova O.N., Lurie S.A., Solyaev Y.O., Shavnev A.A. (2014) Intermediate layer formation between inclusion and matrix during synthesis of unidirectional fibrous composite. *AIP Conference Proceedings. International Conference on Physical Mesomechanics of Multilevel Systems*. 1623. pp. 263–266. DOI: 10.1063/1.4898932.
3. Wagner C.Z. (1933) Beitrag zur theorie des anlaufvorgangs. *Journal of Physical Chemistry*. 21. pp. 25–36. DOI: 10.1515/zpch-1933-2105.
4. Dybkov V.I. (2013) *Solid State Reaction Kinetics*. Kyiv: IPMS Publications.
5. Erde'lyi Z., Schmitz G. (2012) Reactive diffusion and stresses in spherical geometry. *Acta Materialia*. 60(4). pp. 1807–1817. DOI: 10.1016/j.actamat.2011.12.006.
6. Roussel M., Erde'lyi Z., Schmitz G. (2017) Reactive diffusion and stresses in nanowires or nanorods. *Acta Materialia*. 131(1). pp. 315–322. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.04.001.
7. Kovalev O.B., Belyaev V.V. (2013) Mathematical modeling of metallochemical reactions in a two-species reacting disperse mixture. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 49(5). pp. 563–574. DOI: 10.1134/S0010508213050080.

8. Nazarenko N.N., Knyazeva A.G. (2010) Mechanical stress in spherulites in dissolution of calcium phosphate in biological fluids. *Physical Mesomechanics*. 13(3). pp. 95–99.
9. Knyazeva A.G. (1996). *Vvedenie v lokal'no-ravnovesnyuyu termodinamiku fiziko-khimicheskikh prevrashcheniy v deformiruemyykh sredakh*. [Introduction to the local equilibrium thermodynamics of physicochemical transformations in deformable media]. Tomsk: TSU Publ.
10. Sovetova Yu.V., Sidorenko Yu.N., Skripnyak V.A. (2013) Multiscale approach to estimation of effective properties of a composite with regard to its damaging. *Physical Mesomechanics*. 16(5). pp. 59–65.
11. Sovetova Yu.V., Sidorenko Yu.N., Skripnyak V.A. (2014) Mnogourovnevyy podkhod k issledovaniyu vliyaniya ob"emnogo sootnosheniya komponentov voloknistogo odnonapravlennoy ugleplastika na ego mekhanicheskie kharakteristiki [The multilevel approach to studying the influence of the volumetric ratio in components of unidirectional carbon fiber composite on its mechanical properties]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 2(28). pp. 77–89.
12. Nekrasov E.A., Smolyakov, V.K., Maksimov Yu.M. (1981) Matematicheskaya model' gorennya sistemy titan uglerod [Mathematical model of the combustion of a titanium carbon system]. *Fizika gorennya i vzyva – Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 17(5). pp. 39–46.
13. Lapshin O.V., Ovcharenko V.E. (1996) A mathematical model of high-temperature synthesis of nickel aluminide Ni<sub>3</sub>Al by thermal shock of a powder mixture of pure elements. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 32(2). pp. 299–305. DOI: 10.1007/BF01998460.

Received: June 25, 2019