СКОРОСТИ РЕАКЦИЙ В ДЕФОРМИРУЕМОМ ТЕЛЕ В РАМКАХ ТЕРМОДИНАМИКИ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ*

А.Г. Князева

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

На основе термодинамики необратимых процессов продемонстрирована связь между скоростью реакции в деформируемом твердом теле и напряжениями без введения дополнительных гипотез. Описаны известные способы учета зависимости скорости реакции от структуры. Представлено возможное обобщение классических моделей за счет расширения термодинамики. Приведен пример перехода от континуального моделирования к двухуровневому, позволяющему установить связь между параметрами, влияющими на скорость реакции на разных масштабных уровнях. Подобный поход может быть применен для любых скалярных процессов.

Ключевые слова: деформируемые среды, скорости химических реакций, термодинамика, влияние структуры, моделирование.

Введение

Изучение особенностей синтеза многокомпонентных материалов и структур, в том числе аддитивными методами, сталкивается с необходимостью учета особенностей структуры материалов при моделировании физико-химических процессов. При этом появляются работы, в которых предлагается переосмыслить такие фундаментальные понятия, как химический потенциал. В целом, понятию химических потенциалов компонентов смеси и связанных с этим понятием химического сродства [1], скоростей реакций [2, 3], условиям химического равновесия [4], условиям протекания диффузионных процессов [5] и др. в современной термомеханике уделяется много внимания [6–8]. Имеются попытки обобщить идеи расширенной термодинамики на химические реакции [9, 10] (скорости реакций и химическое сродство), протекающие в неравновесных условиях, что может представлять интерес для различных приложений [11, 12].

По определению химическое сродство реакции представляет собой термодинамическую силу, которая определяет скорость и направление химического процесса. Несмотря на то, что этому понятию не один десяток лет, на некоторые аспекты, изменяющие сродство вследствие взаимодействия процессов разной природы, в литературе внимания обращают мало.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы показать, что средств термодинамики необратимых процессов (ТНП) достаточно для выявления зависимости скорости скалярного процесса (например, химической реакции) в деформируемом теле от вида напряженно-деформированного состояния, а расширение ТНП для учета особенностей структуры возможно разными методами. Последовательное изложение элементов теории для деформируемого тела с постепенным расширением идей на сложные среды, естественно, начнем с общих соотношений.

Общие соотношения

Теория термоупругости, как и более сложные модели континуальной механики, имеет глубокую связь с термодинамикой. Так, исходя из уравнения Гиббса для свободной энергии Гельмгольца, которая является основным потенциалом в условиях контроля температуры и деформаций,

$$dF = -SdT + \Sigma_{ij}d\epsilon_{ij}, \quad (1)$$

можем записать

$$dS = \frac{C_E}{T}dT + \beta_{ij}d\epsilon_{ij}; \quad (2)$$

$$d\Sigma_{ij} = -\beta_{ij}dT + C_{ijkl}d\epsilon_{kl}, \quad (3)$$

где $\Sigma_{ij} = \sigma_{ij}\rho^{-1}$ – тензор напряжений Кирхгофа; $\beta_{ij} = C_{ijkl}\alpha_{kl}$ – тензор термоупругих коэффициентов; α_{kl} – тензор коэффициентов теплового расширения; ϵ_{ij} – компоненты тензора деформаций Коши (для малых деформаций) или Коши – Грина (для больших деформаций).

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема № FWRW-2019-0035.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>