

УДК 539.3

ЗАРОДЫШИ ТВЕРДОЙ ФАЗЫ В ДЕФОРМИРУЕМОМ МАТЕРИАЛЕ

Кубланов Л. Б., Фрейдин А. Б.

Рассматривается равновесный зародыш твердой фазы в линейно-упругой среде. Задача о среде с равновесными областями новой фазы приводится к уравнениям теории упругости для неоднородной среды со специальным образом определенной «фазовой» деформацией при дополнительном условии фазового равновесия [1], накладывающем ограничения на форму границы фаз.

Рассматривается эллипсоидальное включение анизотропной фазы в неограниченной изотропной среде в однородном внешнем поле напряжений. Доказывается, что тензор, определяемый фазовой деформацией, изменением модулей упругости и напряжениями внутри включения и имеющий смысл тензора плотности дислокационных моментов, индуцированных областью новой фазы, в случае равновесного включения является шаровым. Этим характеристическим свойством определяются поля напряжений в равновесной двухфазной конфигурации (ДК); поверхность равновесного эллипсоида оказывается поверхностью равных и постоянных главных значений скачка тензора напряжений и постоянного главного значения скачка тензора деформаций. Девятеры тензора возмущения напряжений внутри зародыша и тензора, определяющего форму эллипсоида, пропорциональны, что является обобщением результата, полученного для зародышей расплава [2].

Из структуры тензора плотности дислокационных моментов следует уравнение, определяющее форму и ориентацию эллипсоидального зародыша в зависимости от внешних напряжений и параметров фазового перехода. Возможность существования равновесного эллипсоидального зародыша твердой фазы была показана в [3], где в результате решения задачи о ДК методом [4] были получены аналогичные уравнения для случая изотропных фаз; в [5] приведена система уравнений для расчета ДК с анизотропным эллипсоидальным зародышем.

Определяются условия существования равновесных зародышей и предельные конфигурации, аналогичные конфигурациям зародышей расплава [2].

Рассматриваются энергетические изменения при формировании ДК. Показывается, что энергии Гиббса исходной однофазной конфигурации и равновесной ДК с эллипсоидальным зародышем равны; равновесный зародыш является критическим. Возникновение зародыша возможно только в метастабильной фазе: при напряжениях, допускающих существование равновесного эллипсоидального зародыша, удельная энергия Гиббса исходной однофазной конфигурации не меньше удельной энергии Гиббса однородной конфигурации в новом фазовом состоянии, причем равенство этих энергий возможно только для ДК, содержащих слой. При напряжениях, равных напряжениям внутри равновесного зародыша, материал новой фазы имеет большую удельную энергию Гиббса, чем исходный материал.

1. Двухфазная конфигурация (ДК) в приближении малых деформаций. Рассмотрим неограниченную среду, находящуюся в однородном напряженном состоянии σ_0 при температуре θ и являющуюся линейно-упругой вплоть до момента фазового перехода. Предположим, что в ограниченной области V^+ происходит фазовый переход, сопровождающийся «собственной» деформацией и изменением модулей упругости. При этом возникают дополнительные поля перемещений и формируется поле напряжений, зависящее от характеристик фазового перехода и формы области V^+ .

Задача о равновесной ДК состоит в определении формы области V^+ и напряженного состояния, удовлетворяющих условиям равновесия [1],

которые в случае малых деформаций имеют вид

$$(1.1) \quad \nabla \cdot \sigma = 0$$

$$(1.2) \quad [u] = 0, \quad n \cdot [\sigma] = 0, \quad [\theta] = 0$$

$$(1.3) \quad \rho_0 [f] - \sigma^\pm \cdot \cdot [\varepsilon] = 0 \quad (\varepsilon = \text{def } u)$$

и условию на бесконечности

$$\sigma \rightarrow \sigma_0 \quad \text{при} \quad |x| \rightarrow \infty$$

Здесь σ — тензор напряжений Коши, u — вектор перемещений, n — единичный вектор нормали к границе фаз, f — удельная плотность свободной энергии, индексами «минус» и «плюс» обозначены материалы исходной и новой фаз, ρ_0 — плотность материала в исходном состоянии (фаза «минус» в отсутствие напряжений при температуре θ), квадратными скобками обозначено изменение величины при переходе от фазы «минус» к фазе «плюс», x — точка тела.

Условия (1.1) выполняются внутри фаз, (1.2), (1.3) — на фазовой границе; влиянием поверхностного натяжения пренебрегаем. Из первого условия (1.2) следует, что

$$(1.4) \quad [\nabla u] = nh, \quad h = n \cdot [\nabla u]$$

Условие фазового равновесия (1.3) записано с учетом второго условия (1.2) и соотношений (1.4).

Предположим, что при заданных внешних условиях (σ_0, θ) существуют две однофазные однородно-напряженные конфигурации с деформациями ε_0^\pm из исходного состояния. Будем называть эти конфигурации опорными. Возможность их существования означает, что уравнение состояния

$$(1.5) \quad \rho_0 \partial f(\varepsilon, \theta) / \partial \varepsilon = \sigma(\varepsilon, \theta)$$

допускает решение

$$\sigma(\varepsilon_0^-, \theta) = \sigma(\varepsilon_0^+, \theta) = \sigma_0$$

Удельные энергии Гиббса опорных конфигураций

$$g_0^\pm = f(\varepsilon_0^\pm, \theta) - \rho_0^{-1} \sigma_0 \cdot \cdot \varepsilon_0^\pm$$

могут быть не равны между собой. Например, при

$$(1.6) \quad \psi = g_0^- - g_0^+ > 0$$

опорная конфигурация фазы «минус» метастабильна. Собственная деформация $[\varepsilon_0]$, вообще говоря, зависит от напряжений и температуры, при которых происходит фазовый переход.

Понятие опорной конфигурации в задаче о фазовом переходе было иначе введено в [4], где предполагалось, что обе фазы могут существовать в гидростатически напряженных состояниях, которые принимались в качестве опорных. Выбранные давление и температура обеспечивали равенство удельных энергий Гиббса фаз; внешние напряжения и соответствующая им температура отличались от опорных.

Полагая, что собственная деформация $[\varepsilon_0]$ и возникающие в ДК дополнительные поля перемещений w малы, примем квадратичную аппроксимацию свободной энергии

$$(1.7) \quad \rho_0 f(\varepsilon^\pm, \theta) = \rho_0 f(\varepsilon_0^\pm, \theta) + \sigma_0 \cdot \cdot e^\pm + \frac{1}{2} e^\pm \cdot \cdot C^\pm \cdot \cdot e^\pm \\ e = \text{def } w, \quad C^\pm = (\partial^2 f / \partial \varepsilon \partial \varepsilon)_{\varepsilon_0^\pm, \theta}$$

Согласно (1.5), в ДК действуют напряжения

$$(1.8) \quad \sigma^\pm = \sigma_0 + C^\pm \cdot \cdot e^\pm$$

Поскольку $\sigma_0 = C_0 \cdot \cdot \varepsilon_0$, где $C_0 = C^-$ — тензор модулей упругости в исходном состоянии, то выражение для свободной энергии и уравнение (1.8) могут быть записаны в виде

$$(1.9) \quad \rho_0 f(\varepsilon, \theta) = \begin{cases} \rho_0 f_0^- + 1/2 \varepsilon \cdot \cdot C_0 \cdot \cdot \varepsilon, & \mathbf{x} \in V^+ \\ \rho_0 f_0^+ + 1/2 (\varepsilon - \varepsilon^f) \cdot \cdot C^+ \cdot \cdot (\varepsilon - \varepsilon^f), & \mathbf{x} \in V^- \end{cases}$$

$$(1.10) \quad \begin{aligned} \sigma(\mathbf{x}) &= (C_0 + C_1 V(\mathbf{x})) \cdot \cdot (\varepsilon(\mathbf{x}) - \varepsilon^f V(\mathbf{x})) \\ \varepsilon^f &= [\varepsilon_0] - B_1 \cdot \cdot \sigma_0 = \varepsilon_0^+ - B^+ \cdot \cdot \sigma_0 \\ C_1 &= C^+ - C_0, \quad B^+ = (C^+)^{-1}, \quad B_0 = C_0^{-1}, \quad B_1 = B^+ - B_0 \\ f_0^- &= f_0(\theta), \quad f_0^+ = f(\varepsilon_0^+, \theta) - 1/2 \sigma_0 \cdot \cdot B^+ \cdot \cdot \sigma_0 \end{aligned}$$

Здесь f_0^- — удельная плотность свободной энергии в исходном состоянии, $V(\mathbf{x})$ — характеристическая функция области V^+ . Деформация ε^f связана с опорными конфигурациями; это собственная деформация при гипотетическом переходе из исходного состояния в новое ненапряженное фазовое состояние, материал в котором имеет те же свойства, что и в соответствующей напряжением σ_0 опорной конфигурации фазы «плюс»; f_0^+ — плотность свободной энергии в этом гипотетическом состоянии. Отметим, то фаза «плюс» может не существовать в ненапряженном состоянии.

Уравнение (1.10) совместно с условиями (1.1) и первыми двумя условиями (1.2) приводит задачу об определении поля напряжений в заданной ДК к задаче о неоднородной среде с областями, имеющими иные по сравнению с окружающим материалом модули; возникновение этих областей сопровождается фазовой деформацией ε^f . Условие фазового равновесия (1.3) является ограничением на форму областей V^+ .

Условие (1.3) при учете (1.2), (1.9), (1.10) может быть записано в виде

$$(1.11) \quad \gamma + 1/2 ([\sigma] \cdot \cdot \varepsilon^+ - [\varepsilon] \cdot \cdot \sigma^+ - \sigma^+ \cdot \cdot \varepsilon^f) = 0 \quad (\gamma = \rho_0 [f_0])$$

Скачки деформаций и напряжений на границе включения в линейно-упругой среде связаны с полем напряжений внутри включения и фазовой деформацией соотношениями [6]

$$(1.12) \quad [\varepsilon] = K(\mathbf{n}) \cdot \cdot C_0 \cdot \cdot \mathbf{m}, \quad [\sigma] = S(\mathbf{n}) \cdot \cdot \mathbf{m} \\ (K(\mathbf{n}) = \{ \mathbf{n} (\mathbf{n} \cdot C_0 \cdot \mathbf{n})^{-1} \mathbf{n} \}^s, \quad S(\mathbf{n}) = C_0 \cdot \cdot K(\mathbf{n}) \cdot \cdot C_0 - C_0)$$

$$(1.13) \quad \mathbf{m} = B_1 \cdot \cdot \sigma^+ + \varepsilon^f = B_1 \cdot \cdot (\sigma^+ - \sigma_0) + [\varepsilon_0]$$

(s означает симметризацию четырехвалентного тензора по перестановке индексов внутри пар). Из (1.11)–(1.13) следует, что на равновесной границе фаз

$$(1.14) \quad \mathbf{m} \cdot \cdot C_0 \cdot \cdot K(\mathbf{n}) \cdot \cdot C_0 \cdot \cdot \mathbf{m} = \varepsilon^+ \cdot \cdot C_0 \cdot \cdot \mathbf{m} + \sigma^+ \cdot \cdot \varepsilon^f - 2\gamma$$

2. Равновесное эллипсоидальное включение. Поскольку поле напряжений σ^+ внутри однородного эллипсоидального включения, находящегося в однородном внешнем поле, однородно [7], тензор \mathbf{m} и правая часть уравнения (1.14) постоянны на границе фаз. Следовательно, форма равновесного эллипсоидального зародыша должна быть такой, чтобы напряжения внутри эллипсоида обеспечивали выполнение на границе условия

$$(2.1) \quad K_* = \mathbf{m} \cdot \cdot C_0 \cdot \cdot K(\mathbf{n}) \cdot \cdot C_0 \cdot \cdot \mathbf{m} = \text{const}(\mathbf{n})$$

Утверждение. Напряжения внутри равновесного эллипсоидального зародыша новой фазы в линейно-упругой изотропной среде таковы, что тензор \mathbf{m} — шаровой:

$$(2.2) \quad \mathbf{m} = c\mathbf{E}$$

(\mathbf{E} — единичный тензор, c — параметр, подлежащий определению).

Доказательство. Для изотропной среды

$$(2.3) \quad C_0 = \lambda_0 E E + 2\mu_0 I, \quad K(n) = (anEn - bnnnn)^s \\ a = \mu_0^{-1}, \quad b = (\lambda_0 + \mu_0)/[\mu_0(\lambda_0 + 2\mu_0)]$$

где λ_0 и μ_0 — коэффициенты Ламе, I — единичный четырехвалентный тензор [6]. Условие (2.1) может быть записано в виде

$$(2.4) \quad K_* = a(n \cdot q)^2 - b(n \cdot q \cdot n)^2 = a \sum_i q_i^2 n_i^2 - b \sum_{i,j} q_i q_j n_i n_j = \text{const}(n)$$

где q_i — главные значения тензора $q = C_0 \cdot m$, n_i — проекции нормали на главные направления q .

Достаточность условия (2.2) для выполнения (2.4) очевидна.

Необходимость следует, например, из требования выполнения (2.4) в точках эллипсоида, в которых нормаль параллельна главным осям тензора q (где соответственно $n_i^2 = 1$): $(a - b)q_i^2 = \text{const}$, откуда $|q_1| = |q_2| = |q_3|$. Пусть $q_1 = q_2 = -q_3 = q$. Тогда $K_* = q^2 \{a - b(1 - 2n_3^2)^2\} \neq \text{const}(n)$. Следовательно, $q_1 = q_2 = q_3$, т. е. тензоры q и m шаровые.

Поля напряжений и деформаций внутри эллипсоидального включения определяются уравнениями [6, 7]

$$(2.5) \quad \sigma^+ = \sigma_0 + C_0 \cdot (\Omega - I) \cdot m, \quad \varepsilon^+ = \varepsilon_0 + \Omega \cdot m$$

где Ω — тензор Эшелби, зависящий от геометрических характеристик эллипсоида и упругих модулей окружающего материала.

Из (1.13) и (2.5) следует, что

$$(2.6) \quad (C_1^{-1} \cdot C_0 + \Omega) \cdot m = -B_0 \cdot \sigma_*$$

$$(2.7) \quad \sigma_* = B_1^{-1} \cdot [\varepsilon_0] = \sigma_0 + B_1^{-1} \cdot \varepsilon^f$$

Подставив (2.2) в (2.6), получим уравнение для определения формы равновесного эллипсоидального зародыша

$$(2.8) \quad \omega = -c^{-1} B_0 \cdot \sigma_* + \omega_*$$

$$(2.9) \quad \omega_* = -3k_0 C_1^{-1} \cdot E = E + B_0 \cdot B_1^{-1} \cdot E$$

Здесь $\omega = \Omega \cdot E$ — тензор, соосный эллипсоиду; его главные значения [7]

$$(2.10) \quad \omega_i = \frac{3\kappa v}{8\pi} \int_0^\infty \frac{du}{(a_i^2 + u) \sqrt{(a_1^2 + u)(a_2^2 + u)(a_3^2 + u)}}$$

$$\kappa = \text{tr } \omega = (1 + v_0) / (1 - v_0), \quad v = 4\pi a_1 a_2 a_3 / 3$$

где v_0 — коэффициент Пуассона фазы «минус», a_i — полуоси эллипсоида, k_0 — модуль объемного сжатия фазы «минус». Поскольку $\text{tr } B_0 \cdot \sigma_* = I_*/(3k_0)$, где $I_* = \text{tr } \sigma_*$, из (2.7), (2.9) и (2.10) следует, что

$$(2.11) \quad c = -I_* / Q, \quad Q = 3k_0 (\kappa - \text{tr } \omega_*)$$

Условие (2.2) и его следствия (2.8) и (2.11) являются только необходимыми условиями фазового равновесия.

Подставив (2.2) и (2.3) в (1.14) и (2.5), получим уравнение, связывающее параметр c , тензоры ω и σ_0 и параметры фазового перехода, из которого при учете (2.8) и (2.11) следует, что равновесная ДК с эллипсоидальным зародышем новой фазы может существовать в однородном поле напряжений, если

$$(2.12) \quad I_*^2 = -2\gamma_* Q, \quad \gamma_* = \gamma + 1/2 \varepsilon^f \cdot B_1^{-1} \cdot \varepsilon^f$$

В силу (2.12) параметры фазового перехода должны быть такими, чтобы Q и γ_* имели разный знак. Из (2.11) и (2.12) следует, что

$$(2.13) \quad c = -\text{sign}(QI_*) \sqrt{2|\gamma_*|/|Q|}$$

Из неотрицательной определенности тензора ω следует второе условие существования эллипсоидального зародыша (i — произвольный вектор)

$$(2.14) \quad i \cdot (\omega_* - c^{-1} B_0 \cdot \sigma_*) \cdot i \geq 0$$

В силу соотношений (1.12), (1.13), (2.2) и (2.5) напряженное состояние в среде с равновесным эллипсоидальным зародышем таково, что:

1°. Тензоры возмущения напряжений и деформаций внутри зародыша соосны эллипсоиду. Пропорциональны тензоры ω и $\varepsilon^* - \varepsilon_0$, девиаторы тензоров ω и возмущения напряжений (штрихом обозначен девиатор тензора):

$$(2.15) \quad \sigma^+ - \sigma_0 = c C_0 \cdot (\omega - E), \quad \varepsilon^+ - \varepsilon_0 = c \omega \\ \omega' = (\sigma^{+'} - \sigma_0') / (2\mu_0 c)$$

(соотношения, аналогичные первым двум, получены в [5], третье — обобщает решение для зародыша расплава [2]).

2°. Поверхность равновесного эллипсоида является поверхностью равных и постоянных главных значений скачка тензора напряжений и постоянного главного значения скачка тензора деформаций:

$$[\sigma] = 2\mu_0 \kappa (nn - E), \quad [\varepsilon] = \kappa nn$$

3°. Напряжения и деформации внутри зародыша определяются параметрами фазового перехода:

$$(2.16) \quad \sigma^+ = B_1^{-1} \cdot (cE - \varepsilon^f) \\ \varepsilon^+ = - (3k_0 c C_1^{-1} \cdot E + B_0 \cdot B_1^{-1} \cdot \varepsilon^f)$$

4°. На поверхности эллипсоида

$$\sigma^- = c \{ 2\mu_0 \kappa (E - nn) + B^{-1} \cdot E \} - B_1^{-1} \cdot \varepsilon^f$$

(параметр c определен равенством (2.13)).

Из (2.8), (2.13) и (2.15) следует, что форма и ориентация эллипсоида определяются тензором σ_* и анизотропией тензора модулей упругости новой фазы:

$$(2.17) \quad \omega' = |\alpha \xi' + \omega_*', \quad \xi = \sigma_* / I_*, \quad \alpha = Q / (2\mu_0)$$

В силу условия (2.14) область существования зародышей в пространстве главных значений ξ_k тензора ξ — равносторонний треугольник на девиаторной плоскости

$$(2.18) \quad \sum_k \xi_k = 1$$

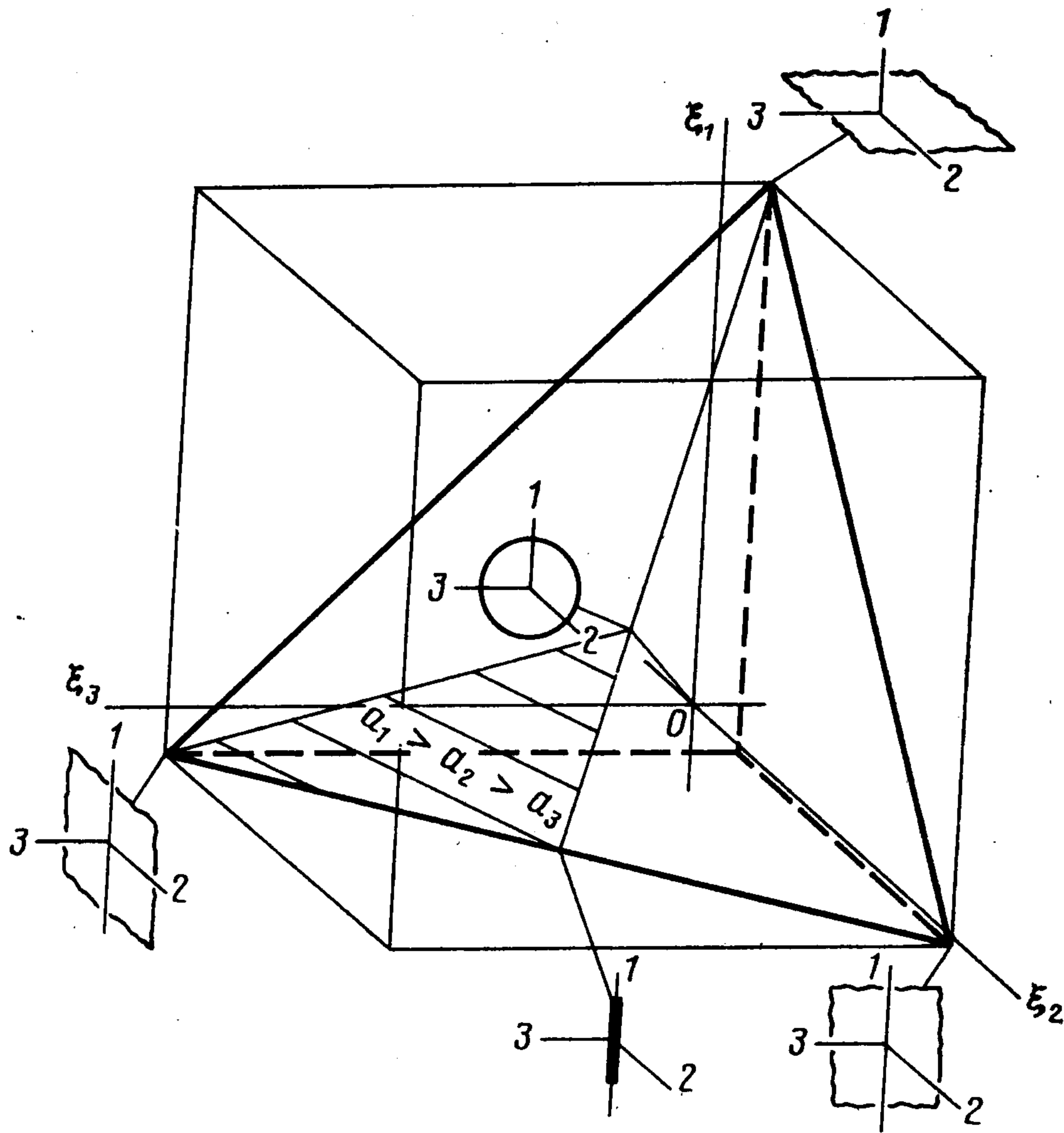
с вершинами на линиях пересечения плоскостей $\alpha \xi_k = (\alpha - \kappa) / 3 - i_k \cdot \omega_*' \cdot i_k$, где i_k — главные направления тензора ξ .

Если материал фазы «плюс» изотропный, то $\omega_*' = 0$, $\omega' = \alpha \xi'$ — эллипсоид соосен тензору σ_* . (Аналогичное уравнение в ином виде было получено в [3].) Эллипсоид соосен тензору напряжений на бесконечности, если соосны тензоры ε^f и σ_0 или $\mu_+ = 0$. Из (2.13) и равенства $I_* = \text{tr } B_1^{-1} \cdot [\varepsilon_0] = -3 [\vartheta_0] k_+ k_0 / k_1$, где $[\vartheta_0] = \text{tr } [\varepsilon_0]$, $k_+ = k_0 + k_1$, следует, что

$$(2.19) \quad I_* = -\text{sign} ([\vartheta_0] / k_1) \sqrt{2 | \gamma_* Q |}$$

Поскольку $Q = 3k_0 (\kappa + 3k_0 / k_1)$, $\nu_0 < 1/2$, $k_0, k_+ > 0$, то $k_1 Q > 0$ и, следовательно

$$(2.20) \quad \text{sign } \alpha = \text{sign } Q = \text{sign } k_1, \quad c = \text{sign} [\vartheta_0] \sqrt{2 | \gamma_* / Q |}$$



Условие (2.14) определяет треугольник (фигура), получающийся при пересечении плоскости (2.18) с кубом

$$(\alpha - \kappa)/3 \leq \alpha \xi_k \leq (\alpha + 2\kappa)/3$$

Различным точкам треугольника соответствуют эллипсоиды разной формы.

Предположим, что $k_1 > 0$ ($\alpha > 0$). При $\xi_1 = \xi_2 = \xi_3 = 1/3$ равновесным является сферический зародыш. При увеличении ξ_1 и, например, соответствующем уменьшении $\xi_2 = \xi_3$, зародыш превращается в эллипсоид вращения, сплюснутый в направлении i_1 ; при уменьшении $\xi_1 < 1/3$ эллипсоид вытягивается вдоль направления i_1 . Предельные конфигурации при условии конечности объема — плоскости и бесконечные иглы. Такие предельные конфигурации были описаны для зародыша расплава [2]. Аналогично может быть рассмотрен случай $k_1 < 0$.

Если материал фазы «плюс» трансверсально-изотропный, а тензор ϵ^f осесимметричный ($\epsilon^f = \epsilon_1 \Pi + \epsilon_2 (E - \Pi)$, где Π — орт оси изотропии), то

$$\begin{aligned} \omega' &= -\{\sigma_0'/(2\mu_0 c) + d (1/3 E - \Pi)\} \\ \gamma_* &= \gamma + \{(b_{22} + b_{23}) \epsilon_1^2 + 2b_{11} \epsilon_2^2\} \delta^{-1} \\ Q &= 3k_0 (\kappa - 3) - (b_{22} + b_{23} + 2b_{11}) \delta^{-1} \\ d &= 2 \{(b_{22} + b_{23} - b_{12} - b_{11}) c - (b_{22} + b_{12} + b_{23}) \epsilon_1 - \\ &\quad - (2b_{12} + b_{11}) \epsilon_2\} \delta^{-1}, \quad \delta = 2b_{11} (b_{22} + b_{23}) - 4b_{12}^2 \\ b_{kk} &= \frac{1}{E_k} - \frac{1}{E_0}, \quad b_{12} = \frac{\nu_0}{E_0} - \frac{\nu_1}{E_1}, \quad b_{23} = \frac{\nu_0}{E_0} - \frac{\nu_2}{E_2} \end{aligned}$$

Здесь E_0 — модуль Юнга фазы «минус», E_1 и E_2 — модули Юнга фазы «плюс» при растяжении вдоль оси и в плоскости изотропии соответственно, ν_1 и ν_2 — коэффициенты Пуассона фазы «плюс», характеризующие поперечное сжатие вдоль оси изотропии и в плоскости изотропии при растяжении в плоскости изотропии соответственно. Если ось изотропии

направлена вдоль одного из главных направлений тензора σ_0 , то эллипсоид соосен σ_0 .

3. Энергетические изменения при формировании ДК. Анализ устойчивости равновесных конфигураций не входит в задачу данной работы. Ниже рассмотрены некоторые следствия сравнения энергий Гиббса однофазных и двухфазной конфигураций. Изменение энергии Гиббса

$$G = \int_V \rho_0 f(\epsilon, \theta) dV - \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u} d\Gamma$$

тела V , ограниченного поверхностью Γ при изотермическом возникновении включения V^+ из материала новой фазы в условиях мертвого нагружения, может быть представлено в виде

$$(3.1) \quad \Delta G = \int_{V^+} (\gamma_* - 1/2 \boldsymbol{\sigma}_* \cdot \cdot \mathbf{m}) dV$$

При выводе (3.1) использовались первые два условия (1.2), представления свободной энергии (1.7) и (1.9) и вытекающее из (1.10) и (1.13) равенство: $\boldsymbol{\sigma}_0 \cdot \cdot \boldsymbol{\epsilon}^+ - \boldsymbol{\sigma}^+ \cdot \cdot \boldsymbol{\epsilon}_0^- = \boldsymbol{\sigma}_0 \cdot \cdot \mathbf{m}$. Аналогично определяется работа внешних сил при формировании включения в условиях мертвого нагружения

$$A = \int_{V^+} \boldsymbol{\sigma}_0 \cdot \cdot \mathbf{m} dV$$

В случае эллипсоидального включения в однородном поле напряжений

$$(3.2) \quad \Delta G = V^+ (\gamma_* - 1/2 \boldsymbol{\sigma}_* \cdot \cdot \mathbf{m})$$

$$(3.3) \quad A = V^+ \boldsymbol{\sigma}_0 \cdot \cdot \mathbf{m}$$

Из (2.2), (2.11), (2.13), (2.16) и (3.2) следует равенство энергий Гиббса исходной однофазной конфигурации и равновесной ДК с эллипсоидальным зародышем:

$$(3.4) \quad \Delta G = 0$$

При этом работа определяется шаровой частью тензора напряжений связанной с параметрами фазового перехода:

$$A = -V^+ Q^{-1} I_* \operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma}_0 = V^+ \{2\gamma_* + \operatorname{sign}(I_* Q) \operatorname{tr} \mathbf{B}_1^{-1} \cdot \cdot \boldsymbol{\epsilon}^f \sqrt{2 |\gamma_* / Q|}\}$$

Для изотропного зародыша в силу (2.19) и (2.20)

$$A = V^+ \{2\gamma_* + \operatorname{sign}[\vartheta_0] (3k_+ k_0 / k_1) \vartheta^f \sqrt{2 |\gamma_* / Q|}\}$$

Из (3.2) при учете (2.6) следует, что

$$\partial \Delta G / \partial V^+ = \gamma_* \left| -1/2 \boldsymbol{\sigma}_* \cdot \cdot \mathbf{R} \cdot \cdot \boldsymbol{\sigma}_* \right|, \quad \mathbf{R} = -(\mathbf{C}_1 \cdot \cdot \mathbf{C}_0 + \boldsymbol{\Omega})^{-1} \cdot \cdot \mathbf{B}_0$$

где \mathbf{R} определяется формой включения.

При $\gamma_* > 1/2 \boldsymbol{\sigma}_* \cdot \cdot \mathbf{R} \cdot \cdot \boldsymbol{\sigma}_*$ энергетически предпочтительно уменьшение объема и исчезновение неравновесного зародыша. Такие зародыши — докритические. При $\gamma_* < 1/2 \boldsymbol{\sigma}_* \cdot \cdot \mathbf{R} \cdot \cdot \boldsymbol{\sigma}_*$ неравновесный зародыш разрастается. Равновесная конфигурация (2.17) удовлетворяет условию (3.4) и является критической. Напряжения внутри зародыша твердой фазы зависят от его формы вне связи с поверхностным натяжением (см. (2.5)); эта зависимость определяет критическую конфигурацию зародыша подобно тому, как при фазовых переходах газ — жидкость разность давлений внутри и снаружи капли и критический радиус определяются поверхностным натяжением на границе фаз [8].

Разность (1.6) удельных энергий Гиббса однофазных конфигураций при напряжениях σ_0 , удовлетворяющих условиям существования равновесного эллипсоидального зародыша, может быть записана в виде

$$\begin{aligned}\psi &= \frac{1}{2}\sigma_* \cdot \cdot V_1 \cdot \cdot \sigma_* - \gamma_* = \\ &= \frac{1}{2}c^2 \{Q + (\omega - \omega_*) \cdot \cdot C_0 \cdot \cdot V_1 \cdot \cdot C_0 \cdot \cdot (\omega - \omega_*)\} = \\ &= 2\mu_0^2 c^2 \{(\omega - \kappa E) \cdot \cdot V_1 \cdot \cdot (\omega - \kappa E) + \kappa/\mu_0\} = \\ &= \mu_0 c^2 \{2\mu_0 (\omega - \kappa E) \cdot \cdot V^+ \cdot \cdot (\omega - \kappa E) + (\kappa^2 - \omega \cdot \cdot \omega)\}\end{aligned}$$

Поскольку $\omega \cdot \cdot \omega \leq \kappa^2$, то

$$\psi \geq 2\mu_0^2 c^2 (\omega - \kappa E) \cdot \cdot V^+ \cdot \cdot (\omega - \kappa E) > 0$$

так как V^+ — положительно-определенный тензор. Следовательно, возникновение равновесных эллипсоидальных зародышей возможно только тогда, когда исходная однофазная конфигурация метастабильна.

Энергия Гиббса ДК с эллипсоидальным зародышем равна энергиям обеих однофазных конфигураций, если $\psi = 0$. При $c \neq 0$ это возможно только для предельной конфигурации, содержащей слой (плоскость при ограниченном объеме зародыша) $\omega = \kappa n n$ при условии вырождения модулей упругости фазы «плюс»: $V^+ \cdot \cdot (E - \kappa n n) = 0$. Отметим, что равновесные ДК со слоями новой фазы не исчерпываются предельными конфигурациями с равновесными эллипсоидальными зародышами.

Наименьшая степень метастабильности ψ , допускающая существование равновесного зародыша, соответствует напряжениям, при которых квадратичная форма $(\omega - \kappa E) \cdot \cdot V_1 \cdot \cdot (\omega - \kappa E)$ минимальна. В случае изотропных фаз это условие имеет вид

$$-(\mu_1 \mu_0 / \mu_+) \omega \cdot \cdot \omega = \min (\mu_1 = \mu_+ - \mu_0)$$

При $\mu_1 < 0$ в наименее метастабильной однофазной конфигурации равновесным является сферический зародыш $\omega = (\kappa/3) E$. При этом

$$\psi = \frac{2}{3}\mu_0 c^2 \kappa^2 (1 + 4\mu_0 / (3\kappa_+))$$

Если $\mu_1 > 0$, то соответственно равновесной является предельная конфигурация $\omega = \kappa n n$. При этом

$$\psi = 2\mu_0^2 c^2 / (\kappa_+ \mu_+) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \mu_+ \rightarrow \infty$$

Соответствующие напряжения определяются равенством (2.8).

В заключение отметим, что из (2.2), (2.11), (2.12) при использовании равенства $C_1^{-1} = -V^+ \cdot \cdot V_1^{-1} \cdot \cdot V_0$ следует, что находящийся в однородном поле напряжений σ^+ материал внутри зародыша имеет большую удельную плотность энергии Гиббса, чем исходный материал в том же поле напряжений:

$$g^+(\sigma^+) - g^-(\sigma^+) = \gamma_* - \frac{1}{2}m \cdot \cdot V_1^{-1} \cdot \cdot m = 3k_0 \gamma_* (\kappa - 3)/Q > 0$$

так как $\gamma_*/Q < 0$, $\kappa < 3$.

Авторы благодарят С. К. Канауна за обсуждение работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Гринфельд М. А.* Об условиях термодинамического равновесия фаз нелинейно-упругого материала // Докл. АН СССР (ДАН СССР). 1980. Т. 251. № 4. С. 824—828.
2. *Бердичевский В. Л.* Зародыши расплава в твердом теле // Докл. АН СССР (ДАН СССР). 1983. Т. 273. № 1. С. 80—84.
3. *Гринфельд М. А.* Асимптотика малой разности плотностей в проблеме когерентных фазовых превращений // ПММ. 1985. Т. 49. Вып. 4. С. 582—592.
4. *Гринфельд М. А.* Об одной асимптотике в проблеме гетерогенных когерентных фазовых равновесий однокомпонентных упругих сред // Докл. АН СССР (ДАН СССР). 1984. Т. 275. № 1. С. 43—47.
5. *Гринфельд М. А.* О гетерогенном равновесии нелинейно-упругих фаз и тензорах химического потенциала // Вопросы нелинейной механики сплошной среды. Таллин: Валгус. 1985. С. 33—47.
6. *Кунин И. А., Соснина Э. Г.* Концентрация напряжений на эллипсоидальной неоднородности в анизотропной упругой среде // ПММ. 1973. Т. 37. Вып. 2. С. 306—315.
7. *Эшелби Дж.* Континуальная теория дислокаций. М.: Изд-во иностр. лит. 1963. 247 с.
8. *Леонтович М. А.* Введение в термодинамику. Статистическая физика. М.: Наука. 1983. 416 с.

Ленинград

Поступила в редакцию
2.VI.1986