

УДК 539.3

© 2004 г. В. И. Кондауров

**УРАВНЕНИЯ КЛАПЕЙРОНА – КЛАУЗИУСА
ДЛЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО РОДА
В ТЕРМОУПРУГОМ МАТЕРИАЛЕ**

Рассматривается модель квазистационарных изотермических фазовых превращений термоупругих твердых тел. Обсуждаются некоторые вопросы, связанные с заданием кинематической характеристики фазового превращения. Формулируются соотношения на поверхности сильного разрыва, разделяющего фазы материала. В отличие от классического случая равновесия фаз жидкости (газа) в предложенных соотношениях учитывается необратимый характер фазового перехода в твердых телах, тензорный характер химического потенциала и существенная зависимость от типа анизотропии материала фаз. Для термоупругой среды с произвольной симметрией формулируются уравнения Клапейрона – Клаузиуса, которые определяют выражения для производных температуры фазового перехода по начальному напряженному состоянию и ориентации поверхности. Эти уравнения позволяют провести исследование окрестности скачка в пространстве начальных параметров. Для случая начально-изотропного материала показывается, что нормаль к межфазной границе, совпадающая с одной из главных осей тензора конечной деформации исходной фазы, доставляет экстремум температуре фазового превращения при фиксированном деформированном состоянии исходной фазы. Подробно исследуется фазовый переход первого рода в линейном начально-изотропном термоупругом материале. Показывается, что малость деформаций каждой из фаз влечет за собой малость скачка, который испытывает поворот материальной частицы на фазовой границе. Обсуждается класс материалов, для которых при изменении деформации исходной фазы характер фазового перехода неизбежно меняется – происходит переход от нормального фазового перехода к аномальному.

Опыт показывает, что практически все материалы при интенсивных тепловых и механических нагрузках испытывают фазовые превращения. С позиций континуальной механики эти превращения могут трактоваться как проявление неоднозначности функций (функционалов) реакции материала и моделироваться как переход с одной ветви реакции на другую. При этом могут использоваться определяющие уравнения “нормального” материала каждой из фаз, в частности выпуклые термодинамические потенциалы. Альтернативный подход к изучению фазовых превращений опирается на предположение о существовании единого уравнения состояния, не обладающего свойством выпуклости в некотором диапазоне параметров состояния. Классическим примером служит уравнение Ван-дер-Ваальса [1]. Начиная с работы [2], невыпуклое уравнение состояния широко используется и в моделях фазовых превращений твердых тел. Основной недостаток таких уравнений – невозможность получить реальную информацию о поведении материала в точках, в которых нарушается условие Адамара [3], необходимое для корректности краевых задач.

Фазовый переход реализуется путем образования зародышей новой фазы. Если вследствие причин энергетического характера рост зародышей новой фазы ограничен мезоразмерами, малыми по сравнению с размером тела, то образуется смесь двух фаз с композиционной структурой материала, состоящего из “матрицы” исходной фазы, “армированной” рассеянны-

ми по объему тела включениями новой фазы. Помимо задачи об эффективных свойствах среды такого типа, традиционной для механики композитов, здесь на первый план выходит проблема феноменологического описания того, как текущая концентрация и пространственное распределение включений зависит от предыстории напряжений и термического состояния [4].

При неограниченном росте зародышей образуются макроскопические области, каждая из которых занята одной из фаз. Межфазная граница является поверхностью разрыва некоторых термодинамических потенциалов среды и их первых производных. В соответствии с общепринятой терминологией будем называть этот случай фазовым переходом первого рода и будем рассматривать только этот случай. Основные проблемы при изучении таких переходов – установление соотношений для скачков величин на межфазной границе и анализ устойчивости этой границы.

Для случая теплового и механического равновесия фаз идеальной жидкости (газа) эти разрывы хорошо изучены [1, 5]. Трудности моделирования фазовых превращений твердых тел связаны с тем, что состояние и реакция таких материалов составляют более сложный набор переменных, включающий тензоры деформаций и напряжений. Кроме того, фазы твердого тела в общем случае имеют разный тип анизотропии, что требует различных неискаженных конфигураций для формулировки определяющих уравнений фаз. Существенное различие связано также с характером диссипативных процессов в твердых телах. Для жидкостей в зонах больших градиентов течения основные диссипативные механизмы – вязкость и теплопроводность, которые приводят к уравнениям типа Навье – Стокса с бесконечно короткой памятью среды о прошлых состояниях. Для твердых тел главные диссипативные механизмы в зонах больших градиентов связаны с эффектами пластичности, которая характеризуется длительной или даже незатухающей памятью материала. Это различие приводит к тому, что на медленно движущихся поверхностях, разделяющих фазы жидкости, производство энтропии мало, а для твердых тел вклад сингулярных, сосредоточенных на межфазной поверхности источников энтропии может быть существенным. Об этом, в частности, свидетельствует явление гистерезиса фазовых превращений в твердых телах [6].

В феноменологической теории фазовых переходов в твердых телах, близких к состоянию теплового и механического равновесия, в последние десятилетия решен ряд проблем. К ним, в первую очередь, относится отказ от попыток определить для твердого тела скалярный химический потенциал и переход к тензорам химических потенциалов [7–14]. Для некоторых крайних условий исследована устойчивость движения рассматриваемых разрывов [8, 14]. Как и в теории ударных волн [15], важную роль играет кинетика фазового превращения [16–18], которая определяет, в частности, структуру и устойчивость сильного разрыва. Учет кинетики позволяет рассмотреть фазовый переход твердых тел с позиций более общих реологических соотношений, для которых реализуется не скачкообразная, а непрерывная термомеханическая история элемента материала, испытывающего превращение.

Исследование показывает, что тензорный характер химического потенциала и необратимый характер фазового перехода в термоупругом теле, который совершенно не учитывался в [19], существенно влияет на зависимость температуры фазового перехода от деформации исходной фазы и ориентации межфазной границы.

1. Кинематика тел с фазовыми превращениями. Рассмотрим кинематику термоупругого твердого тела, конечные деформации и произвольный нагрев которого сопровождаются фазовыми превращениями. Фазы предполагаются в общем случае анизотропными твердыми материалами с разными типами анизотропии. Будем использовать три конфигурации тела: $\kappa_0^{(n)}$ ($n = 1, 2$) – неискаженные отсчетные конфигурации тела в n -м фазовом состоянии, $\chi(t)$ – текущая конфигурация, которая либо полностью занята одной из фаз, либо в ней могут сосуществовать две фазы, разделенные межфазной поверхностью. Пусть для определенности конфигурации $\kappa_0^{(n)}$ являются естественными (ненапряженными) с одинаковой температурой $\theta_0 = \text{const}$. В n -м фазовом состоянии материал обладает группой симметрии $g_{\kappa_0}^{(n)} \in \mathfrak{o}$, где \mathfrak{o} – собственная ортогональная группа [3]. Иными словами, определяющие уравнения мате-

риала n -й фазы, записанные с помощью деформаций, отсчитываемых от начальной конфигурации $\kappa_0^{(n)}$, будут инвариантны относительно ортогональных преобразований, которые входят в группу $g_{\kappa_0^{(n)}}$.

Обозначим $\rho_{\kappa}^{(n)}(\theta_0) = \text{const}$ – плотность материала в конфигурациях $\kappa_0^{(n)}$, причем в общем случае $\rho_{\kappa}^{(1)} \neq \rho_{\kappa}^{(2)}$. Пусть $d\mathbf{x}$, $d\mathbf{X}^{(n)}$ – радиус-векторы, которые соединяют две бесконечно близкие частицы в конфигурациях $\chi(t)$ и $\kappa_0^{(n)}$ соответственно и связаны невырожденными преобразованиями

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} &= \mathbf{F}^{(1)} \cdot d\mathbf{X}^{(1)} = \mathbf{F}^{(2)} \cdot d\mathbf{X}^{(2)}, \quad \det \mathbf{F}^{(1)} > 0, \quad \det \mathbf{F}^{(2)} > 0 \\ d\mathbf{X}^{(1)} &= \mathbf{F}_0 \cdot d\mathbf{X}^{(2)}, \quad \det \mathbf{F}_0 > 0, \quad \mathbf{F}_0 = \mathbf{R}_0 \cdot \mathbf{U}_0 \end{aligned} \tag{1.1}$$

где $\mathbf{F}^{(n)}$ – градиент отображений $\kappa_0^{(n)} \rightarrow \chi(t)$, а \mathbf{F}_0 – градиент отображения $\kappa_0^{(2)} \rightarrow \kappa_0^{(1)}$, \mathbf{R}_0 – ортогональный, \mathbf{U}_0 – симметричный, положительно определенный тензор. Из соотношений (1.1) следует

$$\mathbf{F}^{(2)} = \mathbf{F}^{(1)} \cdot \mathbf{F}_0 \tag{1.2}$$

Тензор \mathbf{F}_0 является *кинематической характеристикой* фазового перехода в твердом теле [13], которая должна быть задана при построении модели фазовых превращений. В классической теории фазовых переходов [1, 5] аналог \mathbf{F}_0 – отношение плотностей материала (удельных объемов) фаз при заданном давлении и заданном термическом состоянии.

В конфигурациях $\kappa_0^{(n)}$ фазы материала различаются не только плотностью массы и типом анизотропии, но и плотностями свободной энергии и энтропии. Разность свободной энергии и разность энтропии фаз в конфигурациях $\kappa_0^{(n)}$ – *реологические характеристики* фазового перехода первого рода в твердых телах [13]. Эти характеристики, как и тензор \mathbf{F}_0 , зависят от температуры и напряжений в конфигурациях $\kappa_0^{(n)}$.

Возникает вопрос – каковы априорные ограничения, накладываемые на невырожденный тензор \mathbf{F}_0 ? Даже в простейшем случае, когда обе фазы – начально-изотропный материал, утверждение, что конфигурации $\kappa_0^{(1)}$ и $\kappa_0^{(2)}$ связаны преобразованием подобия ($\mathbf{U}_0 = \alpha \mathbf{I}$, $\alpha > 0$), является предположением, не следующим прямо из свойства начальной изотропии каждой из фаз материала. В случае анизотропии материала фаз ситуация еще более запутанная.

Будем исходить из гипотезы, что отображение $\kappa_0^{(2)} \rightarrow \kappa_0^{(1)}$ удовлетворяет условию

$$\det \mathbf{F}_0 = \rho_{\kappa}^{(2)} / \rho_{\kappa}^{(1)} \tag{1.3}$$

и соответствует минимуму плотности свободной энергии второй фазы $\psi^{(2)}(\mathbf{F}^{(2)}, \theta_0)$ в конфигурации $\kappa_0^{(1)}$, т.е. при $\mathbf{F}^{(2)} = \mathbf{F}_0$. Необходимое условие выполнения этой гипотезы

$$\left. \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}^{(2)}} \left(\psi^{(2)}(\mathbf{F}^{(2)}, \theta_0) - \beta \left(J(\mathbf{F}^{(2)}) - \frac{\rho_{\kappa}^{(2)}}{\rho_{\kappa}^{(1)}} \right) \right) \right|_{\mathbf{F}^{(2)} = \mathbf{F}_0} = 0 \tag{1.4}$$

где β – множитель Лагранжа, определяемый из ограничения (1.3) на деформацию \mathbf{F}_0 , величина $J^{(2)} = \det \mathbf{F}^{(2)}$. С учетом формул (\mathbf{T} – симметричный тензор напряжений Коши)

$$\rho_{\kappa}^{(2)} = \frac{\partial \Psi^{(2)}(\mathbf{F}^{(2)}, \theta)}{\partial \mathbf{F}^{(2)}} = J^{(2)} \mathbf{T}^{(2)} \cdot \mathbf{F}^{(2)-1T}, \quad \frac{\partial J^{(2)}}{\partial \mathbf{F}^{(2)}} = J^{(2)} \mathbf{F}^{(2)-1T}$$

из условия (1.4) следует, что тензор напряжений второй фазы в конфигурации $\kappa_0^{(1)}$ является шаровым

$$\mathbf{T}^{(2)}(\mathbf{F}_0, \theta_0) = \beta \rho_{\kappa}^{(2)} \mathbf{I}$$

Используя представление для тензора напряжений упругого материала с произвольным типом анизотропии

$$\mathbf{T}^{(2)}(\mathbf{F}_0, \theta_0) = \mathbf{R}_0 \cdot \mathbf{T}^+(\mathbf{U}_0, \theta_0) \cdot \mathbf{R}_0^T$$

которое необходимо для независимости определяющего уравнения от выбора системы отсчета [3], получаем

$$\mathbf{T}^+(\mathbf{U}_0, \theta_0) = \beta \rho_{\kappa}^{(2)} \mathbf{I} \quad (1.5)$$

Совместно с условием (1.3) соотношение (1.5) дает систему уравнений для определения \mathbf{U}_0 .

Шаровой тензор (1.5) является частным случаем напряженных состояний неискаженных конфигураций, порождаемых преобразованиями естественной (ненапряженной) конфигурации. Поэтому при условии, что $\mathbf{T}^+(\mathbf{U}_0, \theta_0)$ – взаимно однозначная функция тензора \mathbf{U}_0 , конфигурация $\kappa_0^{(1)}$ будет неискаженной и для второй фазы. Группа симметрии материала второй фазы в этой конфигурации

$$\hat{g}_{\kappa_0}^{(2)} = \mathbf{R}_0^T g_{\kappa_0}^{(2)} \mathbf{R}_0$$

является ортогонально сопряженной группе $g_{\kappa_0}^{(2)}$, а тензор \mathbf{U}_0 коммутирует с любым элементом $\mathbf{G} \in g_{\kappa_0}^{(2)}$ [3]. Примерами таких тензоров служат $\mathbf{U}_0 = a\mathbf{I} + b\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ для трансверсально-изотропного материала, $\mathbf{U}_0 = a\mathbf{k} \otimes \mathbf{k} + b\mathbf{m} \otimes \mathbf{m} + c\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ – для ортотропного материала. Здесь \mathbf{I} – единичный тензор, \mathbf{k} , \mathbf{m} , \mathbf{n} – взаимно ортогональные векторы, определяющие направление кристаллографических осей, скалярные параметры $a, b, c > 0$.

Следует заметить, что естественная конфигурация $\kappa_0^{(2)}$ может рассматриваться как конфигурация, которая получается из текущей конфигурации $\chi(t)$ разгрузкой каждого элемента тела в предположении, что все точки тела находятся во втором фазовом состоянии и при разгрузке фазовые превращения отсутствуют. Поскольку определенными уравнениями (1.3), (1.5) тензор $\mathbf{U}_0 = \text{const}$, конфигурация $\kappa_0^{(2)}$, как и $\kappa_0^{(1)}$, будет принадлежать евклидову трехмерному пространству. Подчеркнем, что полученный результат справедлив при однородной кинематической характеристике фазового перехода. Если же кинематическая характеристика \mathbf{U}_0 неоднородна по пространству и не удовлетворяет уравнению совместности [20, 21], то $\kappa_0^{(2)}$ будет неевклидовой.

Таким образом, кинематика фазовых превращений твердых тел обладает определенным сходством с кинематикой пластического течения. Кинематика материально-

го элемента, испытавшего конечную пластическую деформацию, представляет собой отображения, которые связывают между собой отсчетную, текущую и разгруженную конфигурации. Градиент отображения отсчетной конфигурации в текущую может быть представлен в виде композиции градиентов “упругого” и “пластического” отображений [21–23]. При неоднородной пластической деформации разгруженная конфигурация является в общем случае неевклидовой.

Основное различие кинематики фазовых превращений и кинематики пластического течения связано с тем, что пластическая деформация зависит от приложенных нагрузок и изменяется во времени, в то время как кинематическая характеристика фазового перехода неизменна. В этом плане кинематика фазовых превращений более проста по сравнению с кинематикой пластических деформаций.

Указанная аналогия еще более углубляется при учете кинетики фазовых превращений твердых тел, когда степень превращения переменна по пространству и времени, а кинематическая характеристика связана с предельным положением промежуточной конфигурации, соответствующей полному превращению элемента во второе фазовое состояние.

2. Соотношения на межфазной поверхности. В рамках предположений о близости процесса к равновесному сформулируем соотношения на поверхности сильного разрыва, разделяющего фазы материала. Два соотношения очевидны: непрерывность температуры

$$[\theta] = 0 \tag{2.1}$$

и непрерывность радиус-вектора \mathbf{x} , определяющего положение материальной частицы в текущей конфигурации $\chi(t)$ тела в момент времени t

$$[\mathbf{x}] = 0 \tag{2.2}$$

Условие (2.2) иногда рассматривается как определение когерентных фазовых переходов [8, 9]. Примером таких переходов служат процессы двойникования [24, 25] и некоторые переходы в кварце [26, 27]. Иногда рассматриваются модели некогерентных фазовых превращений [8], для которых предполагается непрерывность только нормальной составляющей скачка вектора \mathbf{x} . Если рассматривать не только равновесные, покоящиеся, но и движущиеся по частицам фазовые границы, то в рамках последовательной квазистатической модели такие переходы не могут реализоваться, так как скачок касательной составляющей скорости при таких переходах будет большим и, как следствие, будет велико влияние инерционных сил.

Для вывода остальных соотношений на сильном разрыве можно использовать интегральное соотношение [10, 13], записанное в материальных переменных $\mathbf{X} \equiv \mathbf{X}^{(1)} \in \kappa_0^{(1)}$

$$\frac{d}{dt} \int_{\kappa} \rho_{\kappa} \Phi_{\kappa} dV_{\kappa} = \oint_{\partial \kappa} \mathbf{n}_{\kappa} \cdot \Phi_{\kappa} dS_{\kappa} + \int_{\kappa} \rho_{\kappa} f dV_{\kappa} + \int_{S_0} \rho_{\kappa} c_{\kappa} \zeta dS_0 \tag{2.3}$$

Уравнение (2.3) включает уравнение равновесия, закон сохранения энергии, дивергентное уравнение совместности деформаций и скоростей [21, 28] и уравнение баланса энтропии. Учтено наличие в теле движущейся со скоростью c_{κ} поверхности сильного разрыва $S_0(t)$, на которой может производиться некоторый вклад в балансовое соотношение.

$$\Phi_{\kappa} = \begin{Bmatrix} 0 \\ u \\ \mathbf{F}^T \\ \eta \end{Bmatrix}, \quad \Phi_{\kappa} = \begin{Bmatrix} \mathbf{T}_{\kappa}^T \\ \mathbf{T}_{\kappa}^T \cdot \mathbf{v} - \mathbf{q}_{\kappa} \\ \mathbf{I} \otimes \mathbf{v} \\ -\mathbf{q}_{\kappa}/\theta \end{Bmatrix}, \quad f = \begin{Bmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + r \\ 0 \\ r/\theta \end{Bmatrix}, \quad \zeta = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \delta_* \end{Bmatrix} \tag{2.4}$$

где \mathbf{F} – градиент отображения $\kappa_0^{(1)} \rightarrow \chi(t)$, $J = \det \mathbf{F} > 0$, $\mathbf{T}_\kappa = \mathbf{J}\mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T}$ – несимметричный тензор напряжений Пиолы – Кирхгофа, u, η – плотности внутренней энергии и энтропии, $\mathbf{q}_\kappa = \mathbf{J}\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{q}$ – лагранжев вектор теплового потока, ζ – амплитуда сингулярных источников типа δ -функций с носителем на $S_0(t)$.

Совокупность предположений об амплитудах этих источников для системы законов сохранения является самостоятельной частью любой модели сплошной среды, допускающей разрывные решения [15]. Будем полагать, что на движущихся поверхностях сильных разрывов, разделяющих две фазы материала, как и в классической теории ударных волн, отсутствуют сингулярные источники массы, импульса, энергии. Отсутствие источников несовместности деформаций вытекает из соотношения (2.2). Что касается сингулярного источника энтропии δ_* , то его отсутствие на межфазной границе в твердом теле не очевидно. Более того, явление гистерезиса фазовых переходов в упругих твердых телах [6], не проявляющих заметных пластических (вязких) деформаций в объеме тела, свидетельствует скорее о наличии таких источников. Поэтому случай $\delta_* = 0$ будем называть обратимым фазовым превращением, для необратимого фазового перехода $\delta_* > 0$.

Из системы (2.3) следуют соотношения для скачков на межфазной границе (c_κ – скорость движения, \mathbf{n}_κ – нормаль)

$$\rho_\kappa c_\kappa [\varphi_\kappa] + \mathbf{n}_\kappa \cdot [\Phi_\kappa] + \rho_\kappa c_\kappa \zeta = 0$$

С учетом выражений (2.4) эти соотношения запишем в развернутом виде

$$[\mathbf{T}_\kappa] \cdot \mathbf{n}_\kappa = 0 \quad (2.5)$$

$$\rho_\kappa c_\kappa [u] + [\mathbf{v} \cdot \mathbf{T}_\kappa] \cdot \mathbf{n}_\kappa - [\mathbf{q}_\kappa] \cdot \mathbf{n}_\kappa = 0 \quad (2.6)$$

$$[\mathbf{F}] = \mathbf{h}_\kappa \otimes \mathbf{n}_\kappa, \quad \mathbf{h}_\kappa \equiv -[\mathbf{v}]/c_\kappa \quad (2.7)$$

$$\rho_\kappa c_\kappa [\theta\eta] - [\mathbf{q}_\kappa] \cdot \mathbf{n}_\kappa + \rho_\kappa c_\kappa \delta_* = 0 \quad (2.8)$$

Соотношение (2.5) – условие непрерывности вектора напряжений на межфазной границе. Соотношение (2.7) – следствие непрерывности вектора $\mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$ на межфазной границе и помимо диадной структуры тензора $[\mathbf{F}]$ указывает на отсутствие сингулярного источника несовместности деформаций и скоростей. При учете соотношения (2.1) из уравнений (2.6), (2.8) следует [13], что при фазовом превращении термоупругого материала скачок свободной энергии равен сумме плотности диссипации и работы вектора напряжений на сильном разрыве

$$[\psi] = \rho_\kappa^{-1} \mathbf{h}_\kappa \cdot \mathbf{T}_\kappa \cdot \mathbf{n}_\kappa + \delta_* \quad (2.9)$$

Соотношение (2.9) – аналог равенства химических потенциалов в классической теории [1, 5] равновесия фаз идеальной жидкости, но существенно отличается тем, что представляет собой условие непрерывности нормальных компонент лагранжева тензора химического потенциала [7–10]

$$\mathbf{n}_\kappa \cdot [\chi_\kappa] \cdot \mathbf{n}_\kappa = 0, \quad \chi_\kappa \equiv \rho_\kappa (\psi - \delta_*) \mathbf{I} - 1/2 (\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{T}_\kappa + \mathbf{T}_\kappa^T \cdot \mathbf{F}) \quad (2.10)$$

В эйлеровых переменных $\mathbf{x} \in \chi(t)$ соотношения для скачков величин на межфазной поверхности, движущейся со скоростью c относительно частиц среды и обладающей нормалью \mathbf{n} , имеют вид

$$[\rho c] = 0 \quad (2.11)$$

$$[\mathbf{T}] \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.12)$$

$$\rho c[u] + [\mathbf{v} \cdot \mathbf{T} - \mathbf{q}] \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.13)$$

$$[\mathbf{F}] = \mathbf{h} \otimes J^{-1} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{n}, \quad \mathbf{h} \equiv -\rho_\kappa [\mathbf{v}] / (\rho c) \quad (2.14)$$

$$\rho c[\theta\eta] - [\mathbf{q}] \cdot \mathbf{n} + \rho c \delta_* = 0 \quad (2.15)$$

Соотношение (2.11) – условие непрерывности потока массы. Равенство (2.12) – условие непрерывности вектора напряжений, записанное с помощью тензора напряжений Коши \mathbf{T} . Соотношение (2.14) – следствие уравнения совместности деформаций [21, 28] в эйлеровых переменных. Из соотношений (2.13) и (2.15) следует

$$[\psi] = \rho_\kappa^{-1} \mathbf{h} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} + \delta_* \quad (2.16)$$

или

$$\mathbf{n} \cdot [\boldsymbol{\chi}] \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \boldsymbol{\chi} \equiv (\psi - \delta_*) J^{-2} \mathbf{B} - \frac{1}{2\rho_\kappa J} (\mathbf{B} \cdot \mathbf{T} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{B}) \quad (2.17)$$

Здесь $\boldsymbol{\chi}$ – тензор *эйлерова химического потенциала*, связанный с лагранжевым тензором (2.10) простым соотношением $\boldsymbol{\chi} = J^{-2} \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\chi}_\kappa \cdot \mathbf{F}^T$.

Диссипация δ_* в выражениях (2.9), (2.10) и (2.16), (2.17) позволяет естественным образом описать *гистерезис* фазовых превращений упругих тел. Для иллюстрации рассмотрим в изотермическом приближении одномерный континуум – цилиндрический стержень. Материал стержня может находиться в двух фазовых состояниях. Различие упругих модулей материала фаз предполагается малым по сравнению с модулем упругости исходной фазы. Упругие потенциалы и связь напряжений с деформациями исходной и образующейся фазы задаются выражениями

$$\begin{aligned} u_1(e) &= \frac{1}{2} E e^2 = \frac{1}{2} \sigma^2 / E, \quad \sigma = E e \\ u_2(e) &= u_0 + \frac{1}{2} E (e - e_0)^2 = u_0 + \frac{1}{2} \sigma^2 / E, \quad \sigma = E(e - e_0), \quad e \geq e_0 \end{aligned} \quad (2.18)$$

Здесь σ – напряжение, e – деформация, $E > 0$ – модуль Юнга, u_0 – скрытая энергия фазового превращения, e_0 – кинематическая характеристика фазового перехода, равная деформации, при которой напряжения в материале второй фазы обращаются в нуль.

В рассматриваемой задаче условиями равновесия фаз служат условие (2.12) непрерывности напряжений и энергетическое условие (2.16), которые записываются в виде

$$\sigma_1 = \sigma_2, \quad u_2 - u_1 = \sigma_1(e_2 - e_1) - \delta_*$$

С учетом формул (2.18) эти соотношения дают систему двух уравнений относительно e_1 и e_2

$$e_2 - e_1 = e_0, \quad u_0 + \delta_* = \sigma_0 e_1, \quad \sigma_0 \equiv E e_0$$

Отсюда следует

$$e_1 = (u_0 + \delta_*) / \sigma_0, \quad e_2 = e_1 + e_0, \quad \sigma^{(12)} = (u_0 + \delta_*) / e_0 \quad (2.19)$$

где $\sigma^{(12)}$ – напряжение, при котором происходит прямой фазовый переход.

При обратном фазовом переходе, когда волна фазового превращения распространяется по второй фазе, имеем

$$\sigma_1 = \sigma_2, \quad u_2 - u_1 = \sigma_1(e_2 - e_1) + \delta_*$$

Отсюда с учетом выражений (2.18) находим, что напряжение $\sigma^{(21)}$, при котором происходит обратный фазовый переход, определяется уравнением

$$\sigma^{(21)} = (u_0 - \delta_*)/e_0 \quad (2.20)$$

Из формул (2.19), (2.20) видно, что величина сингулярного источника диссипации пропорциональна разности напряжений прямого и обратного фазового перехода

$$\sigma^{(12)} - \sigma^{(21)} = 2\delta_*/e_0 > 0.$$

3. Уравнения Клапейрона – Клаузиуса. Рассмотрим систему уравнений, составленную из условия (2.5) непрерывности вектора напряжений и условия (2.9) для скачка свободной энергии. С учетом представления (2.7) скачка $[\mathbf{F}]$ и условия (2.1) непрерывности температуры θ на межфазной поверхности эту систему можно записать в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_\kappa^{(2)}(\mathbf{F}^{(2)}, \theta) \cdot \mathbf{n}_\kappa - \mathbf{F}_\kappa(\mathbf{F}, \theta) \cdot \mathbf{n}_\kappa &= 0 \\ \psi^{(2)}(\mathbf{F}^{(2)}, \theta) - \psi(\mathbf{F}, \theta) &= \rho_\kappa^{-1} \mathbf{h}_\kappa \cdot \mathbf{T}_\kappa \cdot \mathbf{n}_\kappa + \delta_* \end{aligned} \quad (3.1)$$

Здесь и далее $\delta_* = \text{const}$, индекс первой фазы для краткости опущен. При заданных значениях \mathbf{F} и \mathbf{n}_κ соотношения (3.1) можно рассматривать как систему векторного и скалярного уравнений для определения вектора \mathbf{h}_κ и температуры θ . Отсюда следует, что

$$\theta = \theta(\mathbf{F}, \mathbf{n}_\kappa)$$

Это обстоятельство определяет существенное отличие переходов в твердом теле от фазовых переходов в идеальной жидкости, в которой температура плавления (испарения) зависит только от давления и определяется уравнением Клапейрона – Клаузиуса [1, 5]:

$$d\theta/dp = \theta[V]/Q_\phi \quad (3.2)$$

где $Q_\phi = \theta[\eta]$ – теплота фазового перехода, $[V]$ – скачок удельного объема $V = 1/\rho$.

Аналог уравнения (3.2), который определяет для термоупругого тела дифференциальные характеристики зависимости температуры фазового перехода от тензора \mathbf{F} при фиксированной нормали \mathbf{n}_κ к поверхности раздела фаз, имеет вид

$$\left\{ [\rho_\kappa \eta] + \mathbf{h}_\kappa \cdot \frac{\partial \mathbf{T}_\kappa}{\partial \theta} \cdot \mathbf{n}_\kappa \right\} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{F}} = [\mathbf{T}_\kappa] - \mathbf{h}_\kappa \cdot \frac{\partial \mathbf{T}_\kappa}{\partial \mathbf{F}} \cdot \mathbf{n}_\kappa \quad (3.3)$$

Для доказательства справедливости соотношения (3.3) продифференцируем по \mathbf{F} при $\mathbf{n}_\kappa = \text{const}$ второе из уравнений системы (3.1). Учитывая, что $\mathbf{h}_\kappa = \mathbf{h}_\kappa(\mathbf{F}, \mathbf{n}_\kappa)$, $\theta = \theta(\mathbf{F}, \mathbf{n}_\kappa)$, в результате получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi^{(2)}}{\partial F_{ij}^{(2)}} \frac{\partial F_{ij}^{(2)}}{\partial F_{ab}} + \frac{\partial \psi^{(2)}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial F_{ab}} - \frac{\partial \psi}{\partial F_{ab}} - \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial F_{ab}} &= \\ = \rho_\kappa^{-1} \frac{\partial h_{\kappa i}}{\partial F_{ab}} T_{\kappa ij} n_{\kappa j} + \rho_\kappa^{-1} h_{\kappa i} \left(\frac{\partial T_{\kappa ij}}{\partial F_{ab}} + \frac{\partial T_{\kappa ij}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial F_{ab}} \right) n_{\kappa j} \end{aligned}$$

Если теперь воспользоваться формулами, которые связывают тензор напряжений и энтропию со свободной энергией термоупругого материала

$$\rho_{\kappa} \frac{\partial \Psi^{(n)}(\mathbf{F}^{(n)}, \theta)}{\partial \mathbf{F}^{(n)}} = \mathbf{T}_{\kappa}^{(n)}, \quad \frac{\partial \Psi^{(n)}(\mathbf{F}^{(n)}, \theta)}{\partial \theta} = -\eta^{(n)} \quad (3.4)$$

принять во внимание условие (2.5) непрерывности вектора напряжения, а также следующее из (2.7) выражение

$$\frac{\partial F_{ij}^{(2)}}{\partial F_{ab}} = \delta_{ia} \delta_{jb} + n_{\kappa j} \frac{\partial h_{\kappa i}}{\partial F_{ab}}$$

придем к искомому уравнению (3.3).

Другое уравнение, которое является новым соотношением в теории фазовых превращений сплошной среды и определяет дифференциальную зависимость температуры фазового перехода от ориентации межфазной границы при фиксированной деформации исходной фазы, имеет вид

$$\left\{ \rho_{\kappa} [\eta] + \mathbf{h}_{\kappa} \cdot \frac{\partial \mathbf{T}_{\kappa}}{\partial \theta} \cdot \mathbf{n}_{\kappa} \right\} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}_{\kappa}} = \mathbf{h}_{\kappa} \cdot [\mathbf{T}_{\kappa}] \quad (3.5)$$

Из уравнения (3.5) видно, что производная $\partial \theta / \partial \mathbf{n}_{\kappa}$ ортогональна нормали \mathbf{n}_{κ} , так как в силу (2.5) величина $\mathbf{h}_{\kappa} \cdot [\mathbf{T}_{\kappa}] \cdot \mathbf{n}_{\kappa} = 0$.

Уравнения (3.3) и (3.5) справедливы для термоупругого материала с произвольным типом анизотропии.

Соотношение (3.5) получается дифференцированием по вектору \mathbf{n}_{κ} при фиксированном значении тензора \mathbf{F} второго из уравнений системы (3.1). С учетом формул (3.4) это дает

$$T_{\kappa ij}^{(2)} \frac{\partial F_{ij}^{(2)}}{\partial n_{\kappa a}} + [\rho_{\kappa} \eta] \frac{\partial \theta}{\partial n_{\kappa a}} = \frac{\partial h_{\kappa i}}{\partial n_{\kappa a}} T_{\kappa ij} n_{\kappa j} + h_{\kappa i} \frac{\partial T_{\kappa ij}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial n_{\kappa a}} n_{\kappa j} + h_{\kappa i} T_{\kappa ia}$$

Условие (2.5) непрерывности вектора напряжения и следующее из (2.7) равенство

$$\frac{\partial F_{ij}^{(2)}}{\partial n_{\kappa a}} = h_{\kappa i} \delta_{aj} + n_{\kappa a} \frac{\partial h_{\kappa i}}{\partial n_{\kappa a}}$$

приводят к рассматриваемому уравнению.

Рассмотрим термоупругий материал, обе фазы которого – начально-изотропный материал, для которого кинематическая характеристика фазового перехода \mathbf{U}_0 – шаровой тензор. Определяющие соотношения могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} \Psi^{(n)} &= \Psi^{(n)}(I_k(\mathbf{B}^{(n)}), \theta), \quad \eta^{(n)}(I_k(\mathbf{B}^{(n)}), \theta) = -\frac{\partial \Psi^{(n)}(I_k(\mathbf{B}^{(n)}), \theta)}{\partial \theta} \\ \mathbf{T}^{(n)}(\mathbf{B}^{(n)}, \theta) &= \rho^{(n)} \frac{\partial \Psi^{(n)}}{\partial \mathbf{F}^{(n)}} \cdot (\mathbf{F}^T)^{(n)} = \beta_0^{(n)} \mathbf{I} + \beta_1^{(n)} \mathbf{B}^{(n)} + \beta_2^{(n)} \mathbf{B}^{(n)} \cdot \mathbf{B}^{(n)} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Здесь $\beta_0, \beta_1, \beta_2$ – скалярные функции температуры θ и трех независимых инвариантов $I_k(\mathbf{B})$ тензора $\mathbf{B} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T$ в отличие от \mathbf{F} , не содержащего вращения материального элемента как жесткого целого.

Для рассматриваемой среды уравнение (3.3) сводится к симметричному тензорному уравнению для производной $\partial \theta / \partial \mathbf{B}$, а соотношение (3.5) трансформируется в уравнение для производной $\partial \theta / \partial \mathbf{n}$. Это утверждение становится очевидным, если вместо

системы (3.1) рассмотреть условие (2.12) непрерывности вектора напряжения и соотношение (2.16) для скачка энергии в эйлеровых переменных $\mathbf{x} \in \chi(t)$

$$\begin{aligned}\mathbf{T}^{(2)}(\mathbf{B}^{(2)}, \theta) \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{T}(\mathbf{B}, \theta) \cdot \mathbf{n} \\ \psi^{(2)}(\mathbf{B}^{(2)}, \theta) - \psi(\mathbf{B}, \theta) &= \rho_{\kappa}^{-1} \mathbf{h} \cdot \mathbf{T}(\mathbf{B}, \theta) \cdot \mathbf{n} + \delta_{*}\end{aligned}$$

Отсюда сразу следует, что температура фазового перехода $\theta = \theta(\mathbf{B}, \mathbf{n})$.

Для преобразования уравнений (3.3), (3.5) к эйлеровым переменным воспользуемся соотношениями, которые следуют из формул (2.7), (2.14):

$$\mathbf{F}^{(2)} = \mathbf{F} + \mathbf{h} \otimes J^{-1} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{n}, \quad \mathbf{h}_{\kappa} = (\rho c / (\rho_{\kappa} c_{\kappa})) \mathbf{h}, \quad \mathbf{n}_{\kappa} = (\rho_{\kappa} c_{\kappa} J / (\rho c)) J^{-1} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{n} \quad (3.7)$$

Используя эти соотношения и связь $\mathbf{T}_{\kappa} = J \mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T}$ тензоров напряжений Коши и Пиллы–Кирхгофа, уравнение (3.5) можно записать в виде

$$J \left\{ [\rho_{\kappa} \eta] + \mathbf{h} \cdot \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \theta} \cdot \mathbf{n} \right\} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{h} \cdot [J \mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T}] \cdot \mathbf{F}^T$$

Правую часть полученного уравнения с учетом формул (2.12) и (2.14) преобразуем следующим образом:

$$\begin{aligned}[J \mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T}] \cdot \mathbf{F}^T &= (J \mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T})^{(2)} \cdot (\mathbf{F}^T)^{(2)} - \\ &- (J \mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T})^{(2)} \cdot (J^{-1} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{n})^{(2)} \otimes \mathbf{h} - J \mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T} \cdot \mathbf{F}^T = [J \mathbf{T}] - \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} \otimes \mathbf{h}\end{aligned} \quad (3.8)$$

что окончательно дает

$$J \left\{ [\rho_{\kappa} \eta] + \mathbf{h} \cdot \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \theta} \cdot \mathbf{n} \right\} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}} = [J \mathbf{T}] \cdot \mathbf{h} - (\mathbf{h} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{h} \quad (3.9)$$

В случае, если обе фазы – жидкость, для которой

$$\mathbf{T} = -p(V, \theta) \mathbf{I}, \quad V = J / \rho_{\kappa} = 1 / \rho$$

производная $\partial \theta / \partial \mathbf{n}$ тождественно равна нулю.

Действительно, в этом случае правая часть равенства (3.9) при учете непрерывности давления на межфазной поверхности записывается в виде $p(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n} - [V]) \mathbf{h}$. Эта величина равна нулю, так как из соотношения (2.11) следует

$$[V] = [\rho^{-1}] = [c] / (\rho c) = -[\mathbf{v}] \cdot \mathbf{n} / (\rho c)$$

Принимая во внимание определение (2.14) вектора \mathbf{h} , получим

$$\mathbf{h} \cdot \mathbf{n} = \rho_{\kappa} [V] = [J] \quad (3.10)$$

Отсюда сразу следует искомое утверждение.

В случае, когда обе фазы являются твердыми, существует ориентация межфазной границы, которая доставляет экстремум температуре фазового превращения при фиксированном деформированном состоянии исходной фазы. Это экстремальное значение реализуется в случае, когда одна из главных осей тензора конечной деформации \mathbf{B} совпадает с нормалью \mathbf{n} к межфазной поверхности.

Действительно, пусть

$$\mathbf{B} = B_0 \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + B_{\alpha\beta} \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta, \quad \alpha, \beta = 1, 2 \quad (3.11)$$

где \mathbf{e}_α – орты главных осей тензора \mathbf{B} , которые лежат в плоскости, касательной к межфазной границе. В силу полиномиального представления (3.10) тензор напряжений Коши в начальнo-изотропной среде будет иметь такую же структуру

$$\mathbf{T} = T_0 \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + T_{\alpha\beta} \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta, \quad \alpha, \beta = 1, 2 \quad (3.12)$$

Из условия (2.12) непрерывности вектора напряжения следует, что

$$\mathbf{T}^{(2)} = T_0 \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + T_{\alpha\beta}^{(2)} \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta$$

Для материала со взаимно однозначным соответствием между тензорами $\mathbf{T}^{(2)}$ и $\mathbf{B}^{(2)}$ имеем

$$\mathbf{B}^{(2)} = B_0^{(2)} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + B_{\alpha\beta}^{(2)} \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta$$

Это означает, что

$$[\mathbf{B}] = [B_0] \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + [B_{\alpha\beta}] \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta \quad (3.13)$$

Обратимся теперь к первому соотношению (3.11), из которого для рассматриваемого деформированного состояния следует

$$[\mathbf{B}] = \mathbf{b} \otimes \mathbf{h} + \mathbf{h} \otimes \mathbf{b} + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{h} \otimes \mathbf{h}, \quad \mathbf{b} = \mathcal{J}^{-1} \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = b \mathbf{n}, \quad b = \mathcal{J}^{-1} B_0$$

Представляя вектор \mathbf{h} в виде суммы нормальной и касательной составляющих

$$\mathbf{h} = h_n \mathbf{n} + h_\alpha \mathbf{e}_\alpha, \quad h_n = \mathbf{h} \cdot \mathbf{n}, \quad h_\alpha = \mathbf{h} \cdot \mathbf{e}_\alpha, \quad \alpha = 1, 2$$

и подставляя в предыдущее соотношение, находим

$$[\mathbf{B}] = b h_n (2 + b h_n) \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + b (1 + b h_n) h_\alpha (\mathbf{n} \otimes \mathbf{e}_\alpha + \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{n}) + b^2 h_\alpha h_\beta \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta$$

Сопоставление этой формулы с соотношением (3.13) показывает, что $\mathbf{h} = h_n \mathbf{n}$. Отсюда при учете соотношения (3.10) следует $[B_{\alpha\beta}] = 0$, т.е. все компоненты тензора \mathbf{B} , за исключением нормальной компоненты B_0 , непрерывны на межфазной границе. Подчеркнем, что непрерывность компонент $B_{\alpha\beta}$ выполняется для состояния (3.11), в общем случае такая непрерывность отсутствует.

Подстановка вектора $\mathbf{h} = h_n \mathbf{n}$ в соотношение (3.9) приводит к равенству нулю производной $\partial\theta/\partial\mathbf{n}$, что соответствует экстремуму температуры фазового перехода при деформированном состоянии (3.11).

Если одна из фаз – жидкость, то унимодулярным преобразованием отсчетной конфигурации можно привести тензор деформации к виду (3.11). Это означает, что при фазовом переходе “твердое тело – жидкость” без ограничения общности можно считать, что $\mathbf{h} = h_n \mathbf{n}$, что приводит к условию $\partial\theta/\partial\mathbf{n} = 0$. Отсюда немедленно следует, что температура фазового перехода не зависит от ориентации межфазной границы, если одна из фаз упругого начально-изотропного материала является жидкостью. Это утверждение в некоторой степени оправдывает применимость классической теории к описанию плавления (испарения) твердых тел и показывает, что учет твердотельных эффектов не меняет кардинально картину этого процесса.

Уравнение, которое определяет зависимость температуры фазового превращения от тензора конечной деформации исходной фазы, имеет вид

$$2 \left\{ [\rho_\kappa \eta] + \mathbf{h} \cdot \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \theta} \cdot \mathbf{n} \right\} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{B}} \cdot \mathbf{B} = (\mathbf{I} + \mathbf{n} \otimes \mathcal{J}^{-1} \mathbf{h}) \cdot ([\mathcal{J} \mathbf{T}] - (\mathbf{h} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{I}) + \\ + \{ \mathbf{n} \otimes \mathbf{h} \cdot \mathbf{T} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} \otimes \mathbf{h} \} - 2(\mathbf{n} \otimes \mathbf{h}) : \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} \quad (3.14)$$

где $\mathbf{L} = \partial \mathbf{T} / \partial \mathbf{B}$ – тензор упругих коэффициентов четвертого ранга.

Для вывода этого уравнения обратимся к уравнению (3.3). Используя соотношения (3.6) и связь $\mathbf{T}_\kappa = \mathbf{J}\mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T}$ между тензорами напряжений, получим после подстановки в уравнение (3.3)

$$\left\{ [\rho_\kappa \eta] + \mathbf{h} \cdot \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \theta} \cdot \mathbf{n} \right\} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{F}} \Big|_{n_\kappa} = [\mathbf{J}\mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T}] - J^{-1} \mathbf{h} \otimes \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{n} : \frac{\partial (\mathbf{J}\mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T})}{\partial \mathbf{F}} \quad (3.15)$$

Производная температуры фазового перехода по тензору \mathbf{F} при фиксированной нормали \mathbf{n}_κ равна

$$\frac{\partial \theta (\mathbf{B}, \mathbf{n}(\mathbf{F}, \mathbf{n}_\kappa))}{\partial F_{ab}} \Big|_{n_\kappa} = \frac{\partial \theta}{\partial B_{ij}} \Big|_n \frac{\partial B_{ij}}{\partial F_{ab}} + \frac{\partial \theta}{\partial n_i} \Big|_B \frac{\partial n_i}{\partial F_{ab}} = 2 \frac{\partial \theta}{\partial B_{aj}} \Big|_n F_{jb} - n_a \frac{\partial \theta}{\partial n_i} \Big|_B F_{ib}^{-1T}$$

При выводе здесь использована формула $\partial F_{is}^{-1T} / \partial F_{ab} = -F_{ib}^{-1T} F_{as}^{-1T}$, которая получается дифференцированием по F_{ab} тождества $F_{si}^{-1} F_{ik} = \delta_{sk}$. Подстановка этого соотношения в (3.15) приводит к уравнению

$$2 \left\{ [\rho_\kappa \eta] + \mathbf{h} \cdot \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \theta} \cdot \mathbf{n} \right\} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{B}} \Big|_n \cdot \mathbf{F} = (\mathbf{I} + \mathbf{n} \otimes J^{-1} \mathbf{h}) [\mathbf{J}\mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T}] - (\mathbf{h} \otimes J^{-1} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{n}) : \frac{\partial (\mathbf{J}\mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T})}{\partial \mathbf{F}}$$

Раскрывая производную в последнем слагаемом с учетом формул

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{F}} = J \mathbf{F}^{-1T}, \quad \frac{\partial F_{is}^{-1T}}{\partial F_{ab}} = -F_{ib}^{-1T} F_{as}^{-1T}, \quad \frac{\partial T_{ik}}{\partial F_{ab}} = 2 \frac{\partial T_{ik}}{\partial B_{am}} F_{mb}$$

и умножая уравнение скалярно справа на \mathbf{F}^T , получаем

$$\begin{aligned} & 2 \left\{ [\rho_\kappa \eta] + \mathbf{h} \cdot \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \theta} \cdot \mathbf{n} \right\} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{B}} \cdot \mathbf{B} = \\ & = (\mathbf{I} + \mathbf{n} \otimes J^{-1} \mathbf{h}) \cdot [\mathbf{J}\mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-1T}] \cdot \mathbf{F}^T - (\mathbf{h} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{I} + \mathbf{n} \otimes J^{-1} \mathbf{h} \cdot \mathbf{T} + 2(\mathbf{h} \otimes \mathbf{n}) : \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} \end{aligned}$$

Используя формулу (3.8) и приводя подобные члены, приходим к искомому уравнению (3.14).

Для деформированного состояния (3.11), при котором отсутствуют сдвиговые деформации (касательные напряжения) на межфазной границе, уравнение (3.14) может быть приведено к двум более простым соотношениям

$$\left([\eta] + [V] \frac{\partial T_0}{\partial \theta} \right) \frac{\partial \theta}{\partial B_0} = -[V] \frac{\partial T_0}{\partial B_0} \quad (3.16)$$

$$\left([\eta] + [V] \frac{\partial T_0}{\partial \theta} \right) \frac{\partial \theta}{\partial B_{\alpha\beta}} = \frac{1}{2} [V(T_{\alpha\gamma} - T_0 \delta_{\alpha\gamma})] B_{\gamma\beta}^{-1} - [V] \beta_{IJ} B_0^I B_{\alpha\beta}^J \quad (3.17)$$

Для случая, когда одна из фаз – жидкость, формула (3.16) была получена ранее [8].

Для вывода соотношений (3.16), (3.17), заметим, что в силу формул (3.12), (3.13)

$$[\mathbf{J}\mathbf{T}] = [J] T_0 \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + [J T_{\alpha\beta}] \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta, \quad \mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \alpha, \beta = 1, 2$$

Учитывая, что для рассматриваемой деформации $\mathbf{h} = [J] \mathbf{n}$, находим $\mathbf{h} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = [J] T_0$. Отсюда следует, что первое слагаемое в правой части равенства (3.14) равно

$$[J(T_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta} T_0)] \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta, \quad \alpha, \beta = 1, 2$$

а второе слагаемое в силу формулы (3.11) и коллинеарности векторов \mathbf{h} и \mathbf{n} обращается в нуль. Последнее слагаемое равно

$$-2[J]\{(\beta_1 + 2\beta_2 B_0 + \beta_{AB} B_0^{A+B})\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \beta_{AB} B_0^A B_{\alpha\beta}^B \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta\} \cdot \mathbf{B}, \quad A, B = 0, 1, 2$$

где

$$\beta_{A0} = \left(\frac{\partial}{\partial I_1} + I_1 \frac{\partial}{\partial I_2} + I_2 \frac{\partial}{\partial I_3}\right)\beta_A, \quad \beta_{A1} = -\left(\frac{\partial}{\partial I_2} + I_1 \frac{\partial}{\partial I_3}\right)\beta_A, \quad \beta_{A2} = \frac{\partial \beta_A}{\partial I_3}$$

Эти выражения можно получить дифференцированием полиномиального представления (3.6) тензора напряжений Коши с учетом определения главных инвариантов $I_k(\mathbf{B})$ и теоремы Гамильтона – Кэли

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{B}} &= \mathbf{B}^A \otimes \frac{\partial \beta_A}{\partial \mathbf{B}} + \beta_1 \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial \mathbf{B}} + \beta_2 \frac{\partial(\mathbf{B}\mathbf{B})}{\partial \mathbf{B}} = \\ &= \beta_{AB} \mathbf{B}^A \otimes \mathbf{B}^B + \beta_1 \mathbf{1} + \beta_2 (\mathbf{I} \otimes \mathbf{B}^{(1342)} + \mathbf{I} \otimes \mathbf{B}^{(1432)} + \mathbf{I} \otimes \mathbf{B}^{(2413)} + \mathbf{I} \otimes \mathbf{B}^{(2314)}) \end{aligned}$$

где $\mathbf{1} = \frac{1}{2}(\delta_{ia}\delta_{jb} + \delta_{ib}\delta_{ja})\mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \otimes \mathbf{e}^a \otimes \mathbf{e}^b$ – единичный тензор четвертого ранга, а $\mathbf{I} \otimes \mathbf{B}^{(1342)} = \delta_{ia} B_{bj} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \otimes \mathbf{e}^a \otimes \mathbf{e}^b$ – изомер тензора $\mathbf{I} \otimes \mathbf{B}$. Поскольку величина $(\beta_1 + 2\beta_2 B_0 + \beta_{AB} B_0^{A+B})$ равна $\partial T_0 / \partial B_0$, соотношения (3.16), (3.17) доказаны.

4. Линейный начально-изотропный термоупругий материал. Рассмотрим в качестве иллюстрации, имеющей самостоятельное значение, фазовый переход 1 рода в линейном начально-изотропном термоупругом твердом материале. В качестве начальной конфигурации к каждой из фаз будем использовать конфигурацию с одинаковой температурой θ_0 и одинаковой плотностью ρ_κ . Начальное состояние первой фазы будем считать естественным (ненапряженным), вторая фаза в конфигурации к характеризуется начальным напряжением $\mathbf{T} = -p_0 \mathbf{I}$. Деформации каждой из фаз, отсчитываемые от конфигурации κ , полагаются малыми. Сингулярный источник энтропии считается постоянным. Плотность свободной энергии каждой из фаз принимается в виде

$$\begin{aligned} \rho_\kappa \Psi^{(n)} &= \rho_\kappa \Psi_\kappa^{(n)} - \rho_\kappa \eta_\kappa^{(n)} \vartheta - p_\kappa^{(n)} I_1^{(n)} + \\ &+ \frac{1}{2} \lambda^{(n)} (I_1^{(n)})^2 + \mu^{(n)} (\mathbf{e} : \mathbf{e})^{(n)} - \alpha^{(n)} I_1^{(n)} \vartheta - \frac{1}{2\theta_0} c^{(n)} \vartheta^2 \end{aligned} \quad (4.1)$$

где $n = 1, 2$ – номер фазы, \mathbf{e} – тензор малой деформации, $I_1 = \mathbf{I} : \mathbf{e}$, $\vartheta = \theta - \theta_0$, $\vartheta/\theta_0 \ll 1$, а коэффициенты $\Psi_\kappa^{(n)}$, $p_\kappa^{(n)}$, $\eta_\kappa^{(n)}$, $c^{(n)}$, $\alpha^{(n)}$, $\lambda^{(n)}$, $\mu^{(n)}$ – функции температуры θ_0 . Плотность энтропии и тензор напряжений в таком материале записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho_\kappa \eta^{(n)} &= \rho_\kappa \eta_\kappa^{(n)} + \alpha^{(n)} I_1^{(n)} + c^{(n)} \vartheta / \theta_0 \\ \mathbf{T}^{(n)} &= (\lambda^{(n)} I_1^{(n)} - p_\kappa^{(n)} - \alpha^{(n)} \vartheta) \mathbf{I} + 2\mu^{(n)} \mathbf{e}^{(n)} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Отсюда видно, что $\lambda^{(n)}$, $\mu^{(n)}$ – коэффициенты Ламе, $\alpha^{(n)}$ – коэффициент теплового расширения, $c^{(n)}$ – теплоемкость, а величины $\Psi_\kappa^{(n)}$, $\eta_\kappa^{(n)}$ характеризуют свободную энергию и энтропию фаз в начальных состояниях. Будем полагать, что

$$\Psi_\kappa^{(1)} = 0, \quad \Psi_\kappa^{(2)} = \Psi_0, \quad \eta_\kappa^{(1)} = 0, \quad \eta_\kappa^{(2)} = \eta_0$$

Как уже указывалось, величины $p_{\kappa}^{(1)} = 0$, $p_{\kappa}^{(2)} = p_0$. Из соотношений (4.2) следует, что приближение малых деформаций, отсчитываемых от конфигурации κ , справедливо, если начальное давление p_0 мало по сравнению с модулями упругости.

Предположение о малости деформаций каждой из фаз влечет за собой малость скачка, который испытывает поворот материальной частицы на фазовой границе.

Действительно, пусть тензор \mathbf{F} имеет вид

$$\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{I} + \mathbf{e}_{\kappa})$$

где \mathbf{e}_{κ} – тензор малой деформации, имеющий порядок δ , где $\delta \ll 1$ – малый параметр, а \mathbf{R} – ортогональный тензор конечного поворота. Тогда с точностью до членов $O(\delta^2)$ величина

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{I} + 2\mathbf{e}_{\kappa}) \cdot \mathbf{R}^T = 2\mathbf{e} + \mathbf{I}$$

где $\mathbf{e} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{e}_{\kappa} \cdot \mathbf{R}^T$ – тензор деформации, который, как и \mathbf{e}_{κ} , имеет порядок δ . Используя формулу $[ab] = a[b] + [a]b + [a][b]$ и соотношение (2.14), получаем

$$\begin{aligned} 2[\mathbf{e}] &= [\mathbf{F}] \cdot \mathbf{F}^T + \mathbf{F} \cdot [\mathbf{F}^T] + [\mathbf{F}] \cdot [\mathbf{F}^T] = \\ &= J^{-1} \mathbf{h} \otimes \mathbf{n} \cdot \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T + J^{-1} \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{n} + J^{-2} (\mathbf{h} \otimes \mathbf{h}) \mathbf{n} \cdot \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{n} \end{aligned}$$

Учитывая, что $J = \det \mathbf{F} = 1 + I_1(\mathbf{e}) + O(\delta^2)$ и $\mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T = 2\mathbf{e} - \mathbf{I}$, полученное соотношение можно привести к виду

$$\begin{aligned} 2[\mathbf{e}] &= \{2\mathbf{h} \otimes \mathbf{e} \cdot \mathbf{n} + 2\mathbf{e} \cdot \mathbf{n} \otimes \mathbf{h} + 2(\mathbf{n} \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{h} \otimes \mathbf{h}\} + \\ &+ I_1(\mathbf{h} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{h} + 2\mathbf{h} \otimes \mathbf{h}) - (\mathbf{h} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{h} + \mathbf{h} \otimes \mathbf{h}) + O(\delta^2) \end{aligned}$$

Так как левая часть и первые два слагаемые в правой части имеют порядок δ , то третье слагаемое в правой части должно иметь тот же порядок, т.е.

$$\mathbf{h} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{h} + \mathbf{h} \otimes \mathbf{h} = O(\delta)$$

Отсюда следуют соотношения

$$\mathbf{h} + (\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + (\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{h} = O(\delta), \quad 2(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) + (\mathbf{h} \cdot \mathbf{n})^2 = O(\delta)$$

Второе уравнение имеет решения $(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) = O(\delta)$ и $(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) = -2 + O(\delta)$. Подстановка $(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) = O(\delta)$ в первое уравнение приводит к величине $\mathbf{h} = O(\delta)$, которая соответствует малому скачку поворота материального элемента на фазовой границе. Решение $(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) = -2 + O(\delta)$ описывает конечный скачок поворота. Однако это решение неприемлемо, так как из формулы $[J^{-1} \mathbf{F}^T] \cdot \mathbf{n} = 0$, которая получается из тождества Пиолы $\nabla \cdot (J^{-1} \mathbf{F}) = 0$, при учете соотношения $J = 1 + O(\delta)$ следует $[\mathbf{F}^T] \cdot \mathbf{n} = O(\delta)$. Отсюда получаем $(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{n} = O(\delta)$. Вектор $\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{n}$ не равен тождественно нулю, так как в противном случае существовало бы нетривиальное решение однородной невырожденной линейной системы $\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{n} = 0$, $\det \mathbf{F} \neq 0$. Это означает, что $(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) = O(\delta)$.

Заметим, что полученный результат справедлив для материала с произвольным типом симметрии. Его можно применить к процессу перекристаллизации, который представляет собой частный случай фазового перехода анизотропных тел, когда исходная и образующаяся фаза – один и тот же материал. Элементы материала при переходе через межфазную поверхность испытывают деформацию и поворот, приводящий к изменению пространственной ориентации осей анизотропии. Поскольку малость деформаций влечет за собой малость поворотов, то можно утверждать, что перекристаллизация – сугубо нелинейное явление, которое с необходимостью сопровождается конечной деформацией.

С учетом доказанных соотношений скачок тензора напряжений запишем в виде

$$[\mathbf{T}] = \{\lambda^{(2)}(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) + \Lambda \sigma_0\} \mathbf{I} + \mu^{(2)}(\mathbf{h} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{h}) + 2\mu_* \Lambda \mathbf{e}$$

$$\lambda_* = [\lambda]/\Lambda, \quad \mu_* = [\mu]/\Lambda, \quad p_* = p_0/\Lambda, \quad \alpha_* = [\alpha]/\Lambda \quad (4.3)$$

$$\Lambda = \lambda^{(2)} + 2\mu^{(2)}, \quad \sigma_0 = \lambda_* I_1 - p_* - \alpha_* \vartheta$$

Из формулы (4.3) и условия $[\mathbf{T}] \cdot \mathbf{n} = 0$ следует связь между векторами \mathbf{n} , \mathbf{h} и $\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}$

$$\mu^{(2)} \mathbf{h} + \{\lambda^{(2)} + \mu^{(2)}\}(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) + \Lambda \sigma_0 \mathbf{n} + 2\mu_* \Lambda \mathbf{e} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (4.4)$$

Отсюда

$$\mathbf{h} = -(\sigma_0 + 2\mu_* \mathbf{n} \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} - 2\mu_* l \mathbf{m}$$

$$l = \Lambda/\mu^{(2)}, \quad \mathbf{m} = \{\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}\} \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{n}, \quad \mathbf{m} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (4.5)$$

где \mathbf{m} – касательная к межфазной границе составляющая вектора $\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}$. Из соотношений (4.5) следует

$$\mathbf{h} \cdot \mathbf{h} = (\sigma_0 + 2\mu_* \mathbf{n} \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{n})^2 + 4\mu_*^2 l^2 \mathbf{m} \cdot \mathbf{m} = (\sigma_0 + 2\mu_* \mathbf{n} \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{n})^2 + 4\mu_*^2 l^2 ((\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}) \times \mathbf{n})^2$$

$$\mathbf{m} \cdot \mathbf{m} = (\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}) \cdot \{\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}\}^2 \cdot (\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}) = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}^2 \cdot \mathbf{n}) - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{n})^2 = ((\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}) \times \mathbf{n})^2 \quad (4.6)$$

Обратимся теперь к соотношению (2.16), которое может быть записано в виде

$$[\rho_\kappa \Psi] = \mathbf{h} \cdot \mathbf{T}^{(2)} \cdot \mathbf{n} + \rho_\kappa \delta_* \quad (4.7)$$

С учетом соотношений

$$[I_1^2] = 2I_1^{(2)} \mathbf{h} \cdot \mathbf{n} - (\mathbf{h} \cdot \mathbf{n})^2, \quad [\mathbf{e} : \mathbf{e}] = 2(\mathbf{h} \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{n}) + 1/2((\mathbf{h} \cdot \mathbf{h}) + (\mathbf{h} \cdot \mathbf{n})^2)$$

$$p_0 I_1^{(2)} = p_0 I_1 + p_0 (\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}), \quad 1/2[\lambda I_1^2] = \lambda^{(2)} I_1^{(2)} (\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) - 1/2 \lambda^{(2)} (\mathbf{h} \cdot \mathbf{n})^2 + 1/2 [\lambda] I_1^2$$

$$[\mu \mathbf{e} : \mathbf{e}] = 2\mu^{(2)} (\mathbf{h} \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{n}) + 1/2 \mu^{(2)} (\mathbf{h} \cdot \mathbf{h}) + 1/2 \mu^{(2)} (\mathbf{h} \cdot \mathbf{n})^2 + [\mu] \mathbf{e} : \mathbf{e}$$

$$[\alpha I_1] \vartheta = \alpha^{(2)} \vartheta (\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) + [\alpha] I_1 \vartheta$$

и формул (4.3), (4.5), (4.6) равенство (4.7) приводим к виду

$$\Psi_* - \eta_* \bar{\vartheta} - p_* I_1 + \frac{1}{2} \lambda_* I_1^2 + \mu_* \mathbf{e} : \mathbf{e} - \alpha_* I_1 \bar{\vartheta} - \frac{1}{2} c_* \bar{\vartheta}^2 = \frac{1}{2} (\mathbf{h} \cdot \mathbf{n})^2 + 2\mu_*^2 l (\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}) \quad (4.8)$$

$$\bar{\vartheta} \equiv \vartheta/\theta_0, \quad \Psi_* \equiv \rho_\kappa (\Psi_0 - \delta_*)/\Lambda, \quad \eta_* \equiv \rho_\kappa \eta_0 \theta_0/\Lambda, \quad c_* \equiv [c] \theta_0/\Lambda$$

Из уравнения (4.8) при учете выражения (4.5) для вектора \mathbf{h} следует, что в случае, когда безразмерный скачок энтропии $\eta_* = O(1)$, температура фазового перехода

$$\bar{\vartheta} = \Psi_*/\eta_* + O(\delta^2) \quad (4.9)$$

т.е. определяется только энергетическими характеристиками фазового перехода Ψ_* , η_* и диссипацией δ_* , сопровождающей изменение структуры материала. Учет членов $O(\delta^2)$ в рассматриваемом приближении не имеет смысла, поскольку уравнения (4.2) записаны с точностью до членов первого порядка малости.

В случае $\eta_* = O(\delta)$ температура фазового перехода существенно зависит от тензора деформации исходной фазы и ориентации нормали к межфазной границе относительно главных осей тензора \mathbf{e} . Прежде чем исследовать эту зависимость, заметим, что различие термоупругих коэффициентов фаз материала, вообще говоря, может быть достаточно большим [29]. Поэтому рассмотрим случай, когда

$$\lambda_* = O(1), \quad \mu_* = O(1), \quad \alpha_* = O(1), \quad c_* = O(1), \quad p_* = O(\delta)$$

Уравнение для производной температуры фазового перехода по вектору нормали в этом приближении записывается в виде

$$M\Lambda\bar{\partial}\bar{\vartheta}/\partial\mathbf{n} = [\mathbf{T}] \cdot \mathbf{h}, \quad M \equiv \eta_* + \alpha_* I_1 + c_* \bar{\vartheta} + \alpha_* (\mathbf{h} \cdot \mathbf{n})$$

Принимая во внимание выражения (4.3), (4.5) и учитывая непрерывность вектора напряжений, полученное соотношение можно преобразовать к виду

$$M\bar{\partial}\bar{\vartheta}/\partial\mathbf{n} = -4\mu_*(\sigma_0 + 2\mu_*e_0)\mathbf{m} - 4\mu_*^2 l(\mathbf{e} \cdot \mathbf{m} - e_0\mathbf{m} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{m})\mathbf{n}) \quad (4.10)$$

Нормаль, совпадающая с главной осью тензора малой деформации исходной фазы

$$\mathbf{e} = e_0\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + e_{\alpha\beta}\mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta \quad (4.11)$$

доставляет экстремум температуре фазового превращения, поскольку при этой деформации вектор $\mathbf{m} = 0$ и, следовательно, $\bar{\partial}\bar{\vartheta}/\partial\mathbf{n} = 0$. Вид экстремума определяется матрицей $\partial^2\bar{\vartheta}/\partial\mathbf{n} \otimes \partial\mathbf{n} = 0$ при деформации (4.11).

С учетом выражений (4.3), (4.5) уравнение для производной температуры фазового перехода по тензору деформации запишем в виде

$$M\Lambda\bar{\partial}\bar{\vartheta}/\partial\mathbf{e} = [\mathbf{T}] - \mathbf{h} \cdot (\partial\mathbf{T}/\partial\mathbf{e}) \cdot \mathbf{n} \quad (4.12)$$

Из уравнения (4.12) следует, что при объемной деформации исходной фазы характер фазового превращения в линейном термоупругом твердом материале с реологической характеристикой $\eta_* = O(\delta)$ неизбежно меняется, т.е. нормальный (аномальный) фазовый переход сменяется аномальным (нормальным) превращением.

Действительно, при фиксированной нормали и постоянной интенсивности сдвиговой деформации $I_2 = (\mathbf{e}' : \mathbf{e}')^{1/2} = \text{const}$, где $\mathbf{e}' = \mathbf{e} - 1/3I_1\mathbf{I}$ – девиатор тензора деформации, производная температуры фазового перехода по первому инварианту равна

$$M\bar{\partial}\bar{\vartheta}/\partial I_1 = (1 - K_*)(K_*I_1 - p_* - \alpha_*\bar{\vartheta}) - 2\mu_*K_*\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}' \cdot \mathbf{n}, \quad K_* = \lambda_* + 2\mu_*/3 \quad (4.13)$$

Правая часть соотношения (4.13) обращается в нуль, если нормальная к фазовой границе компонента тензора деформации связана с двумя другими диагональными компонентами соотношением

$$K_*(e_{11} + e_{22} + e_{33}) - p_* - \alpha_*\bar{\vartheta}(\mathbf{e}, \mathbf{n}) = \frac{2\mu_*K_*}{1 - K_*} \left(\frac{2}{3}e_{11} - \frac{1}{3}(e_{22} + e_{33}) \right)$$

Такой тензор деформации доставляет экстремум по I_1 температуре фазового превращения. При $\alpha_* = O(\delta)$ эта связь с точностью до членов первого порядка малости может быть выписана в явном виде

$$e_{11} = \frac{p_*}{K_*} \frac{1 - K_*}{1 - \Lambda_*} - \frac{1 - \lambda_*}{1 - \Lambda_*} (e_{22} + e_{33}), \quad \Lambda_* = \lambda_* + 2\mu_* \quad (4.14)$$

В случае всестороннего растяжения (сжатия), когда девиатор \mathbf{e}' равен нулю, это соотношение становится особенно простым и имеет вид

$$e_{11} = e_{22} = e_{33} = p_*/(3K_*)$$

В общем случае деформации, которые доставляют экстремум температуре фазового превращения, определяются решением системы, состоящей из уравнения (4.14) и условия $\mathbf{e}' : \mathbf{e}' = \text{const}$ постоянной интенсивности сдвиговой деформации.

Как и в случае идеальной жидкости, будем говорить, что фазовый переход является *нормальным*, если увеличение объемной деформации приводит к понижению температуры фазового перехода ($\partial\vartheta/\partial I_1 < 0$). В противном случае фазовое превращение является *аномальным*, снижение температуры фазового перехода ($\partial\vartheta/\partial I_1 > 0$) в таком материале происходит при деформации сжатия. Существование указанного экстремума означает, что при достаточно больших изменениях объемной деформации исходной фазы характер превращения в рассматриваемом материале обязательно меняется, происходит переход от нормального фазового перехода к аномальному (или наоборот). Это имеет место при условии, что фазовый переход сопровождается изменением модулей упругости, сопоставимым с величиной самих модулей, а скачок энтропии мал в указанном выше смысле. Существование указанного эффекта обусловлено чисто твердотельными свойствами материала – наличием девиатора напряжений и его влиянием на энергию равновесного состояния среды.

Автор благодарит В.Н. Кукуджанова и В.Е. Фортова за обсуждение результатов работы.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (03-05-64643) и Минобразования РФ, Программа “Университеты России” (УР.04.01.027).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.5. Статистическая физика. М.: Наука, 1964. 567с.
2. Ericksen J.L. Equilibrium of bars // J. Elasticity. 1975. V.5. № 3/4. P. 191–201.
3. Truesdell C. A First Course in Rational Continuum Mechanics. Baltimore: J. Hopkins Univ., 1972 = Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. М.: Мир, 1975. 592с.
4. Levitas V.I. Structural changes without stable intermediate state in inelastic material. P.I. General thermomechanical and kinetic approaches // Intern. J. Plasticity. 2000. V.16. № 7/8. P. 805–849.
5. Gibbs J.W. Collected Works. V.1. Thermodynamics. N.Y., etc.: Longman, Green, 1928 = Гиббс Дж.В. Термодинамика. Статистическая механика. М.: Наука, 1982. 564с.
6. Лихачев В.А., Кузьмин С.Л., Каменцева З.П. Эффект памяти формы. Л.: Изд-во ЛГУ, 1987. 216с.
7. Bowen R.M. Toward a thermodynamics and mechanics of mixtures // Arch. Rat. Mech. Anal. 1967. V.24. № 5. P. 370–403.
8. Гринфельд М.А. Методы механики сплошных сред в теории фазовых превращений. М.: Наука, 1990. 312с.
9. Трускиновский Л.М. О тензоре химического потенциала // Геохимия. 1983. № 12. С.1730–1744.
10. Кондауров В.И., Никитин Л.В. Исследование фазовых переходов первого рода в нелинейно-упругих средах // Изв. АН СССР. МТТ. 1983. № 6. С.49–55.

11. Арутюнян Н.Х., Дроздов А.Д. Нарращивание стареющих вязкоупругих тел в условиях фазового перехода // Изв. АН СССР. МТТ. 1985. № 6. С.136–144.
12. Метлов В.В., Турусов Р.А. О формировании напряженного состояния вязкоупругих тел, растущих в условиях фронтального отверждения // Изв. АН СССР. МТТ. 1985, № 6. С. 145–160.
13. Кондауров В.И., Никитин Л.В. Фазовые переходы первого рода в упруговязкопластической среде // Изв. АН СССР. МТТ. 1986, № 4. С. 130–139.
14. Морозов Н.Ф., Назыров И.Р., Фрейдлин А.Б. Одномерная задача о фазовом превращении упругого шара // Докл. РАН. 1996. Т. 346. № 2. С. 188–191.
15. Куликовский А.Г., Свешникова Е.И. Нелинейные волны в упругих средах. М.: Моск. лицей, 1998. 412с.
16. Knowles J. K. Stress-induced phase transitions in elastic solids // Comput. Mech. 1999. V.62. № 6. P. 429–436.
17. Gurtin M.E. The dynamics of solid phase transitions 1. Coherent interfaces // Arch. Rat. Mech. Anal. 1993. V. 129. P. 305–335.
18. Ngan S.-C., Truskinovsky L. Thermal trapping and kinetics of martensitic phase boundaries // J. Mech. and Phys. Solids. 1999. V. 47. P. 141–172.
19. Князева А.Г. Обобщения уравнения Клапейрона – Клаузиуса в связной термомеханической модели // ПМТФ. 1999. Т. 40. № 6. С. 103 – 111.
20. Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. М.: Изд-во иностр. лит., 1963. 247с.
21. Кондауров В.И., Никитин Л.В. Теоретические основы реологии геоматериалов. М.: Наука, 1990. 206с.
22. Седов Л. И. Механика сплошной среды. Т. 2. М.: Наука, 1970. 568с.
23. Lee E.H. Elastic-plastic deformation at finite strain // Trans. ASME. J. Appl. Mech. 1969. V. 36. № 1. P. 1–6.
24. Cristian J.W. The theory of transformation in Metals and Alloys. Oxford etc.: Pergamon Press, 1975 = Кристиан Дж. Теория превращения в металлах и сплавах. Т. 1. М.: Мир, 1978. 806с.
25. Ройтбурд А.Л. Теория формирования гетерофазной структуры при фазовых превращениях в твердом состоянии // Успехи физ. наук. 1974. Т. 113. № 1. С. 69–104.
26. Robin P.Y.F. Thermodynamic equilibrium across a coherent interface in a stressed crystal // Amer. Mineralogist. 1974. V. 59. № 11–12. P. 1286–1298.
27. Coe R.S. The thermodynamic effect of shear stress on the orthoclino inversion in enstatite and other coherent phase transition characterized by finite simple shear // Contribs. Mineral and Petrol. 1970. V. 26. № 3. P. 247–262.
28. Кондауров В.И. О законах сохранения и симметризации уравнений нелинейной термоупругости // Докл. АН СССР. 1981. Т. 256. № 4. С. 819–823.
29. Физические величины: Справочник / Под ред. И.С. Григорьева и Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232с.