

Вихідні рівняння континуально-термодинамічної моделі бінарного розчину з врахуванням в'язкості

Анатолій Жаліло¹, Петро Пелех², Євген Чапля³

¹ к. ф.-м. н., с. н. с., Відділення математики НАН України, вул. Володимирська, 54, Київ, Україна, 06100, e-mail: vmat@nas.gov.ua

² аспірант, Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Наукова, 3б, Львів, Україна, 79060, e-mail: ppetro@mail.lviv.ua

³ д. ф.-м. н., с. н. с., Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, Україна, 79005, e-mail: chaplia@cmm.lviv.ua; Інститут механіки середовища і прикладної інформатики Бидгощської академії ім. Казіміра Великого, вул. Хоткевича, 30, Бидгощ, Польща, 85064, e-mail: czapla@ab.edu.pl

З використанням континуальних уявлень механіки суцільного середовища методами термодинаміки нерівноважних процесів отримані вихідні співвідношення моделі бінарного твердого розчину для опису процесів теплопровідності, дифузії та в'язкості. Записана ключова система рівнянь моделі за різних варіантів вибору незалежних параметрів стану з використанням термодинамічних потенціалів вільної енергії Гельмгольца і Гіббса.

Ключові слова: математичне моделювання, бінарні системи, дифузія, теплопровідність, в'язкість.

Вступ. Процеси деградації функціональних властивостей напівпровідникових наноструктур, які використовуються в сучасній мікроелектроніці, зазвичай, пов'язують із зумовленою дифузійними процесами зміною локального компонентного складу системи [1, 2]. Оскільки виготовлення й експлуатація таких структур відбувається за підвищених температур, у деяких випадках близьких до температури плавлення, то процеси дифузії призводять також до релаксації зсувних складових механічних напружень.

Фізико-математичне моделювання взаємозв'язаних процесів деформування, тепло- і масоперенесення, як правило, базується на континуальних уявленнях механіки суцільного середовища [3-5] та методах термодинаміки нерівноважних процесів [6-8]. Конкретні моделі механіки твердих розчинів були запропоновані в роботах [9-13]. Зокрема в [13] для опису релаксації девіатора тензора напружень унаслідок процесу дифузії введено нові термодинамічні параметри локального стану тіла — тензори густини і хімічного потенціалу. Опис процесів гетеродифузії домішкової речовини в тілах з мікроструктурою та огляд літератури, присвяченій цій проблемі, наведено в роботі [14]. Загальні проблеми математичного моделювання термов'язкопружних процесів у твердих тілах розглянуті у працях [15, 16]. Фізико-математичні моделі цих процесів для рідин і рідких розчинів запропоновані в роботі [17].

У даній роботі з використанням континуально-термодинамічного підходу отримано вихідні співвідношення моделі механіки бінарного розчину для опису у взаємозв'язку процесів перенесення тепла і маси з врахуванням релаксації зсувних напружень. При цьому процеси релаксації пов'язуються з в'язкими властивостями тіла. Ключова система рівнянь моделі записується для різних характерних виборів незалежних макроскопічних параметрів локального стану тіла.

1. Вихідні кінематичні та термодинамічні співвідношення для бінарного розчину

Бінарний розчин трактуємо як просторово розподілену неоднорідну нерівноважну двокомпонентну термодинамічну систему, вкладену в обмежену область евклідового простору, який віднесений до декартової системи координат. Кожній компоненті системи ставимо у відповідність континуум \mathbf{K}_i ($i = 1, 2$), а системі в цілому — континуум центрів мас \mathbf{K} . Нерівноважні процеси будемо описувати з використанням кінематичних характеристик континууму \mathbf{K} . При цьому під дифузією розуміємо рух точок континуумів \mathbf{K}_i ($i = 1, 2$) відносно континууму \mathbf{K} .

Закони руху матеріальних точок континуумів \mathbf{K}_i ($i = 1, 2$) і \mathbf{K} трактуємо як взаємно однозначне відображення їхніх точок з області вихідної конфігурації, у якій вони перебувають у початковий момент часу ($\tau = 0$), в область актуальної конфігурації, що відповідає часу τ , тобто

$$\vec{r}_i = \vec{r}_i(\vec{r}_0, \tau), \quad (i = 1, 2); \quad \vec{r} = \vec{r}(\vec{r}_0, \tau), \quad (1)$$

де \vec{r}_i ($i = 1, 2$) і \vec{r} — радіус-вектори матеріальних точок цих континуумів у момент часу τ , \vec{r}_0 — їх радіус-вектор у момент часу $\tau = 0$.

Швидкості точок відповідних континуумів означимо похідними

$$\vec{v}_i = \frac{\partial \vec{r}_i(\vec{r}_0, \tau)}{\partial \tau} \quad (i = 1, 2); \quad \vec{v} = \frac{\partial \vec{r}(\vec{r}_0, \tau)}{\partial \tau}. \quad (2)$$

При цьому умова “індивідуалізації” матеріальних точок прийнята так, щоб $\vec{r}_i(\vec{r}_0, 0) = \vec{r}_0$ і $\vec{r}(\vec{r}_0, 0) = \vec{r}_0$, тобто “мітками” точок є величини $x_0^\alpha \equiv \xi^\alpha$ ($\alpha = \overline{1, 3}$), де x_0^α — координати радіус-вектора \vec{r}_0 вибраної точки [4].

Ці швидкості, використовуючи взаємну однозначність законів руху (1), можуть бути подані як функції точок простору $\vec{v}_i = \vec{v}_i(\vec{r}, \tau)$ і $\vec{v} = \vec{v}(\vec{r}, \tau)$, для яких виконуються співвідношення

$$\vec{v} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^2 \rho_i \vec{v}_i, \quad \rho = \sum_{i=1}^2 \rho_i, \quad (3)$$

де ρ_i ($i = 1, 2$) і ρ — об'ємні густини компонент і сумарна густина.

Під деформацією системи в цілому будемо розуміти деформацію континууму \mathbf{K} . Коваріантні компоненти тензора деформації цього континууму запишемо у вигляді

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (g_{\alpha\beta} - g_{\alpha\beta}^0). \quad (4)$$

Тут коваріантні компоненти $g_{\alpha\beta}$ і $g_{\alpha\beta}^0$ метричного тензора \hat{g} у моменті часу τ і $\tau = 0$ означені формулами

$$g_{\alpha\beta} = \vec{i}_\alpha \cdot \vec{i}_\beta, \quad g_{\alpha\beta}^0 = g_{\alpha\beta}|_{\tau=0} = \vec{i}_\alpha^0 \cdot \vec{i}_\beta^0 = \delta_{\alpha\beta}, \quad (5)$$

де $\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера, а \vec{i}_α — базисні вектори супутньої лагранжевої системи координат, тобто

$$\vec{i}_\alpha = \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi^\alpha}, \quad \vec{i}_\alpha^0 \equiv \vec{i}_\alpha|_{\tau=0}, \quad (\alpha, \beta = \overline{1,3}). \quad (6)$$

Крапкою між величинами, тут і надалі, позначено скалярний добуток.

За макроскопічного опису неоднорідної нерівноважної системи, зазвичай, приймається гіпотеза локальної термодинамічної рівноваги [8] і стан фізично малого елемента такої системи визначається значеннями спряжених термодинамічних параметрів, які відповідають умовам термодинамічної рівноваги цього елемента [18, 19]. Виберемо за такі параметри

$$T \div s, \quad P \div v, \quad \mu'_i \div C_i, \quad (i = 1, 2), \quad (7)$$

де T — абсолютна температура, s — масова густина ентропії, P — тиск, $v = 1/\rho$ — питомий об'єм, μ'_i — хімічний потенціал і $C_i = \rho_i/\rho$ — масова концентрація компоненти i .

Зміна параметрів, що відповідають екстенсивним величинам, задовольняє рівняння Гіббса й Ейлера [18, 19]. Враховуючи, що $C_1 + C_2 = 1$, для бінарного розчину запишемо ці рівняння у вигляді

$$du = Tds - Pdv + \mu dC, \quad u = Ts - Pv + \mu C + \mu'_1, \quad (8)$$

де u — масова густина внутрішньої енергії, а $C \equiv C_2$ — концентрація домішкової речовини, $\mu \equiv \mu'_2 - \mu'_1$ — відносний хімічний потенціал.

З допомогою перетворення Лежандра [19] введемо у розгляд масову густину вільної енергії Гельмгольца $f = u - Ts$, яка згідно (8) задовольняє таким рівнянням Гіббса та Ейлера

$$df = -sdT - Pdv + \mu dC, \quad f = -Pv + \mu C + \mu'_1. \quad (9)$$

Якщо $f = f(T, v, C)$, то з співвідношень (9) отримаємо загальний вигляд рівнянь стану

$$s = -\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_{v,C}, \quad P = -\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_{T,C}, \quad \mu = \left(\frac{\partial f}{\partial C}\right)_{T,v}, \quad (10)$$

де нижні індекси вказують на параметри, які приймаємо постійними.

Нехай у вихідній конфігурації ($\tau = 0$) параметри локального стану системи (7) набувають значень

$$T_0 \div s_0, \quad P_0 \div v_0, \quad \mu_0 \div C_0, \quad (11)$$

а відхилення температури $\delta T = T - T_0$, питомого об'єму $\delta v = v - v_0$ і концентрації $\delta C = C - C_0$ від цих значень справджують умови малості

$$\delta T / T_0 \ll 1, \quad \delta v / v \ll 1, \quad \delta C \ll 1. \quad (12)$$

Розкладемо функцію $f(T, v, C)$ у степеневий ряд за відхиленнями незалежних змінних від їх значень у початковому стані (11). Тоді, обмежуючись квадратичними складовими та використовуючи вирази загальних рівнянь стану (10), отримаємо такі лінійні рівняння стану

$$\begin{aligned} \delta s &= \frac{c_v}{T_0} \delta T - \alpha_T P_0 \delta v - d_T \delta C, \\ \delta P &= -\alpha_T P_0 \delta T + \alpha_v v_0 \delta v + d_v \delta C, \\ \delta \mu &= d_T \delta T + d_v \delta v - d_C \delta C, \end{aligned} \quad (13)$$

де $\delta s = s - s_0$, $\delta P = P - P_0$ і $\delta \mu = \mu - \mu_0$ — зміни ентропії, тиску і хімічного потенціалу; c_v — коефіцієнт питомої теплоємності середовища за сталого об'єму, $\alpha_T = -1/P_0 (\partial P / \partial T)_0$ — коефіцієнт температурної залежності тиску, $d_T = (\partial \mu / \partial T)_0$ — коефіцієнт температурної залежності хімічного потенціалу, $\alpha_v = 1/v_0 (\partial v / \partial T)_0$ — коефіцієнт температурної залежності питомої густини, $d_v = (\partial \mu / \partial v)_0$ — коефіцієнт залежності хімічного потенціалу від питомої густини, $d_C = (\partial \mu / \partial C)_0$ — коефіцієнт концентраційної залежності хімічного потенціалу домішкової компоненти. Індексом „0” позначено значення величин у початковому стані (11).

Часто за незалежні параметри стану зручно вибрати величини T, P і C . Для цих величин термодинамічним потенціалом є вільна енергія Гіббса

$g = u - Ts + Pv$. Якщо прийmemo, що $g = g(T, P, C)$, то аналогічним чином отримаємо такі лінійні рівняння стану

$$\begin{aligned} \delta s &= \frac{c_p}{T_0} \delta T + \alpha_v v_0 \delta P - d_T \delta C, \\ \delta v &= -\alpha_v v_0 \delta T + v_0 \alpha_p \delta P + d_p \delta C, \\ \delta \mu &= \mu - \mu_0 = d_T \delta T + d_p \delta P - d_C \delta C, \end{aligned} \quad (14)$$

де коефіцієнти $c_p, \alpha_v, d_T, \alpha_p, d_p$ і d_C є характеристиками матеріалу.

Рівняння (14) і (15) описують взаємозв'язок параметрів локального термодинамічного стану системи в лінійному наближенні. При цьому, характеристики матеріалу системи можуть залежати від координат.

2. Балансові рівняння моделі

Балансові рівняння є наслідком законів збереження маси, повної енергії та рівняння балансу імпульсу.

Закон збереження маси у диференціальній формі (без врахування хімічних реакцій чи фазових перетворень компонент) запишемо у вигляді

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0, \quad \frac{\partial \rho_i}{\partial \tau} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_i \vec{v}_i) = 0, \quad i = 1, 2, \quad (15)$$

де $\vec{\nabla}$ — оператор Гамільтона.

Останнє рівняння для об'ємних густин ρ_i можна записати з використанням масових концентрацій компонент

$$\rho \frac{dC}{d\tau} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}, \quad (C_1 = 1 - C, C_2 \equiv C), \quad (16)$$

де $\vec{J} \equiv \vec{J}_2 = \rho_2 (\vec{v}_2 - \vec{v})$ — дифузійний потік другої компоненти (домішки),

$d/d\tau = \partial/\partial\tau + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}$ — оператор повної похідної за часом.

Рівняння балансу імпульсу формулюємо для термодинамічної системи в цілому і записуємо з використанням кінематичних характеристик континууму центрів мас

$$\rho \frac{d\vec{v}}{d\tau} = \vec{\nabla} \cdot \hat{\sigma} + \vec{F}_m, \quad (17)$$

де $\hat{\sigma} = \sigma^{\alpha\beta} \vec{i}_\alpha \otimes \vec{i}_\beta$ — тензор напружень Коші ($\alpha, \beta = \overline{1,3}$) [3, 4], $\sigma^{\alpha\beta}$ — його контраваріантні компоненти; $\vec{F}_m = \rho_1 \vec{F}'_1 + \rho_2 \vec{F}'_2$ — масова сила, \vec{F}'_i — масові

потенціальні ($\vec{F}'_i = -\vec{\nabla}\psi'_i$) і консервативні ($\partial\psi'_i/\partial\tau = 0$) сили, ψ'_i — потенціал цих сил ($i = 1, 2$). Символом „ \otimes ” позначено тензорний добуток (діада). За грецькими індексами, що повторюються, тут і надалі, розуміється підсумовування.

З рівнянь збереження маси (15) і балансу імпульсу (17) випливають такі рівняння балансу потенціальної і кінетичної енергії для системи в цілому

$$\rho \frac{d\psi}{d\tau} + \vec{\nabla} \cdot (\psi \vec{J}) + \vec{J} \cdot \vec{F} + \vec{v} \cdot \vec{F}_m = 0, \quad (18)$$

$$\rho \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\vec{v}^2}{2} \right) = \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \cdot \hat{\sigma}) - \hat{\sigma} : \vec{\nabla} \otimes \vec{v} + \vec{v} \cdot \vec{F}_m, \quad (19)$$

де $\rho\psi = \rho_1\psi'_1 + \rho_2\psi'_2$ — об'ємна густина потенціальної енергії системи, $\vec{F} = \vec{F}'_2 - \vec{F}'_1 = -\vec{\nabla}\psi$ — відносна масова сила, $\psi = \psi'_2 - \psi'_1$ — її потенціал.

Рівняння балансу внутрішньої енергії u отримаємо з закону збереження повної енергії, який приймемо у вигляді

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial\tau} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_\varepsilon = 0, \quad (20)$$

де ε — масова густина повної енергії, для якої маємо

$$\rho\varepsilon = \rho\psi + \rho \frac{\vec{v}^2}{2} + \rho u, \quad (21)$$

а \vec{J}_ε — потік повної енергії, який задається виразом

$$\vec{J}_\varepsilon = \rho\varepsilon\vec{v} - \hat{\sigma} \cdot \vec{v} + (\psi + \mu)\vec{J} + \vec{J}_Q, \quad (22)$$

\vec{J}_Q — потік енергії у вигляді тепла.

Враховуючи в рівняннях (20)-(22) вирази (18) і (19), знайдемо рівняння балансу внутрішньої енергії

$$\rho \frac{du}{d\tau} - \hat{\sigma} : \vec{\nabla} \otimes \vec{v} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q + \vec{J} \cdot \vec{\nabla}(\psi + \mu) + \mu \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0. \quad (23)$$

Щоб отримати рівняння балансу ентропії s запишемо рівняння Гіббса (8) для внутрішньої енергії u у субстанціональній формі [6]

$$\rho \frac{du}{d\tau} = T\rho \frac{ds}{d\tau} - P\rho \frac{dv}{d\tau} + \mu\rho \frac{dC}{d\tau}. \quad (24)$$

Зазначимо, що рівняння (24) може бути отримане з рівняння балансу внутрішньої енергії (23) шляхом граничного переходу до квазістатичних змін стану системи [14].

Співставляючи рівняння (23) і (24) та використовуючи закони збереження маси (15) для питомого об'єму v і масових концентрації (16), знайдемо

$$\rho \frac{ds}{d\tau} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \sigma_s, \quad (25)$$

де $\vec{J}_s = \vec{J}_Q/T$ — потік ентропії, σ_s — виробництво ентропії

$$\sigma_s = \frac{1}{T} (\vec{J}_Q \cdot \vec{X}_Q + \vec{J} \cdot \vec{X}_m) + \frac{\sigma_m}{T}, \quad (26)$$

$\vec{X}_Q = -\vec{\nabla}T/T$ — термодинамічна сила, спряжена до потоку тепла \vec{J}_Q ,
 $\vec{X}_m = -\vec{\nabla}(\psi + \mu)$ — термодинамічна сила, спряжена до потоку маси \vec{J} , σ_m — джерело ентропії, зумовлене протіканням механічних процесів

$$\sigma_m = \hat{\sigma} : \vec{\nabla} \otimes \vec{v} + P \vec{\nabla} \cdot \vec{v}. \quad (27)$$

Зазначимо, що з другого закону термодинаміки випливає нерівність для виробництва ентропії $\sigma_s \geq 0$.

Для конкретизації виразу (27) введемо у розгляд тензор механічного тиску $\hat{P} = -\hat{\sigma}$ і скористаємось його поданням у вигляді рівноважної $P\hat{I}$ та нерівноважної \hat{P}^v частин, тобто

$$\hat{P} = P\hat{I} + \hat{P}^v, \quad (28)$$

де тензор \hat{P}^v називають тензором в'язких напружень, \hat{I} — одиничний тензор.

Тоді, враховуючи вираз (28) у формулі (27), для виробництва ентропії, пов'язаного з механічними процесами, отримаємо

$$\sigma_m = -\hat{P}^v : \vec{\nabla} \otimes \vec{v}. \quad (29)$$

Скористаємось розкладами

$$\hat{P}^v = P^v \cdot \hat{I} + \hat{P}^{vs} + \hat{P}^{va},$$

$$\vec{\nabla} \otimes \vec{v} = \frac{1}{3} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \cdot \hat{I} + (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^s + (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^a, \quad (30)$$

де $P^v = \hat{P}^{vs} : \hat{I}$ — в'язкий тиск, \hat{P}^{vs} і \hat{P}^{va} — симетрична й антисиметрична частини тензора \hat{P}^v ; $(\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^s$ і $(\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^a$ — симетрична й антисиметрична частини тензора $\vec{\nabla} \otimes \vec{v}$.

Приймаючи тензор в'язких напружень симетричним ($\hat{P}^{va} = 0$), для виробництва ентропії σ_m знайдемо

$$\sigma_m = -P^v \vec{\nabla} \cdot \vec{v} - \hat{P}^{vs} : (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^s. \quad (31)$$

Виходячи з отриманого виразу, означимо термодинамічні сили $X_v = -\vec{\nabla} \cdot \vec{v}$ і $\hat{X}^{vs} = -(\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^s$. Ці сили спряжені до в'язкого тиску P^v і тензора \hat{P}^{vs} , які трактуються як термодинамічні потоки.

Отримані вирази для виробництва ентропії (26) і (31) є основою для формулювання кінетичних рівнянь — залежностей між термодинамічними потоками і силами.

3. Кінетичні співвідношення

Приймаємо, що термодинамічні потоки є функціями термодинамічних сил. Для ізотропних середовищ, що розглядаються, справедливий принцип Кюрі [6-8], відповідно до якого функціонально пов'язаними є лише потоки і сили однієї тензорної природи, тобто

$$\vec{J}_Q = \vec{J}_Q(\vec{X}_Q, \vec{X}_m), \quad \vec{J} = \vec{J}(\vec{X}_Q, \vec{X}_m), \quad P^v = P^v(X_v), \quad \hat{P}^{vs} = \hat{P}^{vs}(\hat{X}^{vs}),$$

а також виконуються умови взаємності

$$\vec{i}^\alpha \otimes \frac{\partial \vec{J}_Q}{\partial X_m^\alpha} = \vec{i}^\alpha \otimes \frac{\partial \vec{J}}{\partial X_Q^\alpha}, \quad (\alpha = \overline{1,3}). \quad (32)$$

За цих умов існує [14] кінетичний потенціал $\Phi(\vec{X}_Q, \vec{X}_m, X_v, \hat{X}^{vs})$, диференціал якого

$$d\Phi = \vec{J}_Q \cdot d\vec{X}_Q + \vec{J} \cdot d\vec{X}_m + P^v dX_v + \hat{P} : d\hat{X}^{vs}, \quad (33)$$

і кінетичні рівняння можна записати у вигляді

$$\vec{J}_Q = \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{X}_Q}, \quad \vec{J} = \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{X}_m}, \quad P^v = \frac{\partial \Phi}{\partial X_v}, \quad \hat{P} = \frac{\partial \Phi}{\partial \hat{X}^{vs}}, \quad (34)$$

де $\partial \Phi / \partial \vec{X}_k \equiv \vec{i}^\alpha \partial \Phi / \partial X_k^\alpha$, $k = \{Q, m\}$; $\partial \Phi / \partial \hat{X}^{vs} \equiv \vec{i}^\alpha \otimes \vec{i}^\beta \partial \Phi / \partial X_{vs}^{\alpha\beta}$, $\alpha, \beta = \overline{1,3}$.

У вихідному стані (11) термодинамічні сили \vec{X}_Q , \vec{X}_m , X_v , \hat{X}^{vs} і потоки \vec{J}_Q , \vec{J} , P^v , \hat{P}^{vs} дорівнюють нулю, тобто

$$\vec{X}_Q = \vec{X}_m = X_v = \hat{X}^{vs} = 0 \quad \text{і} \quad \vec{J}_Q = \vec{J} = P^v = \hat{P}^{vs} = 0. \quad (35)$$

Тоді, за малих відхилень від положення локальної рівноваги, розкладаючи функцію $\Phi(\vec{X}_Q, \vec{X}_m, X_v, \hat{X}^{vs})$ в ряд за незалежними змінними до квадратичних складових включно і підставляючи цей розклад у формули (34) та враховуючи початкові умови (35), отримаємо лінійні кінетичні рівняння у вигляді

$$\begin{aligned} \vec{J}_Q &= L_{QQ}\vec{X}_Q + L_{Qm}\vec{X}_m, & \vec{J} &= L_{mQ}\vec{X}_Q + L_{mm}\vec{X}_m, \\ P^v &= \lambda X_v, & \hat{P}^{vs} &= \hat{L} : \hat{X}^{vs}, \end{aligned} \quad (36)$$

де $L_{QQ}, L_{Qm}, L_{mQ}, L_{mm}, \lambda, \hat{L}$ — кінетичні коефіцієнти, які в загальному випадку можуть бути функціями параметрів стану.

При цьому з принципу Кюрі випливає, що $L_{Qm} = L_{mQ}$, а з нерівності $\sigma_s \geq 0$, що відповідає другому закону термодинаміки, маємо $L_{QQ} \geq 0, L_{mm} \geq 0, \lambda \geq 0, L_{QQ}L_{mm} \geq (L_{Qm} + L_{mQ})^2/4$. Аналогічні співвідношення отримуються для компонент тензора четвертого рангу \hat{L} .

4. Ключова система рівнянь моделі

Запишемо рівняння моделі для двох варіантів вибору розв'язуючих функцій ρ, C, \vec{v}, T та P, C, \vec{v}, T .

Із закону збереження маси (15) і (16), рівняння балансу імпульсу (17) і ентропії (25), використовуючи кінетичні співвідношення (36) для термодинамічних потоків, вирази для термодинамічних сил $\vec{X}_Q, \vec{X}_m, X_v, \hat{X}^{vs}$ та рівняння стану (13), у разі вибору за розв'язуючі функції ρ, C, \vec{v}, T знайдемо

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{d\tau} &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{v}, & \rho \frac{dC}{d\tau} &= \vec{\nabla} \cdot [\bar{D}_T \vec{\nabla} T + \bar{D}_C \vec{\nabla} C + \bar{D}_\rho \vec{\nabla} \rho] + \vec{\nabla} \cdot (L_{mm} \vec{\nabla} \psi), \\ \rho \frac{d\vec{v}}{d\tau} &= -\frac{v_0 \alpha_v}{\rho^2} \vec{\nabla} \rho - \alpha_T P_0 \vec{\nabla} T + d_v \vec{\nabla} C + \vec{\nabla} (\lambda \vec{\nabla} \cdot \vec{v}) + \\ &+ \vec{\nabla} \cdot [\Theta (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^s] - \rho C \vec{\nabla} \psi + \rho \vec{F}_1, \\ \frac{C_v}{T_0} \rho \frac{dT}{d\tau} &+ \frac{\alpha_T P_0}{\rho} \frac{d\rho}{d\tau} - d_T \rho \frac{dC}{d\tau} = \\ &= \vec{\nabla} \cdot (\chi \vec{\nabla} T) + \vec{\nabla} \cdot (\chi_C \vec{\nabla} C) + \vec{\nabla} \cdot (\chi_\rho \vec{\nabla} \rho) + \vec{\nabla} \cdot (\chi_\psi \vec{\nabla} \psi) + \frac{q_{nc}}{T}, \end{aligned} \quad (37)$$

де $\bar{D}_T, \bar{D}_C, \bar{D}_p$ — кінетичні коефіцієнти дифузії, а $\chi, \chi_C, \chi_p, \chi_\psi$ — коефіцієнти теплопровідності, які визначаються через кінетичні коефіцієнти співвідношень (36) і коефіцієнти рівнянь стану (13); Θ — кінетичний коефіцієнт в'язкості, $q_{nc} \equiv \sigma_s(\rho, C, \vec{v}, T)$ — некомпенсоване тепло (виробництво ентропії, яке записане через шукані функції). Коефіцієнти рівнянь стану тут прийняті незалежними від координат.

Якщо ж за розв'язуючі функції вибрати величини P, C, \vec{v}, T , то для перетворення рівнянь (16)-(18) і (25) поряд з кінетичними співвідношеннями (36) використовуємо лінійні рівняння стану (14). У результаті отримаємо таку систему ключових рівнянь моделі

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{d\tau} &= -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v}, \\ \rho \frac{dC}{d\tau} &= \vec{\nabla} \cdot [\bar{D}_T \vec{\nabla} T + \bar{D}_C \vec{\nabla} C + \bar{D}_p \vec{\nabla} P] + \vec{\nabla} \cdot (L_{mm} \vec{\nabla} \psi), \\ \rho \frac{d\vec{v}}{d\tau} &= -\vec{\nabla} P + \vec{\nabla} \cdot (\lambda \vec{\nabla} \cdot \vec{v}) T + \vec{\nabla} \cdot [\Theta (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^s], \\ \frac{C_p}{T_0} \rho \frac{dT}{d\tau} + \alpha_v v_0 \rho \frac{dP}{d\tau} - d_T \rho \frac{dC}{d\tau} &= \\ &= \vec{\nabla} \cdot (\chi \vec{\nabla} T) + \vec{\nabla} \cdot (\chi_C \vec{\nabla} C) + \vec{\nabla} \cdot (\chi_p \vec{\nabla} P) + \vec{\nabla} \cdot (\chi_\psi \vec{\nabla} \psi) + \frac{q_{nc}}{T}, \end{aligned} \quad (38)$$

де \bar{D}_p — кінетичний коефіцієнт дифузії, який пов'язаний з градієнтом тиску, χ_p — коефіцієнт теплопровідності; $q_{nc} \equiv \sigma_s(P, C, \vec{v}, T)$ — некомпенсоване тепло. При цьому $d(1/\rho) = -\alpha_v v_0 \delta T + d_p v_0 \delta P + d_p \delta C$.

Зазначимо, що в системах рівнянь (37) і (38) перше рівняння є законом збереження маси, друге — рівнянням дифузії, третє — рівнянням руху, а четверте — узагальненим рівнянням теплопровідності. У рівняннях теплопровідності складові $(C_p/T_0) \rho dT/d\tau + \alpha_T P_0 d \ln \rho/d\tau - d_T \rho dC/d\tau$ або $(C_p/T_0) \rho dT/d\tau + \alpha_v v_0 \rho dP/d\tau - d_T \rho dC/d\tau$ визначають зв'язок параметрів стану за адіабатичних умов ($s = \text{const}$). Їх часто пов'язують з термодинамічним розсіянням енергії.

5. Лінеаризована система ключових рівнянь моделі

У записаних системах рівнянь (37) і (38) знехтуємо геометричною нелінійністю, яка пов'язана з рухом континууму \mathbf{K} , тобто складовими $\vec{v} \cdot \vec{\nabla}$ в операторі повної похідної за часом, і похідні $d/d\tau$ змінимо на часткові $\partial/\partial\tau$. Прийmemo сталю

сумарну густину маси системи і покладемо $\rho = \rho_0$. Враховуючи, що $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$, таке припущення буде означати, що нехтується об'ємною в'язкістю у системі.

У більшості випадків при розгляді процесів дифузії, теплопровідності та в'язкості в макроскопічній системі можна нехтувати впливом масових сил і тоді $\vec{\nabla} \psi'_i = 0$ ($i = 1, 2$). Надалі у рівнянні теплопровідності знехтуємо також адіабатичною зв'язністю процесів, тобто прийемо, що

$$(C_v/T_0)\rho dT/d\tau + \alpha_T P_0 d \ln \rho/d\tau - d_T \rho dC/d\tau \cong (C_v/T_0)\rho \partial T/\partial \tau,$$

а також

$$(C_p/T_0)\rho dT/d\tau + \alpha_v v_0 \rho dP/d\tau - d_T \rho dC/d\tau \cong (C_p/T_0)\rho \partial T/\partial \tau.$$

За таких припущень, приймаючи кінетичні коефіцієнти рівнянь моделі незалежними від координат, з системи (38) отримаємо

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial \tau} &= D_T \Delta T + D_C \Delta C, \\ \frac{\partial \vec{v}}{\partial \tau} &= \bar{\alpha}_T \vec{\nabla} T + \bar{d}_v \vec{\nabla} C + \bar{\Theta} \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^s, \\ \rho_0 \frac{C_v}{T_0} \frac{\partial T}{\partial \tau} &= \chi \Delta T + \chi_C \Delta C + \frac{q_{nc}}{T}, \end{aligned} \quad (39)$$

де $D_T = \bar{D}_T/\rho_0$, $D_C = \bar{D}_C/\rho_0$ — коефіцієнти дифузії, $\bar{\alpha}_T = -d_T P_0/\rho_0$, $\bar{d}_v = d_v/\rho_0$, $\bar{\Theta} = \Theta/\rho_0$ — нормовані на початкову густину характеристики матеріалу моделі, $\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$ — оператор Лапласа.

Аналогічним чином із системи рівнянь (38) отримаємо

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial \tau} &= D_T \Delta T + D_C \Delta C + D_P \Delta P, \\ \frac{\partial \vec{v}}{\partial \tau} &= \frac{1}{\rho_0} \vec{\nabla} P + \bar{\Theta} \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^s, \\ \rho_0 \frac{C_p}{T_0} \frac{\partial T}{\partial \tau} &= \chi \Delta T + \chi_C \Delta C + \chi_P \Delta P + \frac{q_{nc}}{T}. \end{aligned} \quad (40)$$

Підкреслимо, що в цьому випадку рівняння стану, яке пов'язує зміну температури, тиску і концентрації $-\alpha_v v_0 \delta T + d_p v_0 \delta P + d_p \delta C = 0$, може бути використане для зменшення кількості шуканих функцій. Зазначимо також, що коли означити вектор переміщення $\vec{u} = \vec{r} - \vec{r}_0$, то в лінійному наближенні з формул (4)-(6) знайдемо

$$\hat{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left[\bar{\nabla} \otimes \bar{u} + (\bar{\nabla} \otimes \bar{u})^T \right], \quad (41)$$

де $\hat{\varepsilon} = \varepsilon_{\alpha\beta} \bar{i}^\alpha \otimes \bar{i}^\beta$ — тензор деформації ($\alpha, \beta = \overline{1,3}$). Символом „Т” позначено операцію транспонування, а $\bar{v} = \partial \bar{u} / \partial \tau$.

За початкові умови можуть бути прийняті значення шуканих функцій у початковому стані (11), а швидкість $\bar{v} = \bar{v}_0$.

На зовнішній границі контакту з твердим тілом $\bar{v} = 0$, а силова дія \bar{p} задовольняє умову $\bar{p} = -(\hat{P} + \hat{P}^{vs}) \cdot \bar{n}$. Для температури T і концентрації C можуть бути задані граничні умови першого, другого і третього родів. На внутрішніх поверхнях розділу приймається рівність швидкостей, температури і хімічних потенціалів домішкової компоненти, а також теплових та масових потоків.

Висновки. Отримані системи рівнянь (37) і (38), а також їхні лінеаризовані варіанти (39) і (40), можуть бути покладені в основу кількісного дослідження взаємозв'язаних процесів дифузії, теплопровідності і в'язкості у системі. За певних припущень з них отримуються модельні співвідношення наведені в роботі [17]. Крім цього з використанням (4)-(6), (28), рівнянь стану (13) (або (14)) і кінетичних співвідношень (36) можна оцінити релаксацію напружено-деформованого стану тіла.

Зазначимо також, що наведена вище схема отримання ключових рівнянь моделі механотермодифузії з врахуванням в'язкості може бути узагальнена на випадок, коли локальний рівноважний стан системи задається значеннями спряжених параметрів: $T \div s$, $\sigma_0^{\alpha\beta} \div \varepsilon_{\alpha\beta}$, $\mu'_i \div C_i$, де $\sigma_0^{\alpha\beta}$ — значення компонент тензора напружень Коші у рівновазі ($\alpha, \beta = \overline{1,3}$, $i = 1, 2$), що відповідає опису системи у наближенні твердих розчинів.

Література

- [1] Структурная релаксация в полупроводниковых кристаллах и приборных структурах / Венгер Е. Ф., Грендел М., Данишка В. и др. Под ред. Тхорика Ю. А. — К.: Фенікс, 1994. — 244 с.
- [2] Radiation resistance of GaAs-based microwave Schottky — barrier devices / Belyaev A. E., Breza J., Venger E. F. Під ред. Конакової Р. В., [Тхорика Ю. О.] — К.: Інтерпрес ЛТД, 1998. — 127 с.
- [3] Ильюшин А. А. Механика сплошной среды. — М.: Изд-во Московского ун-та, 1978. — 287 с.
- [4] Седов Л. И. Механика сплошной среды: В 2-х т. — М.: Наука, 1976. — Т. 1. — 536 с. — Т. 2. — 573 с.
- [5] Трусдел К. Первоначальный курс рациональной механики сплошной среды. — М.: Мир, 1975. — 592 с.
- [6] Де Гротт С. П., Мазур П. Неравновесная термодинамика. — М.: Мир, 1964. — 456 с.
- [7] Дьярмати И. Неравновесная термодинамика. — М.: Мир, 1974. — 304 с.

- [8] Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. — М.: Изд-во иностр. литературы, 1960. — 127 с.
- [9] Підстригач Я. С. Диференціальні рівняння задачі термодифузії в твердому деформованому ізотропному тілі // Доп. АН УРСР. — Сер. А. — 1961. — № 2. — С. 169-173.
- [10] Підстригач Я. С., Павлина В. С. Загальні співвідношення термодинаміки твердих розчинів // УФЖ. — 1961. — Т. 6, № 5. — С. 655-663.
- [11] Подстригач Я. С. Диффузионная теория деформации изотропной сплошной среды // Вопр. мех. реальн. тверд. тела. — 1964. — Вып. 4. — С. 71-99.
- [12] Бурак Я. Й., Галапац Б. П., Гнідець Б. М. Фізико-механічні процеси в електропровідних тілах. — К.: Наук. думка, 1978. — 232 с.
- [13] Подстригач Я. С. Диффузионная теория неупругости материалов // Журн. прикл. мех. и техн. физики. — 1965. — № 2. — С. 67-72.
- [14] Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. — Львів: Сполом, 2003. — 128 с.
- [15] Ильюшин А. А., Победря Б. Е. Основы математической теории термовязкоупругости. — М.: Наука, 1970. — 280 с.
- [16] Карнаухов В. Г. Связанные задачи термовязкоупругости. — К.: Наук. думка, 1982. — 260 с.
- [17] Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Гидродинамика. — М.: Наука, 1988. — 736 с.
- [18] Гиббс Дж. В. Термодинамика. Статистическая механика. — М.: Наука, 1982. — 584 с.
- [19] Мюнстер А. Химическая термодинамика. — М.: Мир, 1971. — 295 с.

Initial Equations of Continuum-Thermodynamic Models of Binary Solution Taking into Account Viscosity

Anatoliy Zhalylo, Petro Pelekh, Yevhen Chaplia

The initial correlations of the binary solid solution model for describing processes of heat conductivity, diffusion and viscosity have been obtained using continuum conceptions of continuous media mechanics by means of thermodynamic non – equilibrium processes. The key system of the model equations at different choice variants of independent state parameters using thermodynamic potential of Helmholtz free energy as well as Gibbs' one has been recorded.

Исходные уравнения континуально-термодинамической модели бинарного раствора с учетом вязкости

Анатолий Жалило, Петр Пелех, Евгений Чапля

С использованием континуальных представлений механики сплошной среды методами термодинамики неравновесных процессов получены исходные соотношения модели бинарного твердого раствора для описания процессов теплопроводности, диффузии и вязкости. Записана ключевая система уравнений модели при различных вариантах выбора независимых параметров состояния с использованием термодинамического потенциала свободной энергии Гельмгольца и Гиббса.

Отримано 04.03.05