

Двухмерный аналог формулы (4) запишется в виде

$$\begin{aligned} & \vec{N}_{12} \cdot \vec{J}_{12} + \vec{N}_{13} \cdot \vec{J}_{13} + \vec{N}_{23} \cdot \vec{J}_{23} + \rho_{12} \Phi_{12} (\vec{v}_{12} - \vec{v}_{123}) \cdot \vec{N}_{12} + \\ & + \rho_{13} \Phi_{13} (\vec{v}_{13} - \vec{v}_{123}) \cdot \vec{N}_{13} + \rho_{23} \Phi_{23} (\vec{v}_{23} - \vec{v}_{123}) \cdot \vec{N}_{23} = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Выбирая соответствующие выражения источников и потоков, можно получить конкретные уравнения баланса, в частности уравнения баланса количества движения [4].

1. Гиббс Дж. В. Термодинамические работы. — М.: Гостехиздат, 1950. — 492 с.
2. Кочин Н. Е. О сильных разрывах в сжимаемой жидкости. — Собр. соч. М.: Изд-во АН СССР, 1949, т. 1, с. 68—73.
3. Кочин Н. Е. К теории сильных разрывов в жидкости. — Собр. соч. М.: Изд-во АН СССР, 1949, т. 2, с. 5—42.
4. Повстенко Ю. З. Уравнения баланса количества движения на линии раздела трех сред. — Докл. АН УССР. Сер. А, 1980, № 10, с. 45—47.
5. Седов Л. И., Механика сплошной среды. — М.: Наука, 1970. — Т. 1. 492 с.
6. Cosserat E. et F. Théorie des corps déformables. — Paris: Hermann, 1909. — 227 p.
7. Delhaye J. M. Jump conditions and entropy sources in two — phase systems. Local instant formulation. — Int. J. Multiphase Flow, 1974, 1, N 3, p. 395—409.
8. Ghez R. A generalized Gibbsian surface. — Surface Sci., 1966, 4, N 2, p. 125—140.

Институт прикладных проблем
механики и математики АН УССР

Поступила в редколлегию
29.04.81

УДК 532.72

В. С. Еремеев, В. Н. Михайлов, Е. Б. Бойко

АНАЛИЗ УРОВНЯ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ НАПРЯЖЕНИЙ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ПРОЦЕСС МАССОПЕРЕНОСА ПРИ ДИФфуЗИОННОМ НАСЫЩЕНИИ

Твердофазное диффузионное взаимодействие сопровождается объемными изменениями, вызывающими появление концентрационных напряжений. Типичным примером процесса, при котором обсуждаемые явления имеют место, является диффузионное газофазное насыщение металлов. На практике чаще всего реализуется процесс (например, химико-термическая обработка материалов), при котором образование диффузионного слоя происходит на небольшой глубине (до 1 мм). Экспериментальное изучение распределения насыщающего элемента, а также возникающих напряжений в таком тонком слое, естественно, затруднено. Возможность количественного исследования эффектов появилась в связи с развиваемым в последнее время в технике методов получения гидридов металлов путем так называемого сквозного гидрирования [7]. При этом насыщение водородом металлических образцов, имеющих размеры порядка нескольких сантиметров, происходит с поверхности до полного выравнивания концентрации водорода по всему объему. Значительная величина объемных изменений, достигающих 20—30%, а также охрупчивание металла при образовании гидроксида вызывает образование трещин (рис. 1), либо вообще разрушение образца, что в ряде случаев нежелательно. Предотвращение растрескивания может быть достигнуто за счет сбалансированного регулирования скоростей наращивания напряжений и их релаксации. В этой связи количественные оценки возникающих напряжений на разных этапах гидрирования, а также степень влияния этих напряжений на диффузию является важной информацией для оптимального управления процессом гидрирования.

Одной из первых попыток анализа напряженного состояния в образцах простой формы при насыщении их водородом является работа [11]. Расчеты проводились в упругом приближении, что намного снижало их практическую ценность. Более поздние исследования основывались на упругой модели с учетом пластического течения [6]. Первая теоретическая работа по влиянию

образующихся напряжений на кинетику диффузии в бинарных растворах принадлежит Н. С. Фастову и Б. Я. Любому [10]. Последовательная теория массопереноса в многокомпонентных системах при весьма общих предположениях относительно реологических свойств среды развита Я. С. Подстригачем [8]. В работе [3 и др.] феноменологическая модель диффузии с учетом образующихся напряжений была расширена на случай, когда появление напряженно-деформированного состояния вызывается поглощением вакансий на стоках.

В настоящей работе исследуется роль поля упругих деформаций, образующихся в процессе гидрирования металла, на кинетику процесса и разрушаемость образцов под действием возникающих напряжений.

Общий анализ задачи. Рассмотрим насыщение длинного полого цилиндра из газовой фазы при постоянном давлении и температуре (рис. 2). Пусть

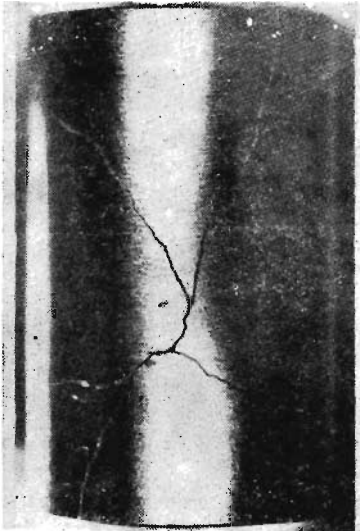


Рис. 1

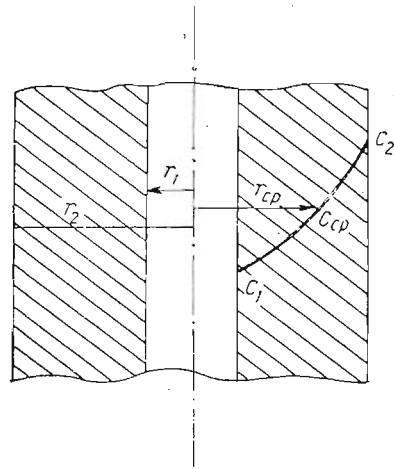


Рис. 2

диффузия протекает в изотропной среде без фазовых превращений. Насыщение образца сопровождается объемным изменением Ωc (c — концентрация диффузанта, Ω — изменение объема на единицу концентрации), которое вызывает появление напряжений в насыщаемом теле [3, 6, 8, 10, 11]. В анализируемом случае перенос массы происходит путем миграции атомов по междоузельному механизму, что позволяет применить любую из моделей диффузии [3, 8, 10]. Представим уравнение массового баланса в форме [3, 10]

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \nabla \left\{ D \left[\rho \nabla c - \frac{c}{3kT} \nabla (\Omega \sigma_{ii}) \right] \right\}, \quad (1)$$

где ρ — термодинамический фактор; k — постоянная Больцмана; T — температура; Ω — первый инвариант тензора напряжений; D — коэффициент диффузии.

Для определения σ_{ii} необходимо обратиться к уравнениям механики. В случае одномерной диффузии в рамках справедливости вязко-упругой модели Максвелла более удобно использовать следующие выражения [3]:

$$\frac{\partial \sigma_{ii}}{\partial \tau} + \frac{E}{2(1+\nu)\eta} \sigma_{ii} = \frac{E}{1-2\nu} \left[\frac{\partial u_{ii}}{\partial \tau} + \frac{E}{2(1+\nu)\eta} (u_{ii} - \Omega c) - \frac{\partial}{\partial \tau} (\Omega c) \right], \quad (2)$$

$$\frac{\partial u_{ii}}{\partial \tau} + \frac{E}{6(1-\nu)\eta} u_{ii} = \frac{(1+\nu)E}{3(1-\nu)} \frac{\partial}{\partial \tau} (\Omega c) + \frac{E\Omega c}{6(1-\nu)\eta}$$

Здесь E — модуль Юнга; ν — коэффициент Пуассона; η — коэффициент вязкости; u_{ii} — первый инвариант тензора деформаций.

Граничные условия при насыщении полого цилиндра с внешней поверхности имеют вид

$$c = C_2 \text{ при } r = r_2, \quad \frac{\partial c}{\partial r} = 0 \text{ при } r = r_1. \quad (3)$$

Учитывая, что напряжения до 100 МПа слабо сказываются на зависимости равновесной концентрации диффузанта от поля упругих напряжений, соответствующей добавкой в изменение граничного условия пренебрегаем. Уравнения (1), (2) должны удовлетворять начальным условиям

$$c(r, 0) = C_1, \quad \sigma_{ii}(r, 0) = 0, \quad u_{ii}(r, 0) = 0, \quad r_1 \leq r \leq r_2. \quad (4)$$

Величина σ_{ii} определена здесь с точностью до функции от времени $f(\tau)$, которая, как видно из уравнения (1), не сказывается на вычисленном распределении $c(r, \tau)$ при $\Omega = \text{const}$. Обозначим действительное значение через σ_{ii} . Решение задачи о распределении концентрационных напряжений можно провести с использованием теории термовязкоупругости. Для этого достаточно в соответствующих формулах вместо температурного объемного изменения $3\alpha T$ (α — коэффициент линейного расширения) подставить величину Ωc . В результате после обращения к работе [2] получим

$$\sigma_{ii} = 2\sigma_{zz} = \frac{2\Omega E}{3(1-\nu)} [c_{\text{ср}} - c(r, \tau)], \quad (5)$$

где $c_{\text{ср}}$ — средняя концентрация, определяемая по формуле

$$c_{\text{ср}} = \frac{2}{r_2^2 - r_1^2} \int_{r_1}^{r_2} c(r, \tau) r dr. \quad (6)$$

Из выражения (5) видно, что в точке $r = r_{\text{ср}}$, соответствующей среднему значению концентрации, $\sigma_{ii} = 0$. Следовательно,

$$f(\tau) = -\sigma_{ii}(r, \tau), \quad \bar{\sigma}_{ii} = \sigma_{ii}(r, \tau) - \sigma_{ii}(r_{\text{ср}}, \tau).$$

Методика расчета. Решение задачи проведем с использованием численного метода. Проинтегрируем уравнения (2) по τ от некоторого момента τ_{n-1} до $\tau_n = \tau_{n-1} + \Delta\tau$. Считая промежуток $\Delta\tau$ малым, интегралы от функции f определим по формуле

$$\int_{\tau_{n-1}}^{\tau_n} f(\tau) d\tau = \frac{1}{2} \Delta\tau (f^{(n)} + f^{(n-1)}), \quad (7)$$

где обозначено $f^{(n)} = f(\tau_n)$. Интегралы от входящих в уравнения (2) производных по времени вычисляем точно. Тогда из образующихся после интегрирования выражений можно найти $u_{ii}^{(n)}$ и $\sigma_{ii}^{(n)}$ в виде

$$u_{ii}^{(n)} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} a \Delta\tau} \left[u_{ii}^{(n-1)} \left(1 - \frac{1}{2} a \Delta\tau \right) + \frac{1 + \nu}{3(1 - \nu)} \Omega M (c^{(n)} - c^{(n-1)}) + \frac{1}{2} a \Delta\tau \Omega M (c^{(n)} + c^{(n-1)} - 2C_1) \right], \quad (8)$$

$$\sigma_{ii}^{(n)} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} b \Delta\tau} \left[(1 - b \Delta\tau) \sigma_{ii}^{(n-1)} + 3k (u^{(n)} - u^{(n-1)}) + \frac{1}{2} b \Delta\tau (u_{ii}^{(n)} + u_{ii}^{(n-1)} - \Omega M (c^{(n)} + c^{(n-1)} - 2C_1)) \right], \quad a = \frac{E}{6(1 - \nu)\eta}, \quad b = \frac{E}{2(1 + \nu)\eta}.$$

Формулы (8) дают зависимость функций u_{ii} , σ_{ii} в момент времени τ_n от значения этих функций в момент τ_{n-1} и значений концентрации c во времени τ_{n-1} и τ_n . Так как в промежутке (τ_{n-1}, τ_n) функции u_{ii} , σ_{ii} приняты линейными по времени, то внутри него их можно вычислять по формулам (8), считая $\Delta\tau = \tau - \tau_{n-1}$.

Запишем уравнения (1) в цилиндрической системе координат, учитывая независимость решения от полярного угла:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial r} \left(b \frac{\partial c}{\partial r} \right) + A \frac{\partial c}{\partial r} - Bc, \quad (9)$$

$$b = D\rho, \quad A = \frac{D\rho}{r} - \frac{\Omega D}{3kT} \frac{\partial \sigma_{II}}{\partial r}, \quad B = \frac{\Omega D}{3kT} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \sigma_{II}}{\partial r} \right).$$

Разобьем промежуток интегрирования по r на k частей:

$$r_i = r_0 + ih, \quad h = \frac{r_k - r_0}{k}, \quad i = 0, 1, \dots, k. \quad (10)$$

Производные по r в формулах для A и B запишем в виде конечных разностей

$$\frac{\partial \sigma_{II}}{\partial r} = \frac{\sigma_{II}(r+h) - \sigma_{II}(r-h)}{2h}, \quad \frac{\partial^2 \sigma_{II}}{\partial r^2} = \frac{\sigma_{II}(r+h) - 2\sigma_{II}(r) + \sigma_{II}(r-h)}{h^2}. \quad (11)$$

Таким образом, в промежутке $\tau_{n-1} \leq \tau \leq \tau_n$ A и B с учетом выражений (11) и (8) можно считать функциями от τ, r, c ($A = A(\tau, r, c)$, $B = B(\tau, r, c)$), а уравнение (9) рассматривать как нелинейное уравнение только относительно концентрации c . Для его решения воспользуемся разностной схемой

$$\begin{aligned} \frac{c_m^n - c_m^{n+1}}{\Delta \tau} &= \frac{1}{n} \left[b_{m-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} (c_{m+1}^n - c_m^n) - b_{m-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} (c_m^n - c_{m-1}^n) \right] + \\ &+ \frac{1}{2n} \left[A_{m+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} (c_{m+1}^n - c_m^n) + A_{m-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} (c_m^n - c_{m-1}^n) \right] - B_m^{n-\frac{1}{2}} c_m^n, \end{aligned} \quad (12)$$

где обозначено

$$f_{m+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} = f \left(\tau_n - \frac{1}{2} \Delta \tau, \quad r_m + \frac{1}{2} n \right).$$

Граничные условия (3) аппроксимировались выражениями

$$C_1^{(n)} = C_0^{(n)}, \quad C_k^{(n)} = C_2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (13)$$

Система нелинейных уравнений (12) решалась на ЭВМ путем итераций с использованием на каждом шаге метода прогонки [9].

Общая схема решения задачи следующая. В момент времени $\tau_0 = 0$ ($n = 0$) величины c, u_{II}, σ_{II} известны из начальных условий (4). Решая систему (12), (13), находим c во время $\tau_1 = \tau_0 + \Delta \tau$. По формулам (8) вычисляем значения u_{II}, σ_{II} в это же время. Далее процесс повторяется для $n = 2, 3, \dots$ до необходимого момента времени.

Исходная информация. Выпишем входные параметры для случая насыщения гидрида от состава $ZrH_{1,8}$ до $ZrH_{1,9}$ при температуре 1170 К. Температурная зависимость коэффициента самодиффузии водорода в гидриде $ZrH_{1,9}$ имеет вид

$$D = 3,2 \cdot 10^{-7} \exp \left(- \frac{9600}{T} \right). \quad (14)$$

В работе [4] показано, что наличие путей облегченной диффузии, возникающих в процессе образования фаз внедрения при диффузионном насыщении, ответственно за ускорение кинетики, которое достигает одного порядка и выше. Принимая коэффициент ускорения равным 40, а значение термодинамического множителя $\rho = 20$, для эффективного коэффициента диффузии при 1770 К из формулы (14) находим

$$D\rho = 7 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}. \quad (15)$$

Экстраполируя результаты измерения скорости ползучести для гидрида $ZrH_{1,85}$ на 1170 К, получаем [5]

$$\xi = B\sigma^{3,65}. \quad (16)$$

Здесь $B = 3,5 \cdot 10^{-35}$ (ξ в с^{-1} , σ в Па).

В случае среды Максвелла скорость ползучести (16) представляется в виде

$$\dot{\xi} = B'\sigma, \quad (17)$$

где $B' = B\sigma^{2.65}$, откуда вычисляется коэффициент вязкости

$$\eta = (3B')^{-1} = (3B\sigma^{2.65})^{-1}. \quad (18)$$

Можно показать, что замена реологической модели (16) на (17) дает полуколичественные результаты для области, где величина напряжений, вычисленных в рамках более точной теории (16), имеет максимальное значение. Процедура вычисления коэффициента вязкости сводится к следующему. По формуле (18) определяется для напряжения σ_1 заведомо превышающее максимальное напряжение, действующее в системе. Далее проводятся расчеты с выбранным значением η_1 и выявляется максимальное напряжение σ_2 . Если $\sigma_1 = \sigma_2$, то коэффициент η_1 выбран правильно. При $\sigma_2 < \sigma_1$ по формуле (18) определяется новое значение η_2 , для которого расчеты повторяются. И так до тех пор, пока с нужной точностью σ_{k+1} не совпадет с σ_k .

Расчеты и обсуждение данных. Исследуем роль упругих деформаций в

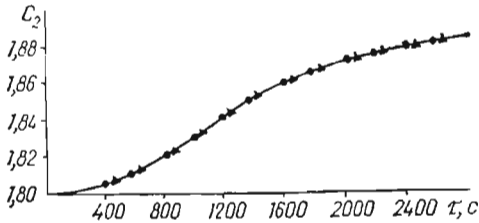


Рис. 3

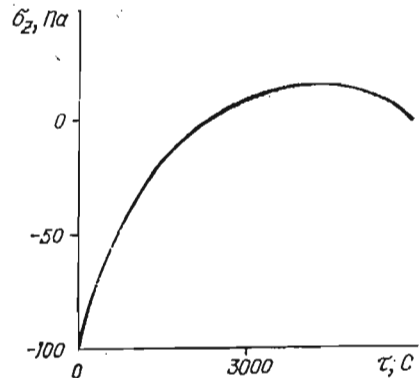


Рис. 4

кинетику наводороживания. Рассмотрим насыщение полого цилиндра с граничными и начальными условиями (3) для $r_1 = 0,5$ см, $r_2 = 2,5$ см, $C_1 = 1,8$, $C_2 = 1,9$; $D_D = 7 \cdot 10^{-8}$ м²/с. Коэффициент вязкости, вычисленный в соответствии с формулой (18) для $\sigma = 20$ МПа, равен $\eta = 4 \cdot 10^{14}$ Па · с. На рис. 3 представлены результаты расчетов для двух крайних случаев $\eta_1 = 9 \cdot 10^{16}$ Па · с и $\eta_2 = 10^{10}$ Па · с (кружочки — упругая среда, треугольнички — неупругая). Значение η_1 практически соответствует полному снятию напряжений ($|\sigma| \ll 10^{-1}$ МПа), а коэффициент η_2 — упругой среде с максимально возможным уровнем напряжений. Из этого рисунка видно, что зависимости концентрации водорода от времени для упругой среды и случая полной релаксации образующихся напряжений совпадают. Следовательно, роль поля упругих деформаций мала и вместо уравнения массового баланса (1) можно использовать уравнение Фика. На рис. 4 приведена зависимость осевых напряжений σ_z на внешней поверхности цилиндра от времени для $\eta_0 = 4 \cdot 10^{14}$ Па · с. Значение σ_z падает от -100 МПа в начальный момент до 0 к моменту $\tau \approx 2500$ с, после чего возрастает до 15 МПа. Так как предел прочности гидрида на растяжение [7] находится на уровне 20—30 МПа, то соответствующие напряжения не опасны с точки зрения разрушения образца. Однако при переходе к большей разнице между C_1 и C_2 величина напряжений может превысить предел прочности, что приведет к образованию трещин (см. рис. 1).

Выводы. В рамках вязко-упругой модели Максвелла исследовано напряженно-деформированное состояние полого цилиндра, которое возникает в процессе диффузионного взаимодействия. На примере гидрирования циркония показано, что величина концентрационных напряжений может превышать предел прочности материала, хотя сами напряжения практически не влияют на кинетику диффузии.

1. Андриевский Р. А., Бойко Е. Б., Солодинин А. М. Авторадиографическое изучение самодиффузии водорода в гидриде циркония.— Физика металлов и металловедение, 1979, 48, вып. 2, с. 348—351.
2. Боли Б., Уэйнер Дж. Теория температурных напряжений.— М.: Мир, 1964.— 517 с.
3. Еремеев В. С. Феноменологический анализ диффузии в металлических сплавах.— Физика металлов и металловедение, 1976, 42, вып. 2, с. 231—239.
4. Еремеев В. С., Хромов Ю. Ф., Ляхов Д. М., Алексеева И. С. Кинетика взаимодействия Zr с графитом.— Изв. АН СССР. Неорганические материалы, 1977, 13, № 11, с. 2014—2018.
5. Зубарев П. В., Рыжов П. А. Ползучесть гидридов.— Изв. АН СССР. Неорганические материалы, 1979, 15, № 2, с. 247—250.
6. Ковригин В. Н., Еремеев В. С., Иванов В. К. Влияние напряженного состояния окисной пленки на характер окисления циркония.— В кн.: Ежегодная конференция преподавателей и студентов МИФИ. М., 1970, с. 47—53.
7. Мюллер В., Блэкледж Д., Либовиц Дж. Гидриды металлов.— М.: Атомиздат, 1973.— 431 с.
8. Подстригач Я. С. Диффузионная теория неупругости металлов.— Журн. прикл. механики и техн. физики, 1965, № 2, с. 67—72.
9. Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем.— М.: Наука, 1971.— 552 с.
10. Фастов Н. С., Любов Б. Я. Влияние концентрационных напряжений на процесс диффузии в твердых растворах.— Докл. АН СССР, 1952, 84, № 5, с. 939—941.
11. Nathan M. E. Theoretical kinetics and stresses for delta-phase isothermal hydriding of uranium — zirconium. Canoga Park (Cal.), 1962. — 49 p. NAA—SR—6264 — A division of North American aviation.

г. Москва

Поступила в редколлегию
01.04.81

УДК 534.113

В. М. Флячок, Р. Н. Швец

**ВЛИЯНИЕ НЕРАВНОМЕРНОГО НАГРЕВА
НА СОБСТВЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ
АНИЗОТРОПНЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ОБОЛОЧЕК**

Рассмотрим конечную ортотропную цилиндрическую оболочку, находящуюся в напряженном состоянии, обусловленном осесимметричными силовыми и температурными нагрузками. Это напряженное состояние принимаем как начальное, относительно которого происходят малые свободные колебания оболочки. Для исследования этих колебаний исходим из системы уравнений движения, учитывающих анизотропию материала, обусловленную низкой сдвиговой жесткостью и трансверсальной сжимаемостью [6]. Следуя работам [1, 3], учитываем также начальное напряженное состояние, которое предполагаем плоским и однородным. Данную систему записываем в виде

$$\sum_{j=1}^6 L_{ij} y_j = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, 6). \quad (1)$$

Здесь

$$L_{ij} = L_{ji}; \quad y_r = u_r; \quad y_{r+3} = \gamma_r \quad (r = 1, 2, 3);$$

$$L_{11} = c_{11} \partial_{11}^2 + c_{44} \partial_{22}^2 - c_{\tau} \partial_{\tau}^2 + \frac{1}{2h} [\partial_1 (N_1^0 \partial_1) + \partial_2 (N_2^0 \partial_2)];$$

$$L_{12} = (c_{12} + c_{44}) \partial_{12}^2; \quad L_{13} = c_{12} \partial_1; \quad L_{14} = L_{15} = 0; \quad L_{16} = c_{13} \partial_1;$$

$$L_{22} = c_{22} \partial_{22}^2 + c_{44} \partial_{11}^2 - c'_{66} - c_{\tau} \partial_{\tau}^2 + \frac{1}{2h} [\partial_1 (N_1^0 \partial_1) + \partial_2 (N_2^0 \partial_2) - N_2^0];$$

$$L_{23} = (c_{22} + c'_{66}) \partial_2 + \frac{1}{2h} (\partial_2 N_2^0 + 2N_2^0 \partial_2); \quad L_{24} = 0; \quad L_{25} = c'_{66};$$

$$L_{26} = c_{23} \partial_2; \quad L_{34} = -c'_{55} \partial_1; \quad L_{35} = -c'_{66} \partial_2; \quad L_{36} = c_{23};$$

$$L_{33} = - \left\{ c'_{55} \partial_{11}^2 + c'_{66} \partial_{22}^2 - c_{22} - c_{\tau} \partial_{\tau}^2 + \frac{1}{2h} [\partial_1 (N_1^0 \partial_1) + \partial_2 (N_2^0 \partial_2) - N_2^0] \right\};$$

$$L_{44} = (c_{11} \partial_{11}^2 + c_{44} \partial_{22}^2) \delta^2 - c'_{55} - \delta^2 c_{\tau} \partial_{\tau}^2; \quad L_{45} = \delta^2 (c_{12} + c_{44}) \partial_{12}^2;$$