

УДК 539:3

© 2003 г. С.А. КОРНЕЕВ

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ СОГЛАСОВАННЫЕ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ ТЕОРИИ ТЕРМОУПРУГОСТИ

В статье получены общие зависимости для термоупругих характеристик изотропных материалов. Сопоставлением теоретических и опытных данных показано, что в широком диапазоне температур и давлений поликристаллический алюминий является гиперупругим материалом с высокой точностью.

1. Введение. В нелинейной теории упругости различают упругость по Коши и упругость по Грину [1]. В первом случае полагается, что тензор напряжений является однозначной функцией градиента деформации. Во втором случае дополнительно предполагается существование потенциала напряжений (в приближении малых деформаций различие между упругостью по Коши и Грину отсутствует [2]). По предложению Трусделла упругий по Грину материал называют гиперупругим, а материал, упругий по Коши, – упругим материалом [1, 2]. Такое деление материалов на упругие и гиперупругие вполне закономерно, поскольку в нелинейной теории упругости тепловыми эффектами пренебрегают. Существование потенциала напряжений (потенциальной энергии деформации) связывают с присущей упругой среде способностью аккумулировать работу внешних сил при нагружении и возвращать “запасенную энергию” при разгрузке. Для обоснования данной гипотезы, как правило, используется теорема о термодинамических потенциалах, доказываемая в теории термоупругости (см., например, [2, 3]). Благодаря этой теореме для отдельных процессов квазистатического деформирования потенциал напряжений удается связать с термодинамическими потенциалами – свободной энергией (в изотермическом процессе) и внутренней энергией (в адиабатическом процессе). В остальных случаях деформирования подобная связь отсутствует. Как отмечает Трусделл, при деформациях общего вида нет оснований предполагать, что процесс будет изотермическим или адиабатическим (скорее наоборот). Поэтому в общем случае данному термоупругому материалу соответствует не один гиперупругий материал, а бесконечное множество. По этой причине становится не совсем понятным, как и когда можно применять результаты нелинейной теории упругости [2]. Аналогичной точки зрения придерживается Бленд при рассмотрении адиабатических процессов динамического деформирования упругих сред с нулевой теплопроводностью. Он считает важным рассмотрение вопроса, в какой мере адиабатические решения (эквивалентные решениям для соответствующего гиперупругого материала) представляют собой достаточные приближения к полным решениям термоупругости [4].

Поставим перед собой задачу выяснить насколько “гиперупруг” тот или иной термоупругий материал, уточнив тем самым область применимости теории упругости по Грину. Данная, в значительной степени сугубо теоретическая задача тесным образом связана с другой, имеющей большое прикладное значение задачей единого, термодинамически и экспериментально согласованного описания основных термомеханических характеристик различных материалов в широком диапазоне температур и давлений.

Когда абсолютная температура близка к нулю, возникает прямая необходимость в привлечении третьего начала термодинамики (тепловой теоремы Нернста). В остальных случаях, обычно изучаемых в теории термоупругости, третьему началу не уделяется должного внимания. Более того, обзор справочной литературы и научных статей, посвященных экспериментальным исследованиям теплоемкости, показывает (см., например, [5–7]), что пока еще никем не ставилась задача о всестороннем изучении влияния деформации на теплоемкость материалов, хотя в опытах детально изучалось влияние таких факторов, как магнитное поле, рентгеновское излучение, радиоактивность и т.п.

В тоже время, как станет ясно из дальнейшего, совместное применение всех трех начал термодинамики, позволяет существенно ограничить множество допустимых зависимостей. Если к этой информации добавить (достаточно точную) зависимость для теплоемкости, то (ровно с такой же точностью) можно полностью описать термоупругие свойства реальных материалов.

В настоящем исследовании с помощью небольшого числа эмпирических коэффициентов (подгоночных параметров) удалось достичь приемлемой точности для поликристаллического алюминия.

2. Общие положения. Возьмем в качестве отсчетной естественную конфигурацию среды (т.е. свободную от напряжений равновесную конфигурацию) при абсолютном нуле температуры. Будем считать, что диссипация энергии при деформировании отсутствует. Тогда на основании первого и второго начал термодинамики можно записать уравнение [3, 8]:

$$\theta d\eta(\theta, \mathbf{C}) = du(\theta, \mathbf{C}) - \mathbf{P}(\theta, \mathbf{C}) : d\mathbf{C} \quad (2.1)$$

в котором θ – абсолютная температура; η и u – удельная (на единицу массы) энтропия и удельная внутренняя энергия

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} \quad (2.2)$$

\mathbf{C} – мера деформации Коши, связанная с тензором конечной деформации соотношением $\boldsymbol{\epsilon} = (\mathbf{C} - \mathbf{I})/2$, где \mathbf{I} – единичный тензор;

$$\mathbf{P} = (2\rho)^{-1} \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{T} \cdot (\mathbf{F}^{-1})^T \quad (2.3)$$

\mathbf{P} – приведенный тензор напряжений, \mathbf{T} – истинный тензор напряжений, $\mathbf{F} = \partial \mathbf{x}(t, \mathbf{X}) / \partial \mathbf{X}$ – градиент деформации, $\mathbf{x}(t, \mathbf{X})$ – закон движения среды, ρ – плотность в актуальной конфигурации, связанная с плотностью в отсчетной конфигурации ρ_1 соотношением

$$\rho_1 / \rho = \det \mathbf{F} = \sqrt{\det \mathbf{C}} \quad (2.4)$$

Удельная теплоемкость при постоянной деформации равна [8]:

$$c(\theta, \mathbf{C}) = \partial u(\theta, \mathbf{C}) / \partial \theta = \theta \partial \eta(\theta, \mathbf{C}) / \partial \theta$$

Проинтегрировав данные равенства, получим

$$u(\theta, \mathbf{C}) = \int_0^\theta c(\theta, \mathbf{C}) d\theta + u_h(\mathbf{C}), \quad \eta(\theta, \mathbf{C}) = \int_0^\theta c^{-1}(\theta, \mathbf{C}) d\theta + \eta_h(\mathbf{C}) \quad (2.5)$$

где u_h , η_h – некоторые функции. По третьему началу термодинамики [9] $\partial \eta(\theta = 0, \mathbf{C}) / \partial \mathbf{C} = 0$. Поскольку удельная энтропия определена с точностью до произвольной ад-

дитивной постоянной, то, приписав последней нулевое значение, для удельной свободной энергии получим следующее выражение:

$$f(\theta, \mathbf{C}) \equiv u(\theta, \mathbf{C}) - \theta \eta(\theta, \mathbf{C}) = \int_0^\theta (1 - \theta/\theta') c(\theta', \mathbf{C}) d\theta' + u_h(\mathbf{C}) \quad (2.6)$$

Так как по уравнению (2.1):

$$\mathbf{P}(\theta, \mathbf{C}) = (\partial f / \partial \mathbf{C})_\theta, \quad \eta = -(\partial f / \partial \theta)_\mathbf{C} \quad (2.7)$$

находим

$$\mathbf{P}(\theta, \mathbf{C}) = du_h(\mathbf{C})/d\mathbf{C} + \int_0^\theta (1 - \theta/\theta') \partial c(\theta', \mathbf{C}) / \partial \mathbf{C} d\theta' \quad (2.8)$$

Поскольку последнее слагаемое в (2.5) и (2.6) не зависит от температуры, то величину $u_h(\mathbf{C})$ можно рассматривать как гиперупругую составляющую внутренней (и свободной) энергии. Если теплоемкость зависит лишь от температуры (в частности, постоянна), то из выражения (2.8) вытекает $\mathbf{P} = du_h(\mathbf{C})/d\mathbf{C}$, т.е. при $c = c(\theta)$ материал является гиперупругим. Но, как учит опыт, у реальных материалов температурные напряжения отличны от нуля. Поэтому теплоемкость должна зависеть как от температуры, так и от деформации.

В дальнейшем величину $u_h(\mathbf{C})$ будем называть гиперупругой составляющей внутренней энергии, а величину

$$u_{th}(\theta, \mathbf{C}) = \int_0^\theta c(\theta, \mathbf{C}) d\theta$$

термоупругой составляющей внутренней энергии. Тогда в соответствии с (2.5) полное значение удельной внутренней энергии $u = u_h + u_{th}$.

3. Тензор напряжений изотропных материалов. Свободная энергия изотропных материалов зависит от тензора Коши \mathbf{C} через его инварианты

$$f(\theta, \mathbf{C}) = f[\theta, I_1(\mathbf{C}), I_1(\mathbf{C}^2), I_3(\mathbf{C})] \quad (3.1)$$

$$I_1(\mathbf{C}) = \text{tr} \mathbf{C}, \quad I_1(\mathbf{C}^2) = \text{tr} \mathbf{C}^2, \quad I_3(\mathbf{C}) = \det \mathbf{C}$$

Поэтому [1]:

$$\partial f / \partial \mathbf{C} = \partial f / \partial I_1(\mathbf{C}) \mathbf{I} + 2 \partial f / \partial I_1(\mathbf{C}^2) \mathbf{C} + I_3(\mathbf{C}) \partial f / \partial I_3(\mathbf{C}) \mathbf{C}^{-1}$$

Благодаря последнему равенству из соотношений (2.2), (2.3), (2.7) находим

$$\mathbf{T} = 2\rho \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{C}} \mathbf{F}^T = 2\rho \left[\frac{\partial f}{\partial I_1(\mathbf{B})} \mathbf{B} + 2 \frac{\partial f}{\partial I_1(\mathbf{B}^2)} \mathbf{B}^2 + I_3(\mathbf{B}) \frac{\partial f}{\partial I_3(\mathbf{B})} \mathbf{I} \right] \quad (3.2)$$

где $\mathbf{B} = \mathbf{F}\mathbf{F}^T$ – мера деформации Грина, имеющая одинаковые инварианты с мерой деформации Коши [1, 2]:

$$I_1(\mathbf{B}) = I_1(\mathbf{C}), \quad I_1(\mathbf{B}^2) = I_1(\mathbf{C}^2), \quad I_3(\mathbf{B}) = I_3(\mathbf{C}) \quad (3.3)$$

На основании выражений (3.1), (3.3) формула (2.6) принимает вид

$$f = u_h[I_1(\mathbf{B}), I_1(\mathbf{B}^2), I_3(\mathbf{B})] + \int_0^\theta (1 - \theta/\theta') c[\theta', I_1(\mathbf{B}), I_1(\mathbf{B}^2), I_3(\mathbf{B})] d\theta'$$

В результате с помощью равенств (2.4), (3.3) для зависимости (3.2) будем иметь

$$\mathbf{T}(\theta, \mathbf{B}) = \mathbf{T}_h(\mathbf{B}) + \mathbf{T}_{th}(\theta, \mathbf{B}) \quad (3.4)$$

$$\mathbf{T}_h = \frac{2\rho_1}{\sqrt{I_3(\mathbf{B})}} \frac{\partial u_h(\mathbf{B})}{\partial I_1(\mathbf{B})} \mathbf{B} + \frac{4\rho_1}{\sqrt{I_3(\mathbf{B})}} \frac{\partial u_h(\mathbf{B})}{\partial I_1(\mathbf{B}^2)} \mathbf{B}^2 + 2\rho_1 \sqrt{I_3(\mathbf{B})} \frac{\partial u_h(\mathbf{B})}{\partial I_3(\mathbf{B})} \mathbf{I} \quad (3.5)$$

$$\mathbf{T}_{th} = \frac{2\rho_1}{\sqrt{I_3(\mathbf{B})}} \int_0^\theta \left(1 - \frac{\theta}{\theta'}\right) \left[\frac{\partial c(\theta', \mathbf{B})}{\partial I_1(\mathbf{B})} \mathbf{B} + 2 \frac{\partial c(\theta', \mathbf{B})}{\partial I_1(\mathbf{B}^2)} \mathbf{B}^2 + I_3(\mathbf{B}) \frac{\partial c(\theta', \mathbf{B})}{\partial I_3(\mathbf{B})} \mathbf{I} \right] d\theta' \quad (3.6)$$

Тензоры \mathbf{T}_h и \mathbf{T}_{th} представляют собой соответственно тензор гиперупругих напряжений и тензор термоупругих напряжений (или гиперупругую и термоупругую составляющие истинного тензора напряжений \mathbf{T}).

Выражение (3.4) определяет тензор напряжений по отношению к естественной конфигурации k_1 , в которой температура тела $\theta_1 = 0$ и давление окружающей среды $p_1 = 0$. Осуществим замену отсчетной конфигурации (фиг. 1). Конфигурация k_2 является неискаженной. В ней абсолютная температура тела θ_2 и давление окружающей среды p_2 в общем случае могут быть отличны от нуля (например, температура комнатная, давление атмосферное).

По формуле $\mathbf{x} = \mathbf{x}[t, \mathbf{X}_2(\mathbf{X}_1)]$ находим $\mathbf{F}_1 = \mathbf{F}_2 \mathbf{F}_{12}$ (переобозначение $\mathbf{F} = \mathbf{F}_1$ делается для единообразия записи последующих выражений). Поскольку материал изотропен, преобразование конфигурации k_1 в конфигурацию k_2 является преобразованием подобия $\mathbf{X}_2 = \Gamma_{12} \mathbf{X}_1$, $\mathbf{F}_{12} = \Gamma_{12} \mathbf{I}$, где в соответствии с формулой (2.4):

$$\Gamma_{12} = (\rho_1/\rho_2)^{1/3} \quad (3.7)$$

ρ_2 – плотность в конфигурации k_2 . Следовательно

$$\mathbf{B}_1 \equiv \mathbf{F}_1 \mathbf{F}_1^T = \Gamma_{12}^2 \mathbf{B}_2, \quad \mathbf{B}_1^2 = \Gamma_{12}^4 \mathbf{B}_2^2 \quad (3.8)$$

$$I_1(\mathbf{B}_1) = \Gamma_{12}^2 I_1(\mathbf{B}_2), \quad I_1(\mathbf{B}_1^2) = \Gamma_{12}^4 I_1(\mathbf{B}_2^2), \quad I_3(\mathbf{B}_1) = \Gamma_{12}^6 I_3(\mathbf{B}_2) \quad (3.9)$$

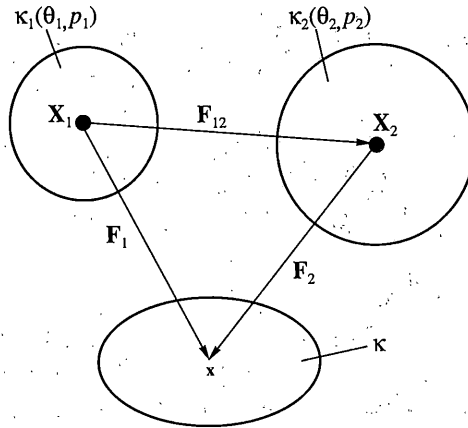
Прделаем в выражениях (3.4)–(3.6) замену $\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{B}_1$ и подставим в полученный результат зависимости (3.7)–(3.9). Тогда по отношению к неискаженной конфигурации k_2 тензор напряжений можно представить так:

$$\mathbf{T}(\theta, \mathbf{B}_2) = \mathbf{T}_h(\mathbf{B}_2) + \mathbf{T}_{th}(\theta, \mathbf{B}_2) \quad (3.10)$$

$$\mathbf{T}_h = L u_h(\mathbf{B}_2), \quad \mathbf{T}_{th} = \int_0^\theta \left(1 - \frac{\theta_2}{\theta'}\right) L c(\theta', \mathbf{B}_2) d\theta' + (\theta - \theta_2) \int_0^\theta \frac{1}{\theta'} L c(\theta', \mathbf{B}_2) d\theta' \quad (3.11)$$

Квазилинейный дифференциальный оператор L имеет вид

$$L = \frac{2\rho_2}{\sqrt{I_3(\mathbf{B}_2)}} \left[\mathbf{B}_2 \frac{\partial}{\partial I_1(\mathbf{B}_2)} + 2\mathbf{B}_2^2 \frac{\partial}{\partial I_1(\mathbf{B}_2^2)} + I_3(\mathbf{B}_2) \mathbf{I} \frac{\partial}{\partial I_3(\mathbf{B}_2)} \right] \quad (3.12)$$



Фиг. 1

Рассмотрим ситуацию, когда при переходе из конфигурации κ_2 в актуальную конфигурацию κ смещения $\mathbf{u}(t, \mathbf{X}_2) = \mathbf{x}(t, \mathbf{X}_2) - \mathbf{X}_2$ и изменения температуры $\vartheta(t, \mathbf{X}_2) = \theta(t, \mathbf{X}_2) - \theta_2$ являются малыми величинами порядка ϵ во всех точках тела. В этом случае будут справедливы приближенные формулы:

$$\mathbf{F}_2 = \mathbf{I} + \partial \mathbf{u}(t, \mathbf{X}_2) / \partial \mathbf{X}_2, \quad \mathbf{B}_2 = \mathbf{I} + 2\boldsymbol{\epsilon} + O(\epsilon^2), \quad \mathbf{B}_2^2 = \mathbf{I} + 4\boldsymbol{\epsilon} + O(\epsilon^2)$$

$$I_1(\mathbf{B}_2) = 3 + 2\Theta + O(\epsilon^2), \quad I_1(\mathbf{B}_2^2) = 3 + 4\Theta + O(\epsilon^2), \quad I_3(\mathbf{B}_2) = 1 + 2\Theta + O(\epsilon^2)$$

$$\sqrt{I_3(\mathbf{B}_2)} = 1 + \Theta + O(\epsilon^2), \quad 1/\sqrt{I_3(\mathbf{B}_2)} = 1 - \Theta + O(\epsilon^2)$$

в которых $\boldsymbol{\epsilon} = 0.5[\partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{X}_2 + (\partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{X}_2)^T]$ – тензор малой деформации, $\Theta = I_1(\boldsymbol{\epsilon})$ – объемная деформация. В результате уравнение (3.10) преобразуется в уравнение Дюамеля – Неймана [10]:

$$\mathbf{T} = \lambda \Theta \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\epsilon} - \vartheta \gamma \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} \mathbf{I} \tag{3.13}$$

$$\lambda = \lambda_h + \lambda_{th}, \quad \mu = \mu_h + \mu_{th}, \quad \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_h + \boldsymbol{\tau}_{th} \tag{3.14}$$

$$\lambda_h(\rho_2) = \left[\rho^3 \frac{d^2 \bar{u}_h(\rho)}{d\rho^2} + 2\rho^2 \frac{d\bar{u}_h(\rho)}{d\rho} - \frac{2}{3} \mu_h(\rho) \right]_{\rho = \rho_2} \tag{3.15}$$

$$\mu_h(\rho_2) = 2\rho_2 \Gamma_{12}^2 \left[\frac{d\mu_h(\mathbf{B}_2)}{dI_1(\mathbf{B}_2)} + 4\Gamma_{12}^{-2} \frac{d\mu_h(\mathbf{B}_2)}{dI_1(\mathbf{B}_2^2)} \right]_{\mathbf{B}_2 = \Gamma_{12}^2 \mathbf{I}} \tag{3.16}$$

$$\boldsymbol{\tau}_h(\rho_2) = -\rho_2^2 \left[\frac{d\bar{\mu}_h(\rho)}{d\rho} \right]_{\rho = \rho_2} \tag{3.17}$$

$$\lambda_{th}(\theta_2, \rho_2) = \int_0^{\theta_2} \left(1 - \frac{\theta_2}{\theta'} \right) \left[\rho^3 \frac{d^2 \bar{c}(\theta', \rho)}{d\rho^2} + 2\rho^2 \frac{d\bar{c}(\theta', \rho)}{d\rho} - \frac{2}{3} \mu_{th}(\theta', \rho) \right]_{\rho = \rho_2} d\theta' \tag{3.18}$$

$$\mu_{th}(\theta_2, \rho_2) = 2\rho_2 \Gamma_{12}^2 \int_0^{\theta_2} \left(1 - \frac{\theta_2}{\theta'}\right) \left[\frac{dc(\theta', \mathbf{B}_2)}{dI_1(\mathbf{B}_2)} + 4\Gamma_{12}^2 \frac{dc(\theta', \mathbf{B}_2)}{dI_1(\mathbf{B}_2^2)} \right]_{\mathbf{B}_2 = \Gamma_{12}^2 \mathbf{I}} d\theta' \quad (3.19)$$

$$\tau_{th}(\theta_2, \rho_2) = -\rho_2^2 \int_0^{\theta_2} \left(1 - \frac{\theta_2}{\theta'}\right) \left[\frac{d\bar{c}(\theta', \rho)}{d\rho} \right]_{\rho = \rho_2} d\theta' \quad (3.20)$$

$$\gamma(\theta_2, \rho_2) = -\rho_2^2 \int_0^{\theta_2} \frac{1}{\theta'} \left[\frac{d\bar{c}(\theta', \rho)}{d\rho} \right]_{\rho = \rho_2} d\theta' \quad (3.21)$$

Здесь λ , μ – коэффициенты Ламе, γ – коэффициент температурных напряжений, τ – свободный член. Индексы h и th обозначают гипер- и термоупругую составляющие соответствующей величины. Функции $\bar{u}_h(\rho)$, $\bar{c}(\theta, \rho)$ получаются из зависимостей $u_h[I_1(\mathbf{B})]$, $I_1(\mathbf{B}^2)$, $I_3(\mathbf{B})$, $c[\theta, I_1(\mathbf{B})]$, $I_1(\mathbf{B}^2)$, $I_3(\mathbf{B})$ подстановкой в них выражения $\mathbf{B} = (\rho_1/\rho)^{2/3} \mathbf{I}$:

$$\bar{u}_h(\rho) = u_h\{I_1[(\rho_1/\rho)^{2/3} \mathbf{I}], I_1[(\rho_1/\rho)^{4/3} \mathbf{I}], I_3[(\rho_1/\rho)^{2/3} \mathbf{I}]\} \quad (3.22)$$

$$\bar{c}(\theta, \rho) = c\{\theta, I_1[(\rho_1/\rho)^{2/3} \mathbf{I}], I_1[(\rho_1/\rho)^{4/3} \mathbf{I}], I_3[(\rho_1/\rho)^{2/3} \mathbf{I}]\} \quad (3.23)$$

Модуль Юнга (модуль растяжения) E , модуль сдвига G , модуль Пуассона ν и модуль объемного сжатия K определяются известными формулами [10]:

$$E = \mu(3\lambda + 2\mu)/(\lambda + \mu), \quad G = \mu, \quad \nu = \lambda/[2(\lambda + \mu)], \quad K = \lambda + (2/3)\mu$$

Коэффициент температурных напряжений γ связан с коэффициентом линейного расширения α соотношением $\gamma = 3\alpha K$. Свободный член τ позволяет по заданным температуре θ_2 и давлению окружающей среды p_2 определять плотность тела ρ_2 в конфигурации κ_2 : $\tau(\theta_2, \rho_2) = -p_2$.

Полученные выражения (3.4)–(3.6), (3.10)–(3.23) являются наиболее общими выражениями для соответствующих величин.

4. Некоторые соотношения статистической физики. Как известно [9, 11], свободная энергия твердого тела в общем случае равна

$$F = U_0 + \sum_i h\omega_i/2 + k\theta \sum_i \ln[1 - \exp(-h\omega_i/(k\theta))] \quad (4.1)$$

где U_0 – потенциальная энергия тела при абсолютном нуле температуры и определенном давлении окружающей среды, k и h – постоянные Больцмана и Планка, ω_i – частоты нормальных колебаний атомов. В отношении нормальных частот ω_i , являющихся функциями состояния, обычно предполагается, что они не зависят от температуры и могут меняться при деформации тела.

Положив в формулах (2.6) и (4.1) температуру равной нулю и сравнив получающиеся после этого результаты, приходим к выводу, что гиперупругая энергия тела складывается из кинетической энергии нулевых колебаний и потенциальной энергии тела при нулевой абсолютной температуре:

$$U_h = \sum_i h\omega_i/2 + U_0$$

Пусть $\varphi(\omega)$ – функция распределения частот в элементарной ячейке кристаллической решетки, которая определяет число частот, попадающих в интервал $(\omega, \omega + d\omega)$. Тогда зависимость (4.1) можно записать в виде

$$F = N \left\{ u_0 + \int_0^{\infty} \varphi(\omega) (h\omega/2) d\omega + k\theta \int_0^{\infty} \varphi(\omega) \ln [1 - \exp(-h\omega/(k\theta))] d\omega \right\}$$

где N – число элементарных ячеек. Вследствие принятого допущения функция распределения $\varphi(\omega)$ может зависеть только от деформации тела. Благодаря этому с помощью формулы Гельмгольца $U = F - \theta(\partial F/\partial\theta)_E$ довольно просто вычисляется внутренняя энергия, а затем и теплоемкость тела:

$$C_E = Nk \int_0^{\infty} \exp(h\omega/(k\theta)) [\exp(h\omega/(k\theta)) - 1]^{-2} (h\omega/(k\theta))^2 \varphi(\omega) d\omega$$

В принципе функция распределения частот $\varphi(\omega)$ может быть определена по экспериментальным данным для температурной зависимости теплоемкости. Однако, как показано в [12], получаемое таким образом решение является неустойчивым: малые неточности в значениях теплоемкости могут сильно видоизменить $\varphi(\omega)$. Поэтому при расчете теплоемкости исходят из модельных представлений. К примеру, в модели Эйнштейна принимается

$$\varphi(\omega) = \beta_E \delta(\omega - \omega_E) \tag{4.2}$$

где β_E, ω_E – зависящие от деформации параметры, $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака. Значение $\beta_E = 3n$ легко устанавливается из условия нормировки [11]

$$\int_0^{\infty} \varphi(\omega) d\omega = 3n \tag{4.3}$$

где n – число атомов (для одноатомных кристаллов) в элементарной ячейке. В результате получается

$$C_E = 3Nnk [(z^2 e^z)/(e^z - 1)^2]_{z = \theta_E/\theta} \tag{4.4}$$

где $\theta_E = h\omega_E/k$ – характеристическая температура Эйнштейна.

В модели Дебая функция распределения имеет непрерывный спектр:

$$\varphi(\omega) = \begin{cases} \beta_D \omega^2 & \text{при } \omega \leq \omega_D \\ 0 & \text{при } \omega > \omega_D \end{cases} \tag{4.5}$$

Из условия нормировки (4.3) вытекает, что $\beta_D = 9n/\omega_D^3$. Поэтому

$$C_E = 9Nnk (\theta/\theta_D)^3 \int_0^{\theta_D/\theta} e^z z^4 (e^z - 1)^{-2} dz \tag{4.6}$$

где $\theta_D = h\omega_D/k$ – характеристическая температура Дебая. Известны и другие зависимости для функции распределения частот, предполагающие сочетание непрерывного и дискретного спектров [11]. Однако, благодаря своей простоте, широкое распространение

ние нашла модель Дебая, которая лучше, чем модель Эйнштейна, описывает поведение теплоемкости при низких температурах.

Обычно в статистической физике рассматриваются деформации всестороннего сжатия (расширения), а тело полагается квазизотропным. При этих упрощениях для температуры Дебая получается зависимость [9, 11]:

$$\theta_D = (\hbar \bar{a}/k)(18\pi^2 Nn/V)^{\frac{1}{3}} \quad (4.7)$$

$$\bar{a} = (a_l^{-3} + 2a_t^{-3})^{-\frac{1}{3}}, \quad a_l = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}, \quad a_t = \sqrt{\mu/\rho} \quad (4.8)$$

где V – объем тела, \bar{a} – средняя скорость звука, a_l , a_t – скорости продольной и (двух различно поляризованных) поперечных звуковых волн соответственно. Учет анизотропии упругих свойств, отражающей тип кристаллической решетки и/или вызванной деформацией тела, приводит к той же формуле (4.7), но с более сложным выражением для усредненной (по всем направлениям) скорости \bar{a} (см., например, [13] вместе с [14]). Однако для качественного анализа достаточно формул (4.7), (4.8).

В выражениях (4.8) упругие постоянные λ , μ (а вслед за ними и характеристическая температура θ_D) не должны явным образом зависеть от температуры, ибо в противном случае ее изменения сказывались бы на функции распределения (4.5). Значит, ввиду общих соотношений (3.18), (3.19) формула (4.6) совместно с формулой (4.7) строго применима лишь вблизи нуля абсолютной температуры. К такому же заключению приводят расчеты температуры Дебая по опытным данным для теплоемкости и упругих постоянных различных кристаллических тел [13]. Если же отказаться от формулы (4.7) и ограничиться интерполяционной формулой (4.6) с неопределенной (как в теории Эйнштейна) характеристической температурой, то тогда использование зависимости (4.6) будет правомерным во всем интервале температур.

5. Сопоставление теоретических и опытных данных. В настоящее время наиболее исследованными являются термомеханические свойства поликристаллического алюминия. Согласно опытным данным при изменении температуры от нуля до 600 К модуль растяжения и модуль сдвига уменьшаются примерно на 25% [15]. С другой стороны, при $\theta_D = 0.75\theta_E$ значения теплоемкости, вычисляемые по формулам Эйнштейна (4.4) и Дебая (4.6), совпадают между собой практически всюду, кроме узкой области низких температур [11]. Такое совпадение, несмотря на существенное отличие зависимостей (4.2) и (4.5), указывает на то, что тепловые свойства кристаллической решетки нечувствительны к виду функции распределения частот. Поэтому интерполяционная формула Дебая (4.6) должна быть приемлемым приближением.

Положим температуру Дебая θ_D независимой явно от температуры. Тогда для удельной теплоемкости металлов можно записать выражение

$$c = (\gamma_e \theta/M)(\rho_1/\rho)^{2/3} + 9(R/M)(\theta/\theta_D)^3 \int_0^{\theta_D/\theta} z^4 e^z (e^z - 1)^{-2} dz$$

где γ_e – электронная постоянная при нулевом давлении окружающей среды, M – молекулярный вес, R – универсальная газовая постоянная. Первое слагаемое справа учитывает вклад электронов проводимости, второе слагаемое характеризует теплоемкость решетки [9, 16]. Следует отметить, что теплоемкость электронов крайне мала, она существенна только при низких температурах.

Используя опытные данные для изобарной теплоемкости алюминия [5], стандартным методом [16] нетрудно определить значения электронной постоянной $\bar{\gamma} = \gamma_e(\rho_1/\bar{\rho})^{2/3}$.

и температуры Дебая $\bar{\theta}_D$ при $\theta = 0$ К и $p = p_{\text{atm}}$ (p_{atm} – атмосферное давление): $\bar{\gamma} = 0.0533$ Дж/(кмоль · К²), $\bar{\theta}_D = 374.3$ К, где ρ_1 – подлежащая определению плотность алюминия при $\theta = 0$ К и $p = 0$, $\bar{\rho}$ – плотность алюминия при $\theta = 0$ К и $p = p_{\text{atm}}$, опытное значение которой содержится, например, в [15].

Так как известные экспериментальные данные о зависимости модулей упругости и изобарной теплоемкости от температуры, как правило, приводятся для атмосферного давления [5, 15], при обработке опытных данных удобно представить температуру Дебая в следующем виде:

$$\theta_D = \left[\bar{\theta}_D + a(\rho - \bar{\rho}) + \frac{1}{2}b(\rho - \bar{\rho})^2 \right] + rI_1(\boldsymbol{\epsilon}_2) + \frac{1}{2}[lI_1^2(\boldsymbol{\epsilon}_2) + 2mI_1(\boldsymbol{\epsilon}_2^2)] + \frac{1}{6}[n_1I_1^3(\boldsymbol{\epsilon}_2) + 6n_2I_1(\boldsymbol{\epsilon}_2)I_1(\boldsymbol{\epsilon}_2^2) + 8n_3I_1(\boldsymbol{\epsilon}_2^3)] \quad (5.1)$$

Здесь $\rho = \rho_2 / \sqrt{I_3(\mathbf{I} + 2\boldsymbol{\epsilon}_2)}$ – плотность в актуальной конфигурации κ ; $a, b, r, l, m, n_1, n_2, n_3$ – подлежащие определению константы (подгоночные параметры); $\boldsymbol{\epsilon}_2 = (\mathbf{C}_2 - \mathbf{I})/2$ – тензор конечной деформации по отношению к неискаженной конфигурации κ_2 (фиг. 1). Инварианты тензора $\boldsymbol{\epsilon}_2$ легко выражаются через инварианты тензора \mathbf{C}_2 , которые, в свою очередь, равны инвариантам тензора \mathbf{B}_2 . При желании по формулам (3.9) инварианты тензора \mathbf{B}_2 можно представить через инварианты тензора \mathbf{B}_1 . Если в формуле (5.1) положить $\boldsymbol{\epsilon}_2 = 0$, то оставшийся член определит температуру Дебая в конфигурации κ_2 , находящейся под гидростатическим давлением. Если дополнительно принять $\rho = \rho_1$, то для температуры Дебая $(\theta_D)_1$ в естественной конфигурации κ_1 получится выражение $(\theta_D)_1 = \bar{\theta}_D + a(\rho_1 - \bar{\rho}) + (b/2)(\rho_1 - \bar{\rho})^2$.

Наконец, при моделировании гиперупругой составляющей внутренней энергии алюминия можно воспользоваться потенциалом Мурнагана [1]:

$$\rho_1 u_h = \frac{1}{2}[\lambda_0 I_1^2(\boldsymbol{\epsilon}_1) + 2\mu_0 I_1(\boldsymbol{\epsilon}_1^2)] + \frac{1}{6}[v_1 I_1^3(\boldsymbol{\epsilon}_1) + 6v_2 I_1(\boldsymbol{\epsilon}_1)I_1(\boldsymbol{\epsilon}_1^2) + 8v_3 I_1(\boldsymbol{\epsilon}_1^3)] \quad (5.2)$$

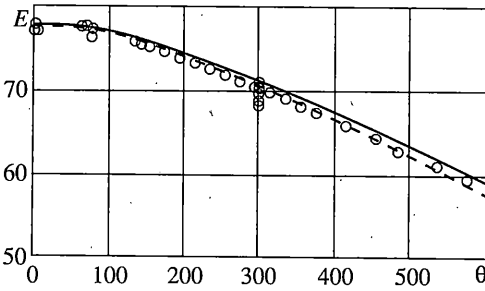
в котором λ_0, μ_0 – постоянные Ламе второго порядка; v_1, v_2, v_3 – постоянные Ламе третьего порядка; $\boldsymbol{\epsilon}_1$ – тензор конечной деформации по отношению к естественной конфигурации κ_1 . Пять постоянных Ламе второго и третьего порядка служат подгоночными параметрами и подлежат определению.

Как уже отмечалось со ссылкой на работу [12], алгоритм вычисления (по опытным данным) calorиметрических постоянных, определяющих температуру Дебая (5.1), является неустойчивым. Поэтому их определение целесообразно отделить от определения постоянных Ламе.

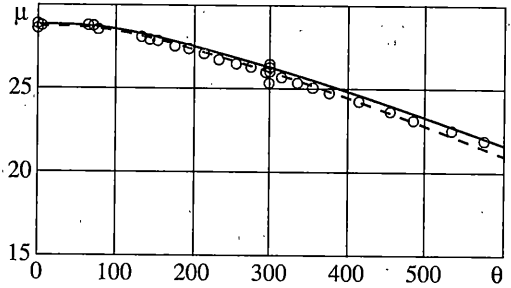
Чтобы найти первые шесть констант (плотность алюминия в естественной конфигурации ρ_1 , постоянные Ламе $\lambda_0, \mu_0, v_1, v_2, v_3$) использовались опытные данные для плотности, модулей растяжения, сдвига и объемного сжатия при $\theta = 0$ К, $p = p_{\text{atm}}$ [15], а также значения модулей растяжения и объемного сжатия при $\theta = 0$ К, $p_{\text{max}} = 4.5$ ГПа, рассчитываемые по формулам

$$E(\theta, p) = E(\theta, p_{\text{atm}}) + (p - p_{\text{atm}}) \frac{\partial E(\theta, p_{\text{atm}})}{\partial p}, \quad K(\theta, p) = K(\theta, p_{\text{atm}}) + (p - p_{\text{atm}}) \frac{\partial K(\theta, p_{\text{atm}})}{\partial p}$$

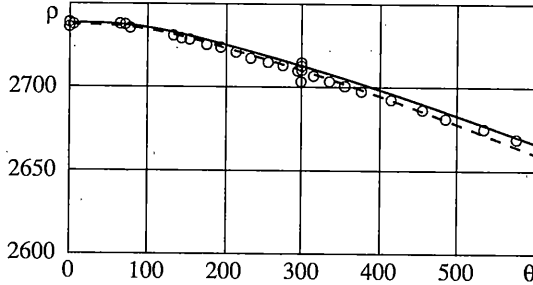
в предположении о независимости от температуры входящих в них производных по давлению. Значение плотности для наибольшего давления p_{max} , при котором проводи-



Фиг. 2



Фиг. 3



Фиг. 4

лись экспериментальные исследования по сжимаемости алюминия, определялось по формуле Мурнагана [15]:

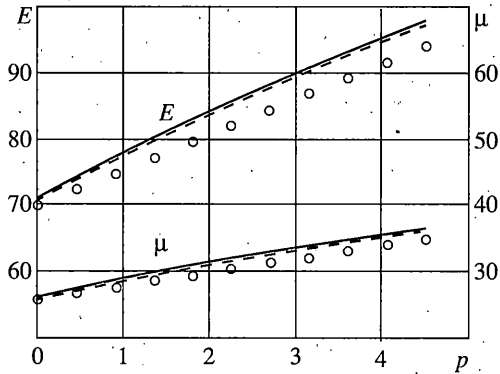
$$p = p_{\text{atm}} + [K/(\partial K/\partial p)][(\rho/\rho_1)^{\partial K/\partial \rho} - 1]$$

В качестве ограничений брались условия $\tau = -p_{\text{atm}}$ и $\tau = -p_{\text{max}}$, обеспечивающие равенство свободного члена (3.14) и соответствующих значений давления окружающей среды. В результате было получено: $\rho_1 = 2.735170783531 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, $\lambda_0 = 67.32494783431 \text{ ГПа}$, $\mu_0 = 28.8517777368 \text{ ГПа}$, $\nu_1 = -3.225112827276 \text{ кПа}$, $\nu_2 = -156.2541378702 \text{ ГПа}$, $\nu_3 = -116.2772997979 \text{ ГПа}$.

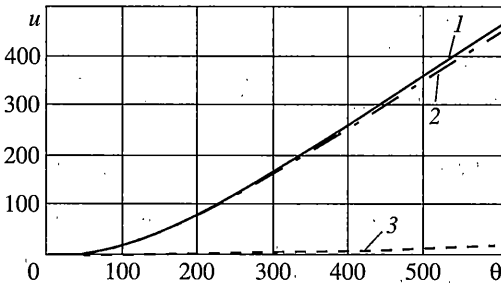
По опытным данным для изохорной теплоемкости¹, модулей растяжения и сдвига при $\theta = 298 \text{ К}$, $\theta = 600 \text{ К}$ и $p = p_{\text{atm}}$ [15], а также условиям $\tau = -p_{\text{atm}}$ при $\theta = 298 \text{ К}$, $\theta = 600 \text{ К}$ были найдены следующие значения calorimetric constants: $a = 0.324270690407 \text{ К} \cdot \text{м}^3/\text{кг}$, $b = 1.265584623292 \cdot 10^{-4} \text{ К} \cdot \text{м}^6/\text{кг}^2$, $r = 5.557449469368 \cdot 10^{-4} \text{ К}$, $l = 1.389080272604 \cdot 10^{-6} \text{ К}$, $m = -5.557262224664 \cdot 10^6 \text{ К}$, $n_1 = 6.695123262125 \cdot 10^{-2} \text{ К}$, $n_2 = 8.975992993267 \cdot 10^{-8} \text{ К}$, $n_3 = 3.659873626780 \cdot 10^6 \text{ К}$.

Использованные опытные данные и полученные теоретические кривые для модуля растяжения, модуля сдвига и их гиперупругих составляющих приведены на фиг. 2, 3 (E , μ [ГПа]). Погрешность полных значений (сплошные кривые) не превысила 1.5%. Различие между полными и гиперупругими (штриховые кривые) величинами составило менее 1% и 3% при температурах 298 К и 600 К соответственно. Это значит, что в широком диапазоне температур определяющими являются гиперупругие свойства алюминия. (Светлые точки на фиг. 2, 3 соответствуют опытным данным из [15]).

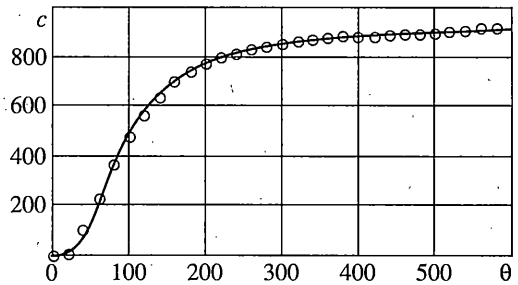
¹ Изохорная теплоемкость рассчитывалась по формуле $c = c_p - 9\alpha^2 K\theta/\rho$.



Фиг. 5



Фиг. 6



Фиг. 7

Аналогичный вывод следует из анализа поведения модуля объемного сжатия, модуля Пуассона и постоянной Ламе λ , однозначно определяемым по модулям растяжения и сдвига. Судя по ним, во всем диапазоне температур алюминий гиперупруг фактически на 99%.

Изменение гиперупругих составляющих с ростом температуры обусловлено тем, что в соответствии с уравнением $\tau(\theta, \rho) = -p_{\text{atm}}$ между плотностью ρ [кг/м³] и температурой θ [К] существует однозначная зависимость (фиг. 4). Светлые точки соответствуют опытным данным из [15].

С точностью до 1% заключение о гиперупругости алюминия подтверждается изменениями модулей растяжения и сдвига с ростом давления (фиг. 5, обозначения как на фиг. 2, 3). О том же самом свидетельствуют модули объемного сжатия и Пуассона.

Несколько неожиданным является поведение гиперупругой (кривая 3) составляющей внутренней энергии u [кДж/кг] (фиг. 6). При температурах 298 К и 600 К ее доля от полной энергии (кривая 1) составляет всего 1.5% и 4% соответственно. Получается так, что наибольший вклад во внутреннюю энергию алюминия дает термоупругая (кривая 2) энергия (напрямую связанная с тепловым движением атомов), тогда как наибольший вклад в упругие свойства алюминия вносит гиперупругая энергия (обусловленная взаимодействием атомов кристаллической решетки).

Совпадение теоретических и экспериментальных (светлые точки) данных [5, 6] по изохорной теплоемкости c [Дж/(кг · К)] является удовлетворительным (фиг. 7). Следовательно, интерполяционная формула Дебая (4.6) служит хорошим приближением.

Замечание. К сожалению, аналогичное заключение нельзя сделать в отношении формулы (4.7), хотя входящие в нее (через соотношения (4.8)) величины λ , μ с высокой точностью определяются своими гиперупругими составляющими (3.15), (3.16). Применение выражений (4.7), (5.2) приводит к резкому возрастанию погрешности везде, кроме узкой области низких температур. Более того, при атмосферном давлении и температурах, чуть больших 320 К, алюминий как бы “перестает существовать”, ибо уравнение $\tau(\theta, \rho) = -p$ уже не имеет вещественных решений для плотности. Поэтому в рассмотренном случае формула (4.7) пригодна исключительно для низких температур. Чтобы расширить температурный интервал, необходим учет постоянных Ламе четвертого порядка и выше, либо требуется другое, более точное выражение для температуры Дебая.

6. Выводы. Термоупругие свойства материалов однозначно определяются гиперупругой составляющей внутренней энергии и удельной теплоемкостью при постоянной деформации. Для поликристаллического алюминия упругий потенциал Мурнагана и интерполяционная формула Дебая являются приемлемыми приближениями к истинным зависимостям указанных величин.

Во всем экспериментально исследованном диапазоне температур и давлений поликристаллический алюминий проявляет гиперупругие свойства с высокой точностью (от 97 до 99%). Поэтому, если надлежащим образом учесть температурные изменения плотности, то расчеты по классической и нелинейной теории упругости дадут незначительную погрешность.

Пользуюсь случаем выразить благодарность И.А. Кийко за полезное обсуждение работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лурье А.И. Нелинейная теория упругости. М.: Наука, 1980. 512 с.
2. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. М.: Мир, 1975. 592 с.
3. Победря Б.Е. Модели механики сплошной среды // Изв. РАН. МТТ. 2000. № 3. С. 47–59.
4. Бленд Д. Нелинейная динамическая теория упругости. М.: Мир, 1972. 183 с.
5. Кожеевников И.Г., Новицкий Л.А. Теплофизические свойства материалов при низких температурах. М.: Машиностроение, 1982. 328 с.
6. Физические величины: Справочник. / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
7. Stewart G.P. Measurement of Low-Temperature Specific Heat // Rev. Sci. Instrum. 1983. V. 64. № 1. P. 1–11.
8. Корнеев С.А. Применение метода Клаузиуса – Кельвина к анализу локально-неравновесных процессов // Изв. РАН. Энергетика. 2001. № 4. С. 106–116.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Статистическая физика. Т. 5. Ч. 1. М.: Наука, 1976. 584 с.
10. Ильюшин А.А. Механика сплошной среды. М.: Изд-во МГУ, 1978. 287 с.
11. Борн М., Хуан К. Динамическая теория кристаллических решеток. М.: Изд-во иностр. лит., 1958. 488 с.
12. Лифшиц И.М. Об определении энергетического спектра Бозе-системы по ее теплоемкости // ЖЭТФ. 1954. Т. 26. № 5. С. 551–556.
13. Алерс Дж. Использование измерений скорости звука для определения температуры Дебая в твердых телах // Физическая акустика. Динамика решетки. М.: Мир, 1968. Т. 3. Ч. Б. С. 13–61.
14. Зоммерфельд А. Механика деформируемых сред. М.: Изд-во иностр. лит., 1954. 486 с.
15. Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Киев: Наук. думка, 1982. 287.
16. Киттель Ч. Статистическая термодинамика. М.: Наука, 1977. 336 с.