

УДК 539.319 : 536.424

© 1991

О НАПРЯЖЕННОМ СОСТОЯНИИ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОЙ ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ ПРОСЛОЙКИ ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ

Ю. Я. Богуславский

На основе теории упругопластических деформаций рассмотрен вопрос о распределении давления в веществе при фазовом переходе, сжимаемом плоскопараллельными жесткими наковальнями. Обсуждается механизм образования экспериментально наблюдаемой аномалии в виде ступеньки на зависимости давления от радиуса в районе межфазной границы. Определен размер ступеньки. Показано, что аномалия в виде ступеньки и возможные другие аномалии вызваны скачком объема при фазовом переходе. Проводится сравнение с экспериментом.

В работе [1] с помощью рубиновых датчиков исследовалось распределение давления в образцах хлорида калия, сжимаемого плоскопараллельными алмазными наковальнями, и его особенности при полиморфном превращении, в частности, в области межфазных границ. Тщательные измерения в районе межфазной границы показали, что в этой области на фоне монотонного изменения давления с изменением расстояния наблюдается характерная аномалия в виде ступеньки. Величина давления на ступеньке равна давлению равновесного фазового превращения. В дальнейшем, в работе [2], аналогичные аномалии на межфазных границах были получены в халькогенидах свинца в системе закругленный конус—плоскость и построены фазовые диаграммы этих веществ.

В настоящей работе делается попытка выяснить причину появления и механизм формирования ступеньки и определить ее размер, а также показано, что возможны другие аномалии зависимости давления от радиуса осесимметричной прослойки при фазовом переходе. Пусть осесимметричная прослойка (диск) сжимается плоскопараллельными жесткими наковальнями с силой F . Диаметр наковален и диска $2a$, толщина диска $2h$. Диск тонкий $x=h/a \ll 1$. Введем цилиндрические координаты $\rho=r/a$, φ , $\xi=z/a$, z отсчитывается от срединной плоскости диска. Касательные напряжения $\tau_{r\rho}=\tau_{\varphi z}=0$. Дифференциальные уравнения равновесия и условие текучести Мизеса запишем в виде [3]

$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial \rho} + \frac{\sigma_r - \sigma_\varphi}{\rho} + \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\partial \tau}{\partial \xi} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \tau}{\partial \rho} + \frac{\tau}{\rho} + \sqrt{3} \frac{\partial \sigma_z}{\partial \xi} = 0, \quad (2)$$

$$(\sigma_r - \sigma_\varphi)^2 + (\sigma_\varphi - \sigma_z)^2 + (\sigma_z - \sigma_r)^2 + 2\tau^2 = 2, \quad (3)$$

$$\sigma_r \sim \frac{\sigma_r}{\sigma_s}, \quad \sigma_\varphi \sim \frac{\sigma_\varphi}{\sigma_s}, \quad \sigma_z \sim \frac{\sigma_z}{\sigma_s}, \quad \tau \sim \frac{\tau_{rz}}{\sigma_s}$$

— безразмерные напряжения, $\sigma_s = \sqrt{3}\tau_s$ — предел текучести при сжатии. На боковой поверхности диска выполняется условие

$$\sigma_r|_{\rho=1} = 0. \quad (4)$$

Сумма напряжений σ_z равна сжимающей силе

$$2\sigma_s \int_0^1 \sigma_z \rho d\rho = -\frac{F}{\pi a^2} = -P. \quad (5)$$

При решении задачи будем основываться на уравнениях теории упруго-пластических деформаций. (Уравнения теории упругопластических деформаций суть уравнения нелинейно-упругого тела). Хорошо известно, что при пластическом течении вещество ведет себя как несжимаемое, т. е. коэффициент Пуассона диска в пластическом состоянии можно положить равным 0.5. Уравнение несжимаемости имеет вид

$$\frac{\partial u}{\partial \rho} + \frac{u}{\rho} + \frac{\partial w}{\partial \xi} = 0, \quad (6)$$

где $u=u_r/a$, $w=u_z/a$ — безразмерные смещения. Остальные соотношения упругопластических деформаций запишем в стандартном виде [3]

$$\frac{\frac{\partial u}{\partial \rho} - \frac{u}{\rho}}{\sigma_r - \sigma_\varphi} = \frac{\frac{u}{\rho} - \frac{\partial w}{\partial \xi}}{\sigma_\varphi - \sigma_z} = \frac{\frac{\partial w}{\partial \xi} - \frac{\partial u}{\partial \rho}}{\sigma_z - \sigma_r} = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{\partial w}{\partial \rho}}{\tau}. \quad (7)$$

Задача о сжатии осесимметричной тонкой прослойки, не претерпевающей фазового перехода, с учетом сжимаемости рассматривалась с помощью численных методов в [3]. Однако выпишем в приближении несжимаемости простые аналитические формулы, которые хорошо согласуются с результатом [3] и необходимы при дальнейшем рассмотрении вопроса о напряженном состоянии в веществе, испытавшем фазовый переход. Сечения $\xi=0$, $\xi=\pm z$ в процессе сжатия остаются плоскими и, следовательно, $w=w(\xi)$. Обозначая $\partial w/\partial \xi = -2C(\xi)$, из уравнения (6) получим

$$u = C(\xi) \rho. \quad (8)$$

Следовательно, из (7) и (3) будем иметь

$$\sigma_r = \sigma_\varphi, \quad \sigma_z - \sigma_r = -\sqrt{1 - \tau^2}. \quad (9)$$

Следуя [3], решение запишем в виде

$$\tau = R(\rho) \frac{\xi}{z}. \quad (10)$$

Подставляя (8), (10) в (7), с помощью (3) при $\xi=z$ найдем

$$R = -\frac{C_1 \rho}{2\sqrt{3} \sqrt{1 + \frac{1}{12} C_1^2 \rho^2}}, \quad (11)$$

где $C_1 = C'(z)/C(z)$. Подставляя (10) и (11) в (1), с помощью (4) получим для размерной величины напряжения

$$\sigma_r = \frac{2\sigma_s}{zC_1} \left(\sqrt{1 + \frac{C_1^2}{12} \rho^2} - \sqrt{1 + \frac{C_1^2}{12}} \right). \quad (12)$$

Поскольку напряжение σ_z велико и четно по ξ , то можно считать, что σ_z не зависит от ξ . Из (9) следует

$$\sigma_z = \sigma_r - \frac{\sigma_s}{\sqrt{1 + \frac{C_1^2}{12} \rho^2}}. \quad (13)$$

Подставляя (13), (12) в (5), получим выражение для определения константы C_1

$$\begin{aligned} & \frac{16}{zC_1^3} \left(V \sqrt{\left(1 + \frac{C_1^2}{12} \right)^3} - 1 \right) - \frac{2}{zC_1} V \sqrt{1 + \frac{C_1^2}{12}} - \\ & - \frac{24}{C_1^2} \left(V \sqrt{1 + \frac{C_1^2}{12}} - 1 \right) = - \frac{P}{z_s}. \end{aligned} \quad (14)$$

Рассмотрим два предельных случая.

1) $C_1^2/12 \ll 1$. При этом из (14) следует $C_1 \approx 24z(P/z_s - 1)$ и для напряжений

$$\sigma_r = \sigma_\varphi = 2(P - z_s)(\rho^2 - 1), \quad (15)$$

$$\sigma_z = \sigma_r - z_s. \quad (16)$$

2) $C_1 \rightarrow \infty$ (развитая пластическая деформация). Из (14) получим $P = z_s/3\sqrt{3}z$, а с учетом (11)–(13)

$$\sigma_r = \sigma_\varphi = \sigma_z = 3P(\rho - 1). \quad (17)$$

Рассмотрим теперь осесимметрическую прослойку, претерпевшую фазовый переход, с пределом текучести в фазе низкого давления σ_s^I , а в фазе высокого давления σ_s^{II} . Пусть при заданной температуре T_Π равновесное давление перехода есть

$$\sigma_r = -P_\Pi. \quad (18)$$

Обозначим равновесный радиус, определяющий межфазную границу без учета скачка объема при фазовом переходе, через ρ_{20} . При заданном P радиус ρ_{20} в общем случае определяется из (12), (14) и (18).

При $C_1^2/12 \ll 1$ из (15), (18) получим

$$\rho_{20} = \left(1 - \frac{P_\Pi}{2(P - \sigma_s^I)} \right)^{1/2}, \quad (19)$$

т. е. без учета скачка объема область $0 \leq \rho \leq \rho_{20}$ занимает фаза высокого давления, а область $\rho_{20} \leq \rho \leq 1$ фаза низкого давления. Однако реальный радиус ρ_2 , определяющий межфазную границу в состоянии термодинамического равновесия, с учетом скачка объема при фазовом переходе есть

$$\rho_2 = \rho_{20} \left(1 - \frac{\delta V}{3V_0} \right), \quad (20)$$

где $\delta V/V_0$ — скачок объема при фазовом переходе. Следовательно, фаза высокого давления (фаза II) займет область $0 \leq \rho \leq \rho_2$, фаза низкого давления (фаза I) область $\rho_2 \leq \rho \leq 1$. Скачок объема приведет к тому, что в фазе I вещества начнет выжиматься по обе стороны от некоторой нейтральной окружности радиуса ρ_1 , что и должно вызвать аномальное поведение давления вблизи межфазной границы. Для определения зависимости давления от радиуса диска необходимо решить систему уравнений (1)–(7) в фазах I, II. Решение в обеих фазах пишется в виде (10). В фазе I из уравнения (6), полагая $\partial w/\partial \xi = -2\tilde{C}(\xi)$, получим

$$u = \tilde{C}(\xi)\rho \left(1 - \frac{\rho_1^2}{\rho^2} \right). \quad (21)$$

Подставляя (21) в (7), с помощью (3) найдем при $\xi = z$ для фазы I

$$R_I = - \frac{\tilde{C}_1\rho(1 - \rho_1^2/\rho^2)}{\sqrt{12 + 4\frac{\rho_1^4}{\rho^4} + \tilde{C}_1^2\rho^2 \left(1 - \frac{\rho_1^2}{\rho^2} \right)^2}}, \quad (22)$$

$$\sigma_r^I - \sigma_\varphi^I = \frac{4}{\sqrt{3}} \frac{\rho_1^2}{\rho^2} \frac{1}{\sqrt{12 + 4\frac{\rho_1^4}{\rho^4} + \tilde{C}_1^2\rho^2 \left(1 - \frac{\rho_1^2}{\rho^2} \right)^2}}, \quad (23)$$

$$\sigma_z^I - \sigma_r^I = -\frac{2}{\sqrt{3}} \left(3 + \frac{\rho_1^2}{\rho^2} \right) \frac{1}{\sqrt{12 + 4 \frac{\rho_1^4}{\rho^4} + \tilde{C}_1^2 \rho^2 \left(1 - \frac{\rho_1^2}{\rho^2} \right)^2}}, \quad (24)$$

где $\tilde{C}_1 = \tilde{C}'(\xi)/\tilde{C}(\xi)$. Для фазы II справедливы выражения (9), (11). На межфазной границе должно выполняться условие

$$\sigma_r^{II}|_{\rho=\rho_2} = \sigma_r^I|_{\rho=\rho_2} = -P_{II}. \quad (25)$$

Подставляя (10), (11) в (1), получим в интервале $0 \leq \rho \leq \rho_2$ для размерных напряжений

$$\sigma_r^{II} = \frac{\sigma_s^{II}}{\sqrt{3} z C_1} (\sqrt{12 + C_1^2 \rho^2} - \sqrt{12 + C_1^2 \rho_2^2}) - P_{II}, \quad (26)$$

$$\sigma_z^{II} = \sigma_r^{II} - \frac{\sigma_s^{II}}{\sqrt{1 + \frac{C_1^2}{12} \rho^2}}. \quad (27)$$

При $C_1^2/12 \ll 1$ из (26), (27) следует

$$\sigma_r^{II} = \frac{\sigma_s^{II} C_1}{12z} (\rho^2 - \rho_2^2) - P_{II}, \quad (28)$$

$$\sigma_z^{II} = \sigma_r^{II} - \sigma_s^{II}. \quad (29)$$

Простые формулы для напряжений в фазе I могут быть получены в случае слаборазвитого пластического течения. Будем считать, что в (22)–(24) $(\tilde{C}_1^2/12)\rho^2 (1 - \rho_1^2/\rho^2)^2 \ll 1$, и подставим (10), (22), (23) в (1). С учетом граничных условий (4), (25) в интервале $\rho_2 \leq \rho \leq 1$ получим выражения для размерных напряжений в фазе I

$$\sigma_r = -\frac{\tilde{C}_1 \sigma_s^I}{12z} (1 - \rho^2) - \frac{\tilde{C}_1 \rho_1^2 \sigma_s^I}{6z} \ln \rho + \frac{\sigma_s^I}{3} \rho_1^2 \left(\frac{1}{\rho^2} - 1 \right), \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \tilde{C}_1 &= \frac{12z \left[P_{II} + \frac{\sigma_s^I \rho_1^2}{3} \left(\frac{1}{\rho_2^2} - 1 \right) \right]}{\sigma_s^I [1 - \rho_2^2 + 2\rho_2^2 \ln \rho_2]}, \\ \sigma_z &= \sigma_r - \sigma_s^I \left(1 + \frac{1}{3} \frac{\rho_1^2}{\rho^2} \right). \end{aligned} \quad (31)$$

Определим теперь положение нейтральной окружности ρ_1 . Смещение внутренней границы фазы I к центру, вызванное скачком объема, определяется из (21) и равно

$$u = \tilde{C}(\xi) \rho_{20} \left(1 - \frac{\rho_1^2}{\rho_{20}^2} \right).$$

В силу сохранения сплошности с помощью (20) найдем

$$\rho_1 = \rho_{20} \left(1 + \frac{\delta V}{3V_0 \tilde{C}(\xi)} \right)^{1/2}.$$

Величина

$$\tilde{C}(\xi) \simeq \tilde{C}(\xi) = \frac{P}{E_k},$$

где E_k — местный модуль упругости [3]. В условиях пластического течения $E_k \sim \sigma_s$ и, следовательно, $\tilde{C}(\xi) \gg 1$. Так как в твердых телах $\delta V/V_0 < 1$, то с хорошей точностью во всех формах можно положить $\rho_1 = \rho_{20}$. (В случае упругих деформаций $E_k \simeq E$ — модулю Юнга и может оказаться, что для не очень малых величин $\delta V/V_0$ значение $\rho_1 > 1$. Это означает, что фазовый переход не реализуется и вещество будет находиться в метастабильном состоянии. Такая ситуация наблюдается в KCl до сдвига [1]).

Формулы (28)–(31) являются решениями системы уравнений (1)–(7). Неизвестная константа C_1 определяется из условия (5), которое следует записать в виде

$$2 \left(\int_0^{\rho_2} \sigma_s^{II} \rho d\rho + \int_{\rho_2}^1 \sigma_s^{I} \rho d\rho \right) = -P. \quad (32)$$

Подставляя (28)–(31) в (32), получим выражение для определения C_1

$$\begin{aligned} & \frac{16\sigma_s^{II}}{zC_1^3} \left(\left(1 + \frac{C_1^2 \rho_2^2}{12} \right)^{3/2} - 1 \right) - \frac{2\sigma_s^{II}}{zC_1} \sqrt{1 + \frac{C_1^2}{12} \rho_2^2} \rho_2^2 - \frac{24\sigma_s^{II}}{C_1^2} \left(\sqrt{1 + \frac{C_1^2 \rho_2^2}{12}} - 1 \right) - \\ & - P_{II} \rho_2^2 - \frac{\tilde{C}_1 \sigma_s^I}{12z} \left(1 - \rho_2^2 - \frac{1}{2} (1 - \rho_2^4) - 2\rho_1^2 \rho_2^2 \ln \rho_2 - \rho_1^2 (1 - \rho_2^2) \right) + \\ & + \sigma_s^I \left(\frac{1}{3} \rho_1^2 - 1 \right) (1 - \rho_2^2) = -P. \end{aligned} \quad (33)$$

При $C_1^2 \rho_2^2 / 12 \ll 1$ соотношение (32) упрощается

$$C_1 = \frac{24z \left[P - (P_{II} + \sigma_s^{II}) \rho_2^2 - \frac{\tilde{C}_1 \sigma_s^I}{12z} \left(1 - \rho_2^2 - \frac{1}{2} (1 - \rho_2^4) - 2\rho_1^2 \rho_2^2 \ln \rho_2 - \rho_1^2 \right) \times (1 - \rho_2^2) - \sigma_s^I \left(1 - \frac{1}{3} \rho_1^2 \right) (1 - \rho_2^2) \right]}{\sigma_s^{II} \rho_2^4}. \quad (34)$$

Так как выражение (30) имеет максимум и $-\sigma_r, m > P_{II}$, то решение (26)–(31), (33) является метастабильным. Анализ условия нагружения (34) показывает, что фазы I и II могут существовать при выполнении неравенства $P_{II} < P$. При этом давление в центре диска в случае значительного скачка объема заметно уменьшится в сравнении с величиной давления в отсутствие фазового перехода. Если выполняется обратное неравенство $P_{II} > P$, то давление во внутренней области $0 \leq \rho \leq \rho_2$ меньше P_{II} и, следовательно, фаза II не образуется. С помощью (30) легко установить область метастабильности

$$\Delta = 2(\rho_m - \rho_2) = 2\left(\rho_m - \rho_1 + \frac{\rho_{20}}{3} \frac{\delta V}{V_0}\right), \quad (35)$$

где ρ_m определяется из условия $\partial\sigma_r/\partial\rho|_{\rho=\rho_m}=0$, которое приводит к биквадратному уравнению

$$\rho_m^4 - \rho_1^2 \rho_m^2 - \frac{4 \times \rho_1^2}{\tilde{C}_1} = 0. \quad (36)$$

Уравнение (36) всегда имеет один положительный корень

$$\rho_m = \sqrt{\frac{1}{2} \rho_1^2 + \sqrt{\frac{1}{4} \rho_1^4 + \frac{4 \times \rho_1^2}{\tilde{C}_1}}}. \quad (37)$$

При $\rho_1 \gg 4(z/\tilde{C}_1)^{1/2}$, $\rho_m \approx \rho_1$ и из (35) получим

$$\Delta = \frac{2}{3} \rho_{20} \frac{\delta V}{V_0}. \quad (38)$$

Естественно, что область метастабильного состояния (35) должна со временем срелаксировать. В результате возникает область смеси фаз размером Δ при давлении P_{II} , т. е. в районе межфазной границы образуется ступенька. Необходимо отметить, что с ростом P растет величина ρ_{20} и, следовательно, ступенька смещается дальше от центра. Однако при малых величинах $\rho_{20} \approx \rho_1 \ll 4(z/\tilde{C}_1)^{1/2}$ вклад слагаемого $2(\rho_m - \rho_1)$ в размер ступеньки, как это следует из (35), (37), значителен, а при больших значениях $\rho_{20} \approx \rho_1 \gg 4(z/\tilde{C}_1)^{1/2}$ этим слагаемым можно пренебречь и размер Δ определяется выражением (38). В обоих случаях размер ступеньки примерно оди-

наков, что качественно соответствует эксперименту [2]. В отсутствие фазового перехода $\delta V/V_0=0$, $\rho_1=0$ и, следовательно, $\Delta=0$. Из [1] имеем $\chi=-10^{-2}$, $\rho_{20}=0.5$, $a=0.4$, $\delta V/V_0 \approx 0.2$. С помощью (38) найдем $\Delta \approx 0.03$ мм, что хорошо согласуется с экспериментом. Стабильное решение (1)–(7) можно записать в следующем виде.

В области $0 \leq \rho \leq \rho_2$

$$\sigma_s^{\text{II}} = -\frac{2\sigma_s^{\text{I}}}{\chi C_1} \left(\sqrt{1 + \frac{C_1^2}{12}\rho_2^2} - \sqrt{1 + \frac{C_1^2}{12}\rho^2} \right) - P_{\text{II}}, \quad (39)$$

$$\sigma_z^{\text{II}} = \sigma_r^{\text{II}} = \frac{\sigma_s^{\text{II}}}{\sqrt{1 + \frac{C_1^2\rho^2}{12}}}. \quad (40)$$

Так как предел текучести в смеси фаз мал по сравнению с фазами I и II, то в области $\rho_2 \leq \rho \leq \rho_2 + \Delta = \rho_*$

$$\sigma_z = \sigma_r = \sigma_s = -P_{\text{II}}. \quad (41)$$

В области $\rho_* \leq \rho \leq 1$

$$\sigma_r^{\text{I}} = -\frac{P_{\text{II}}}{1-\rho_*^2}(1-\rho^2), \quad (42)$$

$$\sigma_s^{\text{I}} = \sigma_r^{\text{I}} - \sigma_s^{\text{II}}. \quad (43)$$

Условие (5) в данном случае имеет вид

$$2 \left(\int_0^{\rho_2} \sigma_z^{\text{II}} \rho d\rho + \int_{\rho_*}^1 \sigma_z^{\text{I}} \rho d\rho \right) = -P + P_{\text{II}}(\rho_*^2 - \rho_2^2). \quad (44)$$

Подставляя (39)–(43) в (44), получим выражение для определения константы C_1 при условии $C_1^2 \rho_2^2 / 12 \ll 1$

$$\frac{C_1 \sigma_s^{\text{II}} \rho_*^2}{24\chi} = P - (P_{\text{II}} + \sigma_s^{\text{II}}) \rho_2^2 - \frac{1}{2} P_{\text{II}} (1 + \rho_*^2 - 2\rho_2^2) - \sigma_s^{\text{I}} (1 - \rho_*^2). \quad (45)$$

Из (45) следует, что в отличие от метастабильного состояния фазы I и II при наличии ступеньки могут существовать при выполнении не только неравенства $P_{\text{II}} < P$, но и обратного неравенства $P_{\text{II}} > P$. Однако в последнем случае давление в центре диска несколько падает по сравнению с его значением без фазового перехода, но при той же нагрузке. (Необходимо отметить, что при развитой пластической деформации решение со ступенькой не реализуется). На основе данных работы [1] оценим максимальное значение давления при фазовом переходе в KCl в центре наковален. Имеем $P=30$ кбар, $P_{\text{II}} \approx 19$ кбар, $\delta V/V_0=0.2$, $\chi=10^{-2}$. Полагая $\sigma_s^{\text{I}} \approx \sigma_s^{\text{II}} \approx 3$ кбар, с помощью (19), (20), (45) из (39), (40) найдем $\sigma_r^{\text{II}} \approx -58$ кбар, $\sigma_z^{\text{II}} \approx -60$ кбар. Эти значения хорошо согласуются с наблюдаемым распределением давления после сдвига [1], т. е. однофазное метастабильное состояние с преобладанием одноосного напряжения σ_z до сдвига релаксирует в равновесное состояние после сдвига со значительным увеличением давления в центре диска. Такая возможность отмечалась в [4].

Список литературы

- [1] Бланк В. Д., Богуславский Ю. Я., Еремец М. И., Ицкевич Е. С., Коняев Ю. С., Широков А. М., Эстрин Э. И. // ЖЭТФ. Т. 87. № 3 (9). С. 922–926.
- [2] Бегоулев В. Б., Тимофеев Ю. А., Виноградов Б. В., Яковлев Е. Н. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 254–256.
- [3] Качанов Л. М. Основы теории пластичности. М., 1956. 320 с.
- [4] Богуславский Ю. Я. // Тез. докл. Междунар. конф. по физике и технике высоких давлений, посвященной 80-летию со дня рождения академика Л. Ф. Верещагина. Троицк, 1989. С. 36.