О ПРОЦЕССАХ ТЕПЛО- И МАССОПЕРЕНОСА В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ С МИКРОСТРУКТУРОЙ

Н.В. Камышанченко[1], М.Ю. Ковалевский[1,2], В.Т. Мацкевич[2], А.Я. Разумный[3], О.А. Самофалова[3]

[1]Белгородский государственный университет, Белгород, Россия;
[2]Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт», Харьков, Украина
E-mail: mik@kipt.kharkov.ua;
[3]Харьковский национальный университет, Харьков, Украина

Изучено взаимное влияние формы и размера неоднородной макроструктуры на процессы термо- и массопереноса в конденсированной среде. Динамика таких сред рассмотрена на том этапе эволюции, когда структура уже сформировалась и в системе достигнуто локальное равновесие. Термодинамика таких состояний описывается наряду со стандартными параметрами дополнительными физическими величинами, которые задают форму и размер протяженных структурных элементов среды. Детально рассмотрены среды с диско- и стержнеподобными дефектами. Кинетические коэффициенты, связанные с внутренней структурой, описывают новые механизмы релаксации в среде. Выяснена возможность появления новых спектров коллективных возбуждений в этих средах. Получены решения нелинейных уравнений, обобщающих уравнения Фика, в условиях различной геометрии и дана их физическая интерпретация.

PACS: 61.43.-j; 61.72.-y; 61.72.Bb

1. ВВЕДЕНИЕ

Реальные металлы и сплавы обладают различного рода дефектами структурного состояния, плотность и разновидность которых зависит от величины внешнего энергетического воздействия и внутреннего состояния среды. Радиационное излучение способствует образованию и развитию дефектов, формированию их новой объемной микро- и макроструктуры. В основе процессов и явлений радиационной повреждаемости материалов лежит создание точечных дефектов. Вследствие пересыщения точечными дефектами, их высокой подвижности, взаимодействия друг с другом и с другими несовершенствами кристаллического строения в облученном материале и возникают линейные, плоские и объемные макродефекты различных формы и размера.

В процессе облучения твердого тела происходит не только накопление, но и обжиг радиационных дефектов, приводящих как к изменению их геометрических характеристик в структуре, так и объединению точечных дефектов с образованием скоплений в виде дислокационных петель, тетраэдров, дефектов упаковки пор [1]. Для описания радиационных повреждений обычно используется диффузионное приближение. Эволюционные уравнения баланса совместно с уравнениями химических реакций широко применяются в радиационной физике [2, 3, 4].

В описании радиационных повреждений твердого тела необходимо учитывать эволюцию протяженных дефектов. Изменение конфигурации и геометрических размеров таких дефектов ведет к изменению макроскопических характеристик облучаемой среды. Потеря однородности состояния твердыми растворами при радиационной обработке подтверждается рядом экспериментальных результатов. В частности, в облученных сплавах Fe–7,5Cr–35Ni, Fe–45Ni и Fe–30Mn обнаружены пространственные концентрационные неоднородности, наблюдающиеся по всему объему материала [3].

Нейтронное облучение реакторных сталей приводит к радиационному их охрупчиванию. В литературе имеются данные о влиянии радиационного облучения на стали, применяемые в ВВЭР-440 и ВВЭР-1000. Часть дефектов присутствует в этих сталях еще до облучения. К ним, в частности, относятся дископодобные дефекты. Другие дефекты – петли и шарики – до облучения отсутствуют, а после облучения возникают. При этом концентрация дефектов–шариков достигает для ВВЭР-440 $(600\ldots2000)\cdot10^{15}$ см$^{-3}$ и для ВВЭР-1000 $2\cdot10^{15}$ см$^{-3}$ [5]. Концентрация дефектов–дисков для ВВЭР-440 изменяется от $0{,}5\cdot10^{15}$ до $40\cdot10^{15}$ см$^{-3}$. Характерная концентрация дефектов–петель после облучения составляет $2\cdot10^{15}$ см$^{-3}$. Кроме того, имеют место заметные изменения размеров этих дефектов. Так в сталях ВВЭР-440 до облучения характерный размер дископодобных дефектов составляет 20 нм, а после облучения – 10 нм. После облучения характерные размеры петель для обоих типов сталей – 3…5 нм и шариков – 2…3 нм. В сталях ВВЭР-1000 заметных изменений в размерах дископодобных дефектов не происходит: до и после облучения диаметр дисков 25…40 нм. Имеются также данные в литературе о наличии стержнеподобных дефектов. Таким образом, под действием облучения происходит как возникновение новых дефектов, так и изменение формы и размера дефектов, которые присутствовали до облучения.

Изменение конфигурации и геометрических размеров дефектов ведет к изменению макроскопических характеристик облученной среды. Поэтому для адекватного теоретического описания радиационных повреждений среды необходимо учитывать эволюцию протяженных дефектов и изменение их формы и размеров. Изменение макроструктуры в объеме твердого тела, как правило, носит относительно медленный характер, поэтому геометрические характеристики таких дефектов могут быть рассмотрены как дополнительные термодинамические параметры, макроскопически полно характеризующие конденсированные среды. Такими величинами являются размеры дефектов и другие параметры, характеризующие форму макроструктуры.

Целью настоящего исследования является изучение взаимного влияния формы и размера неоднородной макроструктуры на релаксационные процессы термо- и массопереноса в конденсированной среде. Ранее в работах [10-12] показано, что возникновение и становление разнообразных пространственных структур в конденсированных средах и их самоорганизация возможна благодаря химическим превращениям с учетом процессов диффузии в таких распределенных системах. Как будет нами показано ниже, наличие внутренней структуры среды приводит к модификации динамики и появлению новых механизмов релаксации. Динамическое поведение конденсированных сред со структурой рассмотрено на том этапе эволюции, когда последняя уже сформировалась, и система находится в локально-равновесном состоянии. Термодинамика таких состояний описывается наряду со стандартными параметрами – термодинамическими силами, дополнительными физическими величинами, которые задают форму и размер протяженных структурных элементов среды. Нами детально рассмотрены среды с диско-, стержне- и шарообразными дефектами. Для стержнеподобного дефекта за исходную единицу выбрана мера длины стержня, а для дископодобных и шароподобных дефектов – диаметр диска или шара. Эти величины нами введены как определенные функции тензора дисторсии, по аналогии с рассмотренной ранее теорией жидких кристаллов [9].

2. РЕЛАКСАЦИОННЫЕ УРАВНЕНИЯ СРЕДЫ СО СТЕРЖНЕПОДОБНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

Известно, что нетривиальные скобки Пуассона (СП) для плотностей импульса, энтропии и вектора смещения имеют вид [10]:

$$\{\pi_i(\mathbf{x}),\sigma(\mathbf{x}')\} = -\sigma(\mathbf{x})\nabla_i\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}');$$

$$\{\pi_i(\mathbf{x}),\rho(\mathbf{x}')\} = -\rho(\mathbf{x})\nabla_i\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}');$$

$$\{\pi_i(x),b_{kj}(x')\} = -b_{ki}(x)\nabla_j\delta(x-x'); \qquad (1)$$

$$\{\pi_i(\mathbf{x}),\pi_j(\mathbf{x}')\} = \pi_j(\mathbf{x})\nabla'_i\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') - \pi_i(\mathbf{x}')\nabla_j\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}').$$

Здесь $\pi_i(\mathbf{x})$ - плотность импульса; $\sigma(\mathbf{x})$ - плотность энтропии; $\rho(\mathbf{x})$ - плотность массы; $b_{kj}(\mathbf{x})$ - тензор дисторсии. Величина $\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ представляет собой δ-функцию Дирака. Выписанные СП служат основой построения нелинейных уравнений динамики для широкого класса классических сплошных сред. Различные особенности динамического описания жидких кристаллов, твердого тела и жидкостей в рамках гамильтонова подхода проявляются в разной зависимости плотности энергии от тензора дисторсии. Для среды с дефектами стержнеподобной формы вместо выписанной первой СП фигурирует СП вида

$$\{\pi_i(\mathbf{x}),l(\mathbf{x}')\} = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\nabla_i l(\mathbf{x}) - \frac{2}{3}l(\mathbf{x}')\nabla'_i\,\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'); \qquad (2)$$

где $l(\mathbf{x})$ - длина стержнеподобного дефекта. Гамильтониан среды является функционалом плотности энтропии, плотности импульса и массы $\rho(\mathbf{x}) = mn(\mathbf{x})$ (m - масса частицы) и длины стержнеподобного дефекта $l(\mathbf{x})$: $H = \int dx\varepsilon(\sigma(\mathbf{x}),\pi_i(\mathbf{x}),\rho(\mathbf{x}),l(\mathbf{x}))$. Для всего набора макроскопических величин, используя СП (1) и (2), нами получены динамические уравнения конденсированной среды с дефектами стержнеподобной формы с учетом диссипации:

$$\dot{\zeta}_a = -\nabla_k\left(\zeta_{ak}^{(0)} + \zeta_{ak}^{(1)}\right),$$

$$\dot{l} = -\left(v_i + v_i^{(1)}\right)\nabla_i l - \frac{2}{3}l\nabla_i\left(v_i + v_i^{(1)}\right). \qquad (3)$$

Здесь $\zeta_a(\mathbf{x}) = \varepsilon(\mathbf{x}),\pi_i(\mathbf{x}),\rho(\mathbf{x})$ - плотности аддитивных интегралов движения; $a = 0,k,4$ и $\zeta_{ak}(\mathbf{x}) = q_k(\mathbf{x}),t_{ik}(\mathbf{x}),j_k(\mathbf{x})$ - соответствующие плотности потоков;

$$\zeta_{ak}^{(0)} = -\frac{\partial}{\partial Y_a}\frac{\omega Y_k}{Y_0} + \frac{2}{3}\frac{\partial\omega}{\partial l}l\frac{\partial}{\partial Y_a}\frac{Y_k}{Y_0} \qquad (4)$$

- плотности потоков аддитивных интегралов движения в главном приближении, где $v_i = \partial\varepsilon/\partial\pi_i$ - макроскопическая скорость, $\omega = -\sigma + Y_a\zeta_a = \omega(Y,l)$ - плотность термодинамического потенциала и Y_a - термодинамические силы, которые связаны с плотностями аддитивных интегралов движения равенствами $\zeta_a = \partial\omega/\partial Y_a$. Учет релаксационных процессов мы провели стандартным образом, используя представление о диссипативной функции. Из требования положительности производства энтропии и принципа симметрии Онзагера получены динамические уравнения конденсированной среды с дефектами стержнеподобной формы с учетом диссипации. Выражения для диссипативных потоков имеют вид:

$$\zeta_{0k}^{(1)} = -\kappa\nabla_k T - A\Gamma_k; \qquad (5)$$

$$\zeta_{4k}^{(1)} = -D\nabla_k T - \sigma\nabla_k\mu - C\Gamma_k;$$

$$\zeta_{ik}^{(1)} = -\delta_{ik}\zeta\nabla_j v_j - w_{ik}\eta;$$

$$v_k^{(1)} = -\frac{1}{T^2}\nabla_k T(A+\mu C) - \Gamma_k B - \frac{C}{T}\nabla_k\mu,$$

где $T = \partial\varepsilon/\partial\sigma$ - температура; $\mu = \partial\varepsilon/\partial n$ - химический потенциал;

$w_{ik} \equiv \nabla_i v_k + \nabla_k v_i - \frac{2}{3}\delta_{ik}\nabla_j v_j$, ζ, η - коэффициенты вязкости и $\Gamma_k \equiv \frac{\partial\sigma}{\partial l}\nabla_k l - \frac{2}{3}\nabla_k \frac{\partial\sigma}{\partial l} l$, κ - теплопроводности; D, σ - коэффициенты термодиффузии и самодиффузии; A, B, C - коэффициенты просачивания. Возникновение последних кинетических коэффициентов, как видим, связано с наличием дополнительных термодинамических параметров, учитывающих форму и размер протяженных структурных дефектов среды. Из вида полученных уравнений следует, что явления теплопроводности, диффузии и конвекции могут происходить не только в силу неоднородностей плотностей аддитивных интегралов движения, но и благодаря неоднородностям структуры дефектов среды.

Система уравнений (3-5) описывает взаимное влияние термо- и массопереноса на изменение пространственной структуры дефектов. Найденный нами вид реактивных и диссипативных потоков свидетельствует о существовании дополнительных кинетических коэффициентов, описывающих новые механизмы релаксации в среде, связанные с наличием внутренней структуры.

Далее рассмотрены особенности массопереноса в таких системах. Для простоты пренебрегаем конвекционным макроскопическим переносом $(\nabla_k Y_i = 0, Y_k = 0)$ и тепловыми процессами $(\nabla_k Y_0 = 0)$ в уравнениях (1)-(4). В результате получена более простая система динамических релаксационных уравнений:

$$\dot{n} = D\Delta n + C\Delta l\,; \tag{6}$$

$$\dot{l} = C\alpha\nabla_k n\nabla_k l + B(\nabla_k l)^2 + \frac{2}{3}C\alpha l\Delta n + \frac{2}{3}Bl\Delta l\,,$$

которая обобщает уравнения Фика на случай конечного размера структурных элементов среды с учётом их формы. Здесь α - некоторый числовой параметр, обусловленный термодинамикой и который мы полагаем всюду далее постоянным.

Если изучаемая среда обладает свойствами инвариантности Галилея, кинетические коэффициенты *D*, *C*, σ обращаются в нуль: $D = C = \sigma = 0$. В этом случае макроскопическая динамика рассматриваемой системы описывается одним уравнением:

$$\dot{l} = B(\nabla_k l)^2 + \frac{2}{3}Bl\Delta l. \tag{7}$$

Рассмотрим уравнение (7) в стационарном и одномерном случаях. Принимая во внимание граничные условия $l(x_{1,2}) = b_{1,2}$, приведем решение:

$$l(x) = \left\{\frac{l_1^{5|2}(x_2 - x) + l_2^{5|2}(x - x_1)}{x_2 - x_1}\right\}^{2|5}.$$

Стационарное уравнение (7) в случае цилиндрической симметрии имеет вид:

$$\left(\frac{\partial l}{\partial r}\right)^2 + \frac{2}{3}l\left\{\frac{\partial^2 l}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial l}{\partial r}\right\} = 0.$$

Полагаем, что длина стержня $l = l(r)$ зависит только от радиуса r и не зависит от координат φ и z. Приведем решение:

$$l(r) = \left(A\ln r^{5/2} + B\right)^{2|5}.$$

Постоянные A и B находятся из граничных условий $l(r_{1,2}) = l_{1,2}$. Если в системе имеется сферическая симметрия, то соответствующее стационарное уравнение имеет вид:

$$\left(\frac{\partial l}{\partial r}\right)^2 + \frac{2}{3}l\left(\frac{\partial^2 l}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial l}{\partial r}\right) = 0.$$

Для этого уравнения получено решение

$$l(r) = \left(A - \frac{B}{r}\right)^{\frac{2}{5}}.$$

Рассмотрим теперь среды, в которых инвариантность Галилея отсутствует. В этом случае условие стационара описывается двумя уравнениями:

$$\begin{cases}\Delta(Dn + Cl) = 0,\\ C\alpha n' l' + Bl'^2 + \frac{2}{3}C\alpha\ln'' + \frac{2}{3}Bl\Delta l'' = 0.\end{cases} \tag{8}$$

Для решения этой системы уравнений в одномерном случае, используя первое уравнение, исключаем плотность числа частиц с помощью соотношений:

$$n = \frac{1}{D}(\gamma x + \delta - Cl);$$

$$n' = \frac{1}{D}(\gamma - Cl'); \qquad n'' = -\frac{C}{D}l''.$$

Здесь постоянные γ, δ находятся из граничных условий. Подставляя полученные выражения во второе уравнение системы (8), получаем дифференциальное уравнение второго порядка для размера дефекта

$$\frac{\alpha C\gamma}{D}l' + l'^2\left(B - \frac{\alpha C^2}{D}\right) + \frac{2}{3}ll''\left(B - \frac{\alpha C^2}{D}\right) = 0,$$

которое можно свести к более простому виду:

$$l'^2 + \frac{2}{3}ll'' - \lambda l' = 0,$$

где $\lambda \equiv \alpha\gamma C/(\alpha C^2 - BD)$. Неизвестную функцию *l* будем искать в виде $l = u^\alpha$, где α - произвольная постоянная. Ее мы находим из требования обращения в нуль коэффициента при u'^2, откуда $\alpha = 2/5$. В результате приходим к уравнению $u'' = 15\lambda u^{3/5}/4$, откуда следует более простое уравнение $u' = \sqrt{75\lambda u^{8/5}/16 + \beta}$.

Возникающая при этом константа β может быть найдена из граничных условий. Решение последнего дифференциального уравнения с разделяющимися переменными в неявной форме будет иметь вид:

$$\int_{u_0}^{u} \frac{dv}{\left(\frac{75}{16}\lambda v^{8/5}+\beta\right)^{1/2}} = x - x_0 .$$

Таким образом, мы получили решение системы уравнений (8), которое можно записать в следующем виде:

$$\begin{cases} l(x) = u^{2/5}(x); \\ n(x) = \dfrac{1}{D}\left(\gamma x + \delta - u^{2/5}(x)\right). \end{cases}$$

Это решение описывает стационарное и неоднородное распределение плотности числа частиц и неоднородное распределение размеров дефектов стержнеподобной формы. Видим, что учет формы и размера дефектов приводит к отклонению от линейной зависимости плотности числа частиц от координаты.

Изучим теперь линеаризованные динамические уравнения (7). Можно показать, что линеаризация приводит к следующему дисперсионному уравнению:

$$\omega^2 + i\omega k^2\left(D + \frac{2}{3}Bl\right) + \frac{2}{3}lk^4\left(\alpha C^2 - BD\right) = 0 .$$

Учет конечности размера стержнеподобных дефектов приводит к тому, что среда обладает двумя затухающими спектрами:

$$\omega_\pm = -ik^2\gamma_\pm ;$$

где

$$2\gamma_\pm = D + \frac{2}{3}lB \pm \sqrt{\left(D+\frac{2}{3}lB\right)^2 + \frac{8}{3}l\left(\alpha C^2 - DB\right)}\text{ -}$$

декремент затухания. Полагая длину $l = 0$, получим одну диффузионную моду. Для галилеево-инвариантной среды также остается только одна ветвь спектра:

$$\omega = -\frac{2}{3}ik^2 lB .$$

В заключение этого раздела рассмотрим нелинейные решения динамического уравнения (7). Совершая масштабное преобразование $\tau = Bt$ и переходя к одномерному случаю, получим уравнение:

$$\dot{l} = l'^2 + \frac{2}{3}ll'' . \qquad (9)$$

Решение этого динамического уравнения проводится разделением переменных $l(x,\tau) = X(x)T(\tau)$. Для функций T и X получены уравнения:

$$T' = \lambda T^2 , \qquad (10)$$

$$X'^2 + \frac{2}{3}XX'' - \lambda X = 0 . \qquad (11)$$

Здесь для устранения нефизического расходящегося решения следует выбрать $\lambda < 0$. Решение первого из них имеет вид:

$$T(t) = T(0)/(1 - \lambda T(0)Bt) . \qquad (12)$$

Неизвестную функцию $X(x)$ будем искать в виде $X = u^\alpha$. Подставим эту функцию в уравнение (11), и его можно переписать в виде:

$$\alpha u^{2(\alpha-1)}u'^2\left[\alpha + \frac{2}{3}(\alpha-1)\right] + \frac{2}{3}u^{2\alpha-1}\cdot u'' -$$

$$-\lambda\alpha u^{\alpha-1}u' = 0.$$

Выберем значение α, которое обращает первое слагаемое в нуль: $\alpha^2 + \frac{2}{3}\alpha(\alpha-1) = 0$, отсюда $\alpha = 2/5$. В результате получаем уравнение (11) в более простом виде:

$$u'' = \frac{15}{4}\lambda u^{3/5} ,$$

откуда следует уравнение с разделяющимися переменными:

$$u' = \sqrt{\frac{75}{16}\lambda u^{8/5} + \beta} .$$

Возникающая при этом новая постоянная β может быть найдена из граничных условий. Приведём решение последнего уравнения в неявной форме:

$$\int_{u_0}^{u(x)} \frac{d\nu}{\left(\frac{75}{16}\lambda \nu^{8/5}+\beta\right)^{1/2}} = x - x_0 , \qquad (13)$$

где учтено, что $u(x_0) \equiv u_0$. Формулы (12), (13) и решают динамическую задачу эволюции формы и размера протяжённого структурного элемента конденсированной среды. Как видно из этих уравнений, выписанное решение при больших временах обращается в нуль, что означает отсутствие неоднородных дефектов в этом случае.

3. РЕЛАКСАЦИОННЫЕ УРАВНЕНИЯ СРЕДЫ С ДИСКОПОДОБНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

Рассмотрим случай конденсированной среды с протяжёнными дископодобными структурными элементами. В этом случае дополнительным термодинамическим параметром является диаметр диска *d*. Для среды с дефектами дископодобной формы вместо выписанной СП (2) фигурирует СП вида

$$\left\{\pi_i(\mathbf{x}), d(\mathbf{x}')\right\} = \delta(x-x')\nabla_i d(x) - \frac{1}{3}d(\mathbf{x}')\nabla'_i\,\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'). \qquad (14)$$

Здесь $d(\mathbf{x})$ - длина стержнеподобного дефекта. Гамильтониан среды является функционалом плотности энтропии, плотности импульса и массы

$\rho(\mathbf{x}) = mn(\mathbf{x})$, ($m$- масса частицы) и размера дископодобного дефекта:

$$H = \int dx \varepsilon\left(\sigma(\mathbf{x}), \pi_i(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{x}), d(\mathbf{x})\right).$$

Для всего набора макроскопических величин, используя СП (1) и (14), нами получены динамические уравнения конденсированной среды с дефектами стержнеподобной формы с учетом диссипации. Выведенные нами динамические уравнения аналогичны уравнениям (3) - (4), в которых следует всюду совершить замену $2/3 \to 1/3$ и $l \to d$.

В пренебрежении температурными эффектами и макроскопическим переносом в галилеево-инвариантном случае получено уравнение:

$$\dot{d} = B(\nabla_k d)^2 + \frac{1}{3} Bd\Delta d. \qquad (15)$$

Оно описывает эволюцию дископодобного дефекта. Стационарное решение этого уравнения получаем аналогично случаю сред со структурными элементами стержнеподобной формы. Приведём решение стационарного и одномерного уравнения для распределения профиля размера структурного элемента среды с граничными условиями:

$$d\left(x_{1,2}\right) = d_{1,2},$$

$$d(x) = \left\{\frac{-d_1^4(x_2 - x) + d_2^4(x - x_1)}{x_1 - x_2}\right\}^{1/4}.$$

В цилиндрических координатах задача (15) решается аналогично рассуждениям для структурных элементов стержнеподобной формы. Уравнение (15) приводится к виду

$$\dot{d}(r,t) = \left(\frac{\partial d}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{3} d\left\{\frac{\partial^2 d}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial d}{\partial r}\right\},$$

которое имеет решение

$$d(r) = \left(A \ln r^4 + B\right)^{1/4}.$$

В случае сферической симметрии стационарное одномерное уравнение (15) преобразуется к виду

$$\dot{d}(r,t) = \left(\frac{\partial d}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{3} d\left(\frac{\partial^2 d}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial d}{\partial r}\right),$$

имея при этом решение $d(r) = \left(\frac{A}{r} + B\right)^{1/4}$.

Видим, что неоднородное распределение имеет существенно иной профиль для дископодобных элементов среды.

Динамическое уравнение (15) в одномерном случае решаем также методом разделения переменных $d = d(x,\tau) = X(x)T(\tau)$. Для введения неизвестных функций $X(x)$ и $T(\tau)$ получаем уравнения:

$$T' = \lambda T^2, \qquad X'^2 + \frac{1}{3} XX'' - \lambda X = 0,$$

где λ - постоянная. Решение первого уравнения имеет вид (10). Для решения второго уравнения совершаем подстановку $X = u^\alpha$ и выберем значение $\alpha = \frac{1}{4}$. Исходное уравнение упрощается и принимает вид $u'' = 12\lambda u^{3/4}$. Отсюда найдём $u' = \sqrt{\frac{96}{7}\lambda u^{7/5} + \delta}$. В результате получим решение этого уравнения в неявной форме:

$$\int_{u_0}^{u(x)} \frac{d\nu}{\left(\frac{96}{7}\lambda \nu^{7/4} + \delta\right)^{1/2}} = x - x_0.$$

Приведенное выражение находит зависимость функции u от координаты в неявной форме и, тем самым, решает задачу эволюции протяжённого структурного элемента дископодобной формы.

Если инвариантности Галилея нет, то макроскопическая динамика рассматриваемой системы описывается следующей системой двух уравнений:

$$\begin{cases} \dot{n} = D\Delta n + C\Delta d, \\ \dot{d} = C\alpha \nabla_k n \nabla_k d + B(\nabla_k d)^2 + \frac{1}{3} C\alpha d\Delta n + \frac{1}{3} Bd\Delta d. \end{cases}$$

В стационарно-одномерном случае имеем:

$$\begin{cases} \Delta(Dn + Cd) = 0, \\ C\alpha n' d' + Bd'^2 + \frac{1}{3} C\alpha d n'' + \frac{1}{3} Bd\Delta d'' = 0. \end{cases} \qquad (16)$$

Решаем эту систему также путём выражения из первого уравнения n и нахождения соответственно первой и второй производных. Получаем уравнение следующего вида:

$$d'^2 + \frac{1}{3} dd'' - \lambda d' = 0; \qquad (17)$$

где $\lambda \equiv \alpha\gamma C / \left(\alpha C^2 - BD\right)$. Для решения уравнения сделаем подстановку $l = u^\alpha$, где $\alpha = 1/4$. Исходное уравнение преобразуется к виду $u' = 4\lambda u^{3/4} + \beta$ или

$$\int_{u_0}^{u(x)} \frac{d\nu}{4\lambda \nu^{3/4} + \beta} = x - x_0.$$

Приведенное выражение находит зависимость функции u от координаты в неявной форме и, тем самым, решает задачу эволюции пространственных изменений протяженного дефекта дископодобной формы.

Решение системы уравнений (16) запишем в следующем виде:

$$\begin{cases} d(x) = u^{1/4}(x), \\ n(x) = \dfrac{1}{D}\left(\gamma x + \delta - Cu^{1/4}(x)\right). \end{cases}$$

Это решение описывает стационарное и неоднородное распределение плотности числа частиц и неоднородное распределение дефектов дископодобной формы.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные теоретические исследования структурного состояния конденсированных сред показали, что под воздействием облучения и процессов переноса происходит превращение однородных структур дефектов в неоднородные. На дальнейшую эволюцию свойств материала существенно влияют возникшие пространственные структуры. Установлены возможные стационарные структуры в конденсированных средах с диско- и стержнеподобными структурными элементами. Выяснен характер процессов массопереноса в конденсированных средах с протяженными структурными дефектами. Аналогичный анализ может быть проведен для случая учета температурных эффектов и пренебрежения конвекцией и массопереносом.

Найдены диссипативные потоки и показана возможность существования дополнительных кинетических коэффициентов, описывающих новые механизмы релаксации в среде, связанные с наличием внутренней структуры протяженных дефектов.

Результаты исследований могут найти свое применение при описании пространственно-временной самоорганизации в твердом теле и химических системах.

Детально прослежено влияние формы и размера неоднородной структуры дефектов на процессы массопереноса в конденсированной среде. Найдены и проанализированы уравнения, обобщающие уравнения Фика. Получены неоднородные решения для концентраций и размеров структурных дефектов среды указанных нелинейных уравнений в стационарном и нестационарном случаях в условиях различной геометрии и дана их физическая интерпретация.

ЛИТЕРАТУРА

1. М.Ю. Ковалевский, В.Т. Мацкевич, Н.Н. Чернышов // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2006, №4, с. 74.

2. П.А. Селищев. *Самоорганизация в радиационной физике*. Киев: Видавництво «Аспект-Полиграф», 2004, с. 240.

3. E.A. Kuleshova, B.A. Gurovich, Ya.I. Shtrombakh, D.Yu. Erak, O.V. Lavrenchuk // *J. of Nuclear Materials*. 2002, v. 300, p. 127-140.

4. Г.А. Малыгин // *УФН*. 1999, т 169, № 9, с. 979-1010.

5. E.A. Koptelov // *J. of Nuclear Materials*. 2007, v. 366, p. 237-247.

6. Г. Николис, И. Пригожин. *Познание сложного* // М.: «Мир», 1990, с. 42.

7. Г. Хакен. *Синергетика*. М.: «Мир», 1980, с. 404.

8. Ю.М. Свирежев. *Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии* // М.: «Наука», 1987, с. 368.

9. И.М. Неклюдов, В.Н. Воеводин *Эволюция структурно-фазовых состояний и радиационная стойкость конструкционных материалов*. Киев: «Наукова думка», 2006, с. 376

10. А.А. Исаев, М.Ю. Ковалевский, С.В. Пелетминский // *ЭЧАЯ*. 1996, т. 27, № 2, с. 431-492.

Статья поступила в редакцию

О ПРОЦЕСАХ ТЕПЛО- І МАСОПЕРЕНОСУ У КОНДЕНСОВАНИХ СЕРЕДОВИЩАХ З МІКРОСТРУКТУРОЮ

М.В. Камишанченко, М.Ю. Ковалевський, В.Т. Мацкевич, О.Я. Разумний, О.О. Самофалова

Вивчено взаємний вплив форми та розміру неоднорідної макроструктури на процеси термо- і масопереносу у конденсованих середовищах. Динаміка таких середовищ розглянута на тому етапі еволюції, коли структура вже сформувалася та у системі досягнута локальна рівновага. Термодинаміка таких станів описується нарівні зі стандартними параметрами додатковими фізичними величинами, які задають форму та розмір протяжних структурних елементів середовища. Детально розглянуті середовища з диско- та стриженоподібними дефектами. Кінетичні коефіцієнти, які пов’язані з внутрішньою структурою, описують нові механізми релаксації у середовищі. З’ясована можливість з’явлення нових спектрів колективних збуджень у цих середовищах. Отримані рішення нелінійних рівнянь, які узагальнюють рівняння Фіка, в умовах різноманітної геометрії та дана їх фізична інтерпретація.

ABOUT PROCESSES OF THERMAL AND MASS TRANSFER IN CONDENSED MATTERS WITH MICROSTRUCTURE

N.V. Kamyshanchenko, M.Yu. Kovalevsky, V.T. Matskevych, A.Ya. Razumny, O.A. Samophalova

It was studied joint influence of form and size of inhomogeneous microstructure to processes of thermal and mass transfer in condensed matters. Dynamic of such matters was studied at the stage of evolution when the structure have already formed and the system have reached local balance. Thermodynamic of these stations described equally with standard parameters by the help of supplementary physics quantities, which set form and size of extended structure elements of matter. Kinetic coefficients, connected with inner structure, describe new mechanisms of relaxation in the matters. It was found out possibility of appearance of new spectra of collective excitement in these matters. It was received solutions of nonline equations, united equations of Ficks, in conditions of different geometry and given their physics interpretation.