

УДК 539.3

**О КОНФИГУРАЦИОННЫХ СИЛАХ В МЕХАНИКЕ ФАЗОВЫХ
И ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ**© 2022 г. А. Б. Фрейдin^{1,*}¹*Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия***e-mail: alexander.freidin@gmail.com*

Поступила в редакцию 23.05.2022 г.

После доработки 30.05.2022 г.

Принята к публикации 02.06.2022 г.

Дается краткий обзор механики конфигурационных сил применительно к описанию распространения межфазных границ и фронтов химических реакций. Обсуждаются конфигурации, связанные с превращениями, кинематические условия и балансовые соотношения на межфазной границе. Затем записывается выражение для диссипации энергии вследствие распространения межфазной границы или фронта химической реакции. Это дает возможность формулировки дополнительных определяющих соотношений – кинетических уравнений, определяющих скорость межфазной границы или фронта реакции в зависимости от конфигурационной силы.

Ключевые слова: межфазные границы, конфигурационная сила, тензор энергии-импульса Эшелби, тензор химического сродства, механохимия

DOI: 10.31857/S0032823522040075

1. Введение. Механика конфигурационных сил активно развивается с конца 80-х – начала 90-х гг. XX века как одно из направлений механики деформируемого твердого тела, позволяющее естественным образом включить в рассмотрение эволюцию неоднородностей различной природы – от движения локализованных дефектов и роста трещины до развития областей новой фазы, распространения фронтов химических реакций и роста биологических тканей в условиях воздействия механических напряжений (см., напр., [1–10]). Общим для этих процессов является то, что они не могут быть сведены к перемещению материальных точек под действием механических сил, как в механике Ньютона, но приводят к изменению конфигурации тела вследствие движения дефектов и границ относительно материальных точек, то есть в “пространстве материала” [3].

Ниже дается краткий обзор механики конфигурационных сил применительно к математическому описанию распространения межфазных границ и фронтов химических реакций с акцентом на описание конфигураций, порождаемых превращениями. Обсуждаются кинематические условия и балансовые соотношения на межфазной границе. Затем записывается выражение для диссипации энергии вследствие распространения межфазной границы или фронта химической реакции. Это дает возможность формулировки дополнительных определяющих соотношений – кинетических уравнений, определяющих скорость межфазной границы или фронта реакции. Детали постановок и решения задач описания фазовых переходов и химических реакций под напряжением не рассматриваются (см. библиографию и примеры решения краевых задач с межфазными границами и фронтами химических реакций [11–17]); обсуждает-

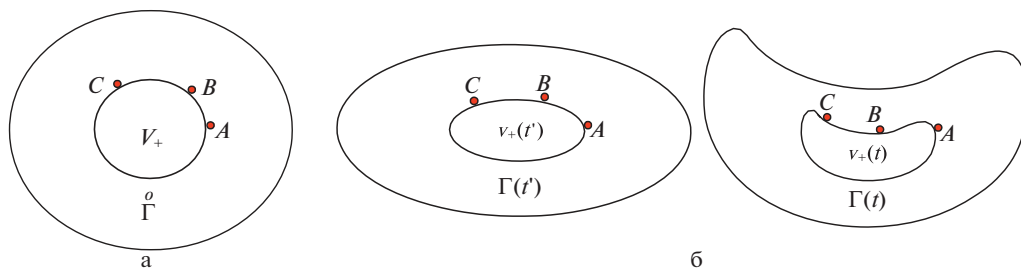


Рис. 1. Материальные границы в: а – отсчетной и б – актуальных конфигурациях.

ся только общий вывод кинетического уравнения, связанного с фундаментальными законами и вторым законом термодинамики безотносительно реологических моделей деформируемого тела.

Пусть тело в актуальной (деформированной) конфигурации $v = v_- \cup v_+$ в момент времени t разделено на части, занимающие области пространства v_- и v_+ с границей раздела Γ и состоящие из материалов “–” и “+” соответственно. Такое разделение может иметь:

- конструкционное происхождение как, например, в случае дисперсно-упрочненных композиционных материалов, состоящих из матрицы и включений другого материала;
- технологическое происхождение, когда включения возникают на стадии получения материала;
- в силу физических причин: при определенных термомеханических и/или других физических воздействиях в теле возникают и развиваются области новой фазы как, например, при мартенситных превращениях в сплавах с эффектом памяти формы;
- в силу химических причин как, например, при формировании диоксида кремния в полупроводниках или литизации кремния в литий-ионных батареях.

Перечисление причин появления областей нового материала отражает существование двух типов границ – связанных на всех этапах деформирования с одними и теми же материальными точками тела и движущихся только вместе с этими точками, и границ, перемещающихся по точкам тела.

Первый тип границ имеет место, например, в теле с включением (рис. 1). Во все моменты времени, то есть во всех актуальных конфигурациях, области v_+ заполнены одними и теми же материальными точками материала “+”, а области v_- – одними и теми же материальными точками материала “–”. Граница раздела областей деформируется вместе с телом и в разные моменты времени проходит через разные точки пространства, но остается связанной с одними и теми же материальными точками (A, B, C на рис. 1). Границы $\Gamma(t')$ и $\Gamma(t)$ имеют один и тот же прообраз $\overset{\circ}{\Gamma}$ в отсчетной конфигурации. Такие границы называют материальными.

Второй тип границ наблюдается в материалах, претерпевающих фазовые или химические превращения. В этом случае при развитии области v_+ превращенного материала граница $\Gamma(t)$ перемещается вследствие относительного перемещения точек тела, то есть деформаций, а также вследствие превращения одного материала в другой (рис. 2).

В разные моменты времени t и t' граница проходит через разные материальные точки A, B и C, D . Положениям границы $\Gamma(t)$ и $\Gamma(t')$ в актуальной конфигурации соответствуют разные прообразы $\overset{\circ}{\Gamma}(t)$ и $\overset{\circ}{\Gamma}(t')$ в отсчетной конфигурации, то есть разные исходные составные тела $V = V_- \cup V_+$. Граница распространяется относительно отсчетной

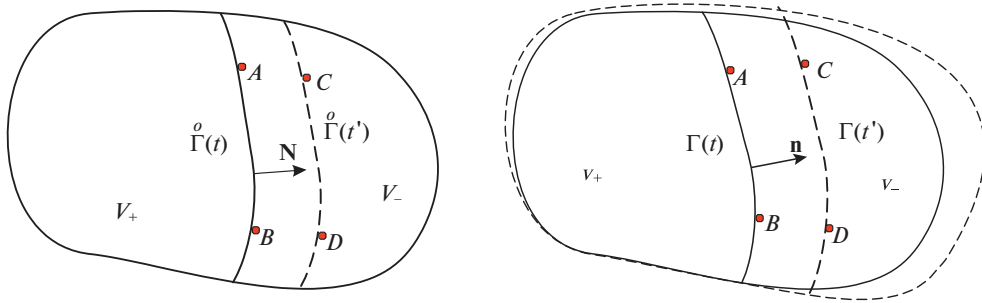


Рис. 2. Межфазные границы в разные моменты времени в актуальной и отсчетной конфигурациях.

конфигурации. Причину распространения такой границы, то есть причину изменения отсчетной конфигурации называют конфигурационной силой.

В ньютоновой механике сила вводится как причина изменения состояния движения материальной точки – изменения ее скорости. Движение межфазных границ происходит по термодинамическим причинам. Формально конфигурационная сила, движущая дефект или границу, может быть получена как величина, сопряженная скорости границы в выражении для диссипации энергии. Мотивация такого определения следует из того, что в термодинамике необратимых процессов показано, что формула производства энтропии имеет вид билинейной формы [18]

$$P[S] = \sum_{\alpha} J_{\alpha} X_{\alpha},$$

образованной термодинамическими силами X_{α} и потоками J_{α} , порождаемыми этими силами. Это, в свою очередь, позволяет формулировать кинетические уравнения в виде зависимостей термодинамических потоков от сил:

$$J_{\alpha} = J_{\alpha}(X_1, X_2, \dots, X_n)$$

Тогда конфигурационная сила может быть определена как термодинамическая сила, сопряженная скорости изменения параметра, характеризующего конфигурацию тела.

Отметим также механические аналогии. Потенциальная сила может рассматриваться как множитель при скорости перемещения в выражении скорости изменения потенциальной энергии, а сила трения как множитель при скорости в выражении диссипации вследствие трения.

Термодинамический подход, согласно которому термодинамические силы являются функциями термодинамических потоков, будем использовать при формулировке кинетических уравнений в виде зависимостей скорости распространения фронта фазового или химического превращения от конфигурационной силы. При этом внешние воздействия, в том числе механические, влияют на скорость границы через конфигурационную силу.

2. Конфигурации двухфазных тел. Рассмотрим фазовое или локализованное на фронте реакции химическое превращение, сопровождающееся собственной деформацией превращения и, возможно, изменением реологических свойств материала.

Пусть $v = v_+ \cup v_-$ – актуальная конфигурация тела в момент времени t , где область v_- занята материалом в фазовом состоянии “–”, а область v_+ материалом в фазовом состоянии “+”, $\Gamma(t)$ – межфазная граница, разделяющая области v_+ и v_- (рис. 3).

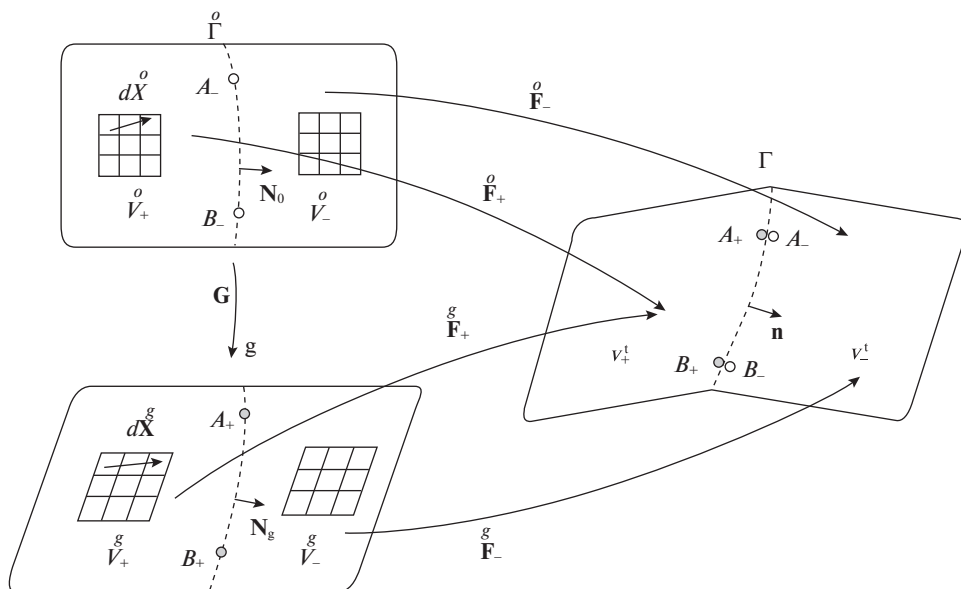


Рис. 3. Отсчетные и актуальная двухфазные конфигурации.

Полагаем, что определены свободные от напряжений конфигурации тела $\overset{o}{V}$ и $\overset{g}{V}$ в фазовых состояниях “–” и “+”, соответственно (натуральные состояния). Линейные элементы $d\overset{o}{X}$ и $d\overset{g}{X}$ конфигураций $\overset{o}{V}$ и $\overset{g}{V}$ связаны тензором \mathbf{G} , задающим деформацию превращения:

$$d\overset{g}{X} = \mathbf{G} \cdot d\overset{o}{X} \quad (2.1)$$

Тензор \mathbf{G} характеризует изменение геометрии решетки в результате фазового превращения кристаллического тела [19], или объемное расширение в результате химической реакции. Направление главных осей \mathbf{G} , вообще говоря, зависит от напряженного состояния двухфазной конфигурации и тогда подлежит определению. Возможен также набор тензоров \mathbf{G} , определяемый группой симметрии материала и соответствующий вариантам новой фазы (вариантам мартенсита и двойникованию в случае мартенситных фазовых переходов). Отметим, что в случае фазовых переходов под напряжением одно из натуральных состояний может быть метастабильным (соответствующим локальному, но не глобальному минимуму энергии) или гипотетическим, когда, например, новая фаза может существовать только в напряженном состоянии, то есть при наложении на \mathbf{G} дополнительных деформаций. Далее рассматриваются границы для заданного тензора превращения \mathbf{G} .

Если тензор \mathbf{G} задан, то актуальной конфигурации $v = v_- \cup v_+$ могут быть поставлены в соответствие две отсчетные конфигурации: конфигурация $\overset{o}{V} = \overset{o}{V}_- \cup \overset{o}{V}_+$, образованная материалом в натуральном фазовом состоянии “–” с границей $\overset{o}{\Gamma}(t)$, проходящей через те же материальные точки фазы “–”, что и граница $\Gamma(t)$ в актуальной конфигурации A_- (точки A_- , B_- на рис. 3), и отсчетная конфигурация $\overset{g}{V} = \overset{g}{V}_+ \cup \overset{g}{V}_-$, образованная натуральным фазовым состоянием “+” с границей $\Gamma(t)$, проходящей через те же материальные точки фазы “+”, что и $\Gamma(t)$ (точки A_+ , B_+).

Положение материальных точек фазы “–” в актуальной v и отсчетной $\overset{o}{V}$ конфигурациях определяется векторами $\mathbf{x}_- \in v_-$ и $\overset{o}{\mathbf{X}}_- \in \overset{o}{V}_-$, соответственно. Положение точек фазы “+” в актуальной конфигурации и отсчетной $\overset{g}{V}$ конфигурации определяется векторами $\mathbf{x}_+ \in v_+$ и $\overset{g}{\mathbf{X}}_+ \in \overset{g}{V}_+$. Отображения

$$\mathbf{x}_- = \overset{o}{\mathbf{x}}_-(\overset{o}{\mathbf{X}}_-, t), \quad \mathbf{x}_+ = \overset{g}{\mathbf{x}}_+(\overset{g}{\mathbf{X}}_+, t) \quad (2.2)$$

задают деформацию материала в фазовых состояниях “–” и “+” из соответствующих натуральных состояний. Градиенты деформаций $\overset{o}{\mathbf{F}}_- = \overset{o}{\nabla} \mathbf{x}_-^T$ и $\overset{g}{\mathbf{F}}_+ = \overset{g}{\nabla} \mathbf{x}_+^T$, где $\overset{o}{\nabla}$ и $\overset{g}{\nabla}$ – набла-операторы, заданные в базисах отсчетных $\overset{o}{V}$ и $\overset{g}{V}$ конфигураций (в декартовых координатах $\overset{o}{F}_{ij} = \partial x_i / \partial X_j$, $\overset{g}{F}_{ij} = \partial x_i / \partial X_j$, где x_i , X_j и $\overset{g}{X}_j$ – декартовы координаты материальной точки в актуальной v^t и отсчетных $\overset{o}{V}$ и $\overset{g}{V}$ конфигурациях), связывают линейные элементы $d\mathbf{x}_\pm \in v_\pm^t$ актуальной конфигурации с линейными элементами $d\overset{o}{\mathbf{X}}_- \in \overset{o}{V}_-$ и $d\overset{g}{\mathbf{X}}_+ \in \overset{g}{V}_+$ отсчетных конфигураций:

$$d\mathbf{x}_- = \overset{o}{\mathbf{F}}_- \cdot d\overset{o}{\mathbf{X}}_-, \quad d\mathbf{x}_+ = \overset{g}{\mathbf{F}}_+ \cdot d\overset{g}{\mathbf{X}}_+$$

Отметим, что естественным представлением определяющих соотношений материалов фаз является задание зависимостей напряжений именно от градиентов деформации $\overset{o}{\mathbf{F}}_-$ и $\overset{g}{\mathbf{F}}_+$. Но так как деформации в актуальной конфигурации могут определяться относительно любой конфигурации, для обеих фаз может быть выбрана единая отсчетная конфигурация, соответствующая натуральному состоянию одной из фаз, например, фазы “–”. Тогда $\mathbf{x}_+ = \overset{o}{\mathbf{x}}_+(\overset{o}{\mathbf{X}}_+, t)$, где $\overset{o}{\mathbf{X}}_+ \in \overset{o}{V}_+$ – положение прообраза превращенной точки в натуральном фазовом состоянии “–”, а градиент деформации $\overset{o}{\mathbf{F}}_+ = \overset{o}{\mathbf{F}}_+ \cdot \mathbf{G}$ связывает линейный элемент $d\mathbf{x}_+ \in v_+$ в фазовом состоянии “+” с его прообразом $d\overset{o}{\mathbf{X}}_+ \in \overset{o}{V}_+$ в фазовом состоянии “–” (до деформирования и фазового превращения): $d\mathbf{x}_+ = \overset{o}{\mathbf{F}}_+ \cdot d\overset{o}{\mathbf{X}}_+$

Скорости точек в фазовых состояниях “–” и “+” определяются соотношениями

$$\mathbf{v}_- = \frac{\partial \overset{o}{\mathbf{x}}_-(\overset{o}{\mathbf{X}}_-, t)}{\partial t} = \frac{\partial \overset{g}{\mathbf{x}}_-(\overset{g}{\mathbf{X}}_-, t)}{\partial t}, \quad \overset{o}{\mathbf{X}}_- \in \overset{o}{V}_-, \quad \overset{g}{\mathbf{X}}_- \in \overset{g}{V}_- \quad (2.3)$$

$$\mathbf{v}_+ = \frac{\partial \overset{o}{\mathbf{x}}_+(\overset{o}{\mathbf{X}}_+, t)}{\partial t} = \frac{\partial \overset{g}{\mathbf{x}}_+(\overset{g}{\mathbf{X}}_+, t)}{\partial t}, \quad \overset{o}{\mathbf{X}}_+ \in \overset{o}{V}_+, \quad \overset{g}{\mathbf{X}}_+ \in \overset{g}{V}_+ \quad (2.4)$$

Полагаем, что на межфазной границе сохраняется непрерывность поля перемещений, то есть рассматривается когерентная граница. Из непрерывности перемещений следуют кинематические условия совместности первого и второго рола (см., напр., [20]):

$$[\mathbf{F}] = [\overset{o}{\nabla} \mathbf{u}^T] = \overset{o}{a} \mathbf{N}_0, \quad [\mathbf{v}] = -[\mathbf{F}] \cdot \overset{o}{\mathbf{V}}_\Gamma = -W_0 \overset{o}{a} = -W_0 [\mathbf{F}] \cdot \mathbf{N}_0 \quad (2.5)$$

$$[\mathbf{F}] = [\nabla \mathbf{u}^T] = {}^g \mathbf{a} \mathbf{N}_g, \quad [\mathbf{v}] = -[\mathbf{F}] \cdot \mathbf{V}_\Gamma = -W_0 {}^g \mathbf{a} = -W_0 [\mathbf{F}] \cdot \mathbf{N}_g, \quad (2.6)$$

где \mathbf{N}_0 и \mathbf{N}_g – нормали к прообразам межфазной границы $\overset{o}{V}$ и $\overset{g}{V}$ в отсчетных конфигурациях “–” и “+”, внешние к областям $\overset{o}{V}_+$ и $\overset{g}{V}_+$, соответственно, $\overset{o}{\mathbf{a}}$ и $\overset{g}{\mathbf{a}}$ – векторы амплитуды скачка, $\overset{o}{\mathbf{V}}_\Gamma$ и $\overset{g}{\mathbf{V}}_\Gamma$ – скорости прообразов межфазной границы $\overset{o}{V}$ и $\overset{g}{V}$, $W_0 = \overset{o}{\mathbf{V}}_\Gamma \cdot \mathbf{N}_0$, $W_g = \overset{g}{\mathbf{V}}_\Gamma \cdot \mathbf{N}_g$ – нормальные составляющие скорости межфазной границы, двойные скобки обозначают скачок величин на межфазной границе: $[\varphi] = \varphi_+ - \varphi_-$.

Первое условие означает, что скачок градиента деформаций имеет вид диады, образованной вектором нормали к прообразу межфазной границы в отсчетной конфигурации и некоторым вектором, называемым вектором амплитуды скачка. В силу второго условия скачок скорости материальных точек на межфазной границе подстраивается под скорость границы так, чтобы сохранялась сплошность материала. Отметим, что условия непрерывности на границе наиболее простым образом выглядят при записи в терминах отсчетных конфигураций.

Скорость границы в актуальной конфигурации \mathbf{v}_Γ связана со скоростями прообразов границы $\overset{o}{\mathbf{V}}_\Gamma$ и $\overset{g}{\mathbf{V}}_\Gamma$ относительно отсчетных конфигураций формулами

$$\overset{o}{\mathbf{V}}_\Gamma = \mathbf{F}_\pm^{-1} \cdot (\mathbf{v}_\Gamma - \mathbf{v}_\pm), \quad \overset{g}{\mathbf{V}}_\Gamma = \mathbf{F}_\pm^{-1} \cdot (\mathbf{v}_\Gamma - \mathbf{v}_\pm) \quad (2.7)$$

3. Кинетика межфазных границ, тензор напряжений Эшелби. Из балансов массы, импульса и энергии и второго закон термодинамики, записанного в виде неравенства Клаузиуса–Дюгема с учетом теоремы переноса Рейнольдса для тела с распространяющейся внутренней границей следуют соотношения для скачков на движущейся межфазной границе (см., напр., [21, 22]), которые запишем относительно обеих отсчетных конфигураций:

$$[\overset{o}{\rho}]W_0 = 0, \quad [\overset{g}{\rho}]W_g = 0 \quad (3.1)$$

$$[\overset{o}{\rho} \mathbf{v}]W_0 + [\overset{o}{\mathbf{S}}] \cdot \mathbf{N}_0 = 0, \quad [\overset{g}{\rho} \mathbf{v}]W_g + [\overset{g}{\mathbf{S}}] \cdot \mathbf{N}_g = 0 \quad (3.2)$$

$$\left[\overset{o}{\rho} \left(u + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right) \right] + [\overset{o}{\mathbf{S}}^T \cdot \mathbf{v} - \overset{o}{h}] \cdot \mathbf{N}_0 = 0 \quad (3.3)$$

$$\left[\overset{g}{\rho} \left(u + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right) \right] + [\overset{g}{\mathbf{S}}^T \cdot \mathbf{v} - \overset{g}{h}] \cdot \mathbf{N}_g = 0 \quad (3.4)$$

$$[\overset{o}{\rho} s] - \left[\frac{\overset{o}{h}}{T} \right] \geq 0, \quad [\overset{g}{\rho} s] - \left[\frac{\overset{g}{h}}{T} \right] \geq 0, \quad (3.5)$$

где $\overset{o}{\mathbf{S}}$ и $\overset{g}{\mathbf{S}}$ – тензоры напряжений Пиолы–Кирхгофа, определенные относительно $\overset{o}{V}$ и $\overset{g}{V}$ конфигураций: если σ_\pm – тензоры напряжений Коши, то

$$\overset{o}{\mathbf{S}}_\pm = (\det \mathbf{F}_\pm) \sigma_\pm \cdot \mathbf{F}_\pm^{-T}, \quad \overset{g}{\mathbf{S}}_\pm = (\det \mathbf{F}_\pm) \sigma_\pm \cdot \mathbf{F}_\pm^{-T}, \quad (3.6)$$

$\overset{o}{\mathbf{h}}$ и $\overset{g}{\mathbf{h}}$ – векторы теплового потока, определенные относительно $\overset{o}{V}$ и $\overset{g}{V}$ конфигураций, u и s – массовые плотности внутренней энергии и энтропии, T – температура,

$[\rho] = \overset{o}{\rho}_+ - \overset{o}{\rho}_-$, $[\rho] = \overset{g}{\rho}_+ - \overset{g}{\rho}_-$, $\overset{o}{\rho}_-$ и $\overset{g}{\rho}_+$ – плотности материала в ненапряженных фазовых состояниях “–” и “+”; $\overset{g}{\rho}_-$ и $\overset{o}{\rho}_+$ – плотности материала в фазовых состояниях “–” и “+”, пересчитанные как масса фазы “+” на единицу объема фазового состояния “–” и масса фазы “–” на единицу объема фазового состояния “+”. Если порция фазы “–” dm_- превращается в порцию фазы “+” dm_+ , то

$$dm_- = \overset{o}{\rho}_- dV = \overset{g}{\rho}_- dV, \quad dm_+ = \overset{g}{\rho}_+ dV = \overset{o}{\rho}_+ dV, \quad (3.7)$$

где согласно (2.1)

$$\frac{dV}{dV} = \det \mathbf{G} \quad (3.8)$$

Из (3.7), (3.8) следует, что

$$\overset{g}{\rho}_- = g^{-3} \overset{o}{\rho}_-, \quad \overset{o}{\rho}_+ = g^3 \overset{g}{\rho}_+, \quad (3.9)$$

где введено обозначение $g^3 = \det \mathbf{G}$. В случае фазового перехода $dm_+ = dm_-$. Тогда из (3.7) следует, что $\overset{o}{\rho}_+ = \overset{o}{\rho}_-$, $\overset{g}{\rho}_- = \overset{g}{\rho}_+$, что согласуется с балансом массы в виде (3.8).

На распространяющейся межфазной границе $[\rho] = 0$, $[\rho] = 0$.

Полагаем, что температура непрерывна. Тогда, исключив $[\mathbf{h}_0/T]$ из (3.5) с помощью (3.3), (3.4) и (3.2), получим выражение для диссипации энергии вследствие распространения межфазной границы (см., напр., [21–23]):

$$\text{Dis} = \int_{\Gamma_0} D_0 d\Gamma_0 = \int_{\Gamma_g} D_g d\Gamma_g$$

$$D_0 = -\mathbf{N}_0 \cdot \left[\overset{o}{\mathbf{b}} + \frac{\overset{o}{\rho}}{2} W_0^2 \overset{o}{\mathbf{C}} \right] \cdot \mathbf{N}_0 W_0 \quad (3.10)$$

$$D_g = -\mathbf{N}_g \cdot \left[\overset{g}{\mathbf{b}} + \frac{\overset{g}{\rho}}{2} W_g^2 \overset{g}{\mathbf{C}} \right] \cdot \mathbf{N}_g W_g, \quad (3.11)$$

где

$$\overset{o}{\mathbf{b}}_{\pm} = \overset{o}{\rho}_{\pm} f_{\pm} \mathbf{I} - \overset{o}{\mathbf{F}}_{\pm}^T \cdot \overset{o}{\mathbf{S}}_{\pm}, \quad \overset{g}{\mathbf{b}}_{\pm} = \overset{g}{\rho}_{\pm} f_{\pm} \mathbf{I} - \overset{g}{\mathbf{F}}_{\pm}^T \cdot \overset{g}{\mathbf{S}}_{\pm}, \quad (3.12)$$

– тензоры энергии-импульса Эшелби [24, 25], которые называют также тензорами напряжений Эшелби, определенные относительно конфигураций V и V , $f = u - Ts$ – массовая плотность свободной энергии Гельмгольца, \mathbf{I} – единичный тензор, $\overset{o}{\mathbf{C}} = \overset{o}{\mathbf{F}}^T \cdot \overset{o}{\mathbf{F}}$, $\overset{g}{\mathbf{C}} = \overset{g}{\mathbf{F}}^T \cdot \overset{g}{\mathbf{F}}$.

В квазистатике диссипация определяется нормальной компонентой тензора Эшелби:

$$D_0 = -\overset{o}{W} \mathbf{N}_0 \cdot [\overset{o}{\mathbf{b}}] \cdot \mathbf{N}_0, \quad D_g = -\overset{g}{W} \mathbf{N}_g \cdot [\overset{g}{\mathbf{b}}] \cdot \mathbf{N}_g \quad (3.13)$$

Для нелинейно упругих фаз первая формула (3.13) была получена в [26]. Независимо было показано, что необходимым условием минимума энергии Гиббса двухфазно-

го упругого тела является непрерывность нормальной компоненты тензора Эшелби на равновесной межфазной границе [27, 28] (см. также [29]), аналогично непрерывности скалярного химического потенциала. Это привело к заключению о тензорности химического потенциала в случае деформируемого твердого тела и рассмотрении тензора Эшелби как тензора химического потенциала, скачок нормальной компоненты которого является конфигурационной силой, определяющей скорость границы согласно кинетическому уравнению вида

$$\overset{o}{W} = W(\overset{o}{[b_{NN}]}), \quad (3.14)$$

так что $\overset{o}{[b_{NN}]} \overset{o}{W} \leq 0$. В приближении линейной термодинамики $\overset{o}{W} = -k \overset{o}{[b_{NN}]}$, где кинетический коэффициент $k > 0$. Это кинетическое уравнение использовалось при решении задач описания межфазных границ, в том числе при численном моделировании распространения границ (см., напр., [6, 7, 30–33]), при моделировании межфазных границ в пластинах-оболочках [34, 35], для анализа кинетической устойчивости межфазных границ [36] и при исследовании гистерезисных явлений при прямом и обратном фазовых превращениях [37].

4. Кинетика и блокирование фронтов химических реакций. Рассматривалась химическая реакция между деформируемым твердым и диффундирующим компонентами, локализованная на фронте реакции, разделяющим исходное вещество и деформируемый продукт реакции. Реакция имеет вид



где B_- , B_* и B_+ – химические формулы исходного твердого и диффундирующего компонентов и продукта реакции, n_- , n_* и n_+ – стехиометрические коэффициенты.

Реакция поддерживается диффузией компонента B_* к фронту реакции и сопровождается объемной деформацией превращения и изменением реологических свойств материала. Примерами таких реакций являются окисление и литизация кремния, сопровождающиеся большим объемным расширением и превращением упругого материала в вязкоупругий (см., напр., [38–40], а также библиографию [41]).

Далее следуем работам [13, 41–43], не останавливаясь на деталях. Полагаем, что тензор деформации превращения – шаровой. Тогда из химической формулы реакции следует, что

$$\mathbf{G} = g \mathbf{I}, \quad g = \left(\frac{n_+ M_+ \overset{o}{\rho}_-}{n_- M_- \overset{g}{\rho}_+} \right)^{1/3}, \quad (4.1)$$

где M_{\pm} – молярные массы твердых компонент реакции, $\overset{o}{\rho}_-$ и $\overset{g}{\rho}_+$ – плотности твердых компонентов реакции в их натуральных состояниях (ср. с (3.8), (3.9)). В этом случае $dm_+ \neq dm_-$. Фазовому превращению соответствует $M_+ = M_- = M$, $n_+ = n_-$.

Для открытой системы с диффузией и химической реакцией, как и в случае фазового превращения, были записаны балансовые соотношения и неравенство Клаузиуса–Дюгема. В результате были получены выражения поверхностной плотности диссипации энергии на фронтах реакции в отсчетных конфигурациях твердых компонентов реакции:

$$D_0 = A_{NN} \overset{o}{\omega}(\mathbf{N}), \quad D_g = A_{NN} \overset{g}{\omega}(\mathbf{N}), \quad (4.2)$$

где $\overset{o}{\omega}(\mathbf{N})$ и $\overset{g}{\omega}(\mathbf{N})$ – скорости реакции на ориентированных площадках с нормалью \mathbf{N} , A_{NN} – нормальная компонента тензора химического сродства. В квазистатистическом приближении

$$\mathbf{A} = n_* M_* \mu_* \mathbf{I} + n_- M_- \mathbf{M}_- - n_+ M_+ \mathbf{M}_+, \quad (4.3)$$

где тензоры химического потенциала твердых компонентов равны тензорам Эшелби, деленным на плотности материала:

$$\mathbf{M}_- = f_- \mathbf{I} - \frac{1}{\rho_-} \overset{o}{\mathbf{F}}_-^T \cdot \overset{o}{\mathbf{S}}_-, \quad \mathbf{M}_+ = f_+ \mathbf{I} - \frac{1}{\rho_+} \overset{g}{\mathbf{F}}_+^T \cdot \overset{g}{\mathbf{S}}_+, \quad (4.4)$$

μ_* – химический потенциал диффундирующего компонента, зависит от концентрации диффундирующего компонента. Сравнив (4.3) с классическим выражением $A = -\sum n_k M_k \mu_k$, появляющимся в формуле для диссипации энергии $D = A\omega$ в случае реакций в газах и жидкостях в виде множителя при скорости реакции [44], видим обоснованность термина тензор химического сродства.

Тензорность сродства, как и тензорность химического потенциала, может быть объяснена тем, что в деформируемом теле равновесие фаз и химические реакции связаны с ориентированными площадками. На тензорность сродства также указывалось в [45, 46].

Скорости фронта связаны со скоростями реакции соотношениями

$$W_0 = \frac{n_- M_-}{\rho_-} \overset{o}{\omega}(\mathbf{N}), \quad W_g = \frac{n_+ M_+}{\rho_+} \overset{g}{\omega}(\mathbf{N}) \quad (4.5)$$

Подставив нормальную компоненту тензора сродства в известное кинетическое уравнение, определяющее скорость реакции от скалярного сродства [18], получим

$$\overset{o}{\omega}(\mathbf{N}) = k_* \overset{o}{c} \left(1 - \exp\left(-\frac{A_{NN}}{RT}\right) \right), \quad (4.6)$$

где $\overset{o}{c}$ – концентрация диффундирующего компонента относительно отсчетной конфигурации исходного вещества, k_* – константа скорости реакции. Аналогичная формула может быть записана для конфигурации продукта реакции.

Из (4.5), (4.6) видно, что нормальная компонента тензора химического сродства является конфигурационной силой, определяющей кинетику фронта реакции. Напряженно-деформированное состояние влияет на скорость фронта через сродство. Согласно (4.6) напряжения могут ускорять, замедлять и блокировать реакцию, см., напр., [13, 15, 16]. Фронт реакции может распространяться только если $A_{NN} \geq 0$. Если $A_{NN} < 0 \forall \mathbf{N}$, то фронт не может распространяться ни в каких направлениях. Это приводит к понятию запретных зон в пространстве деформаций или напряжений, образованных деформациями (напряжениями), при которых распространение фронта прямой реакции невозможно, и которые в случае упругих компонентов реакции строятся аналогично введенным ранее зонам фазовых переходов [12]. Примеры построения запретных зон [47, 48] отражают конкурирующее влияние химических энергий (энергий компонентов в натуральном состоянии) и энергии деформаций на возможность протекания реакции.

Заключение. Концепция конфигурационных сил была кратко представлена для случая фазовых и химических превращений, локализованных на фронте превращения. Вместе с тем возможны нелокализованные превращения, когда в каждом характерном объеме присутствуют в определенной пропорции обе фазы или исходный материал и

продукт химической реакции. При этом возникают вопросы о моделировании объемных превращений, о реализации различных типов превращений и об условиях перехода от объемных к локализованным превращениям и обратно. Поскольку объемные превращения также изменяют отсчетную конфигурацию, механика конфигурационных сил и здесь может найти эффективное применение.

Автор благодарен Н.Ф. Морозову за многолетнюю плодотворную поддержку исследований в области механики материалов, претерпевающих фазовые или химические превращения. Часть результатов, полученных нами совместно, нашла отражение и в этой статье.

Работа выполнена за счет гранта № 19-19-00552-П Российского научного фонда.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Maugin G.* Material Inhomogeneities in Elasticity. London: Chapman and Hall, 1993. 287 p.
2. *Gurtin M.E.* Configurational Forces as Basic Concepts of Continuum Physics Berlin: Springer, 2000. 249 p.
3. *Kienzler R., Herrmann G.* Mechanics in Material Space with Application to Defect and Fracture Mechanics. Berlin: Springer, 2000. 307 p.
4. Configurational mechanics of materials / Ed. by *Kienzler R., Maugin G.A.* CISM Courses and Lectures. No. 427. Wien: Springer, 2001. 307 p.
5. Mechanics of Material Forces / Ed. by *Steinmann P. et al.* Advances in Mechanics and Mathematics. Vol. 11. Springer, 2005. 337 p.
6. *Abeyaratne R., Knowles J.K.* Kinetic relations and the propagation of phase boundaries in solids // Arch. Rat. Mech. Anal. 1991. V. 114. P. 119–154.
7. *Abeyaratne R., Knowles J.K.* Evolution of Phase Transformation. A Continuum Theory. Cambridge: Univ. Press, 2006. 242 p.
8. IUTAM Symposium on Progress in the Theory and Numerics of Configurational Mechanics // Proc. IUTAM Symp. Held in Erlangen, Germany, 20–24 October 2008. P. 2009. Dordrecht: Springer, 282 p.
9. *Maugin G.* Configurational Forces. Thermomechanics, Physics, Mathematics, and Numerics. London, New York: Chapman&Hall/CRC Boca Raton, 2011. 527 p.
10. Defect and Material Mechanics / Ed. by *Kienzler R.* Springer, 2017. 172 p.
11. *Морозов Н.Ф., Назыров И.Р., Фрейдin А.Б.* Одномерная задача о фазовом превращении упругого шара // Докл. РАН. 1996. Т. 34. № 2. С. 188–191.
12. *Морозов Н.Ф., Фрейдin А.Б.* Зоны фазовых переходов и фазовые превращения упругих тел при различных видах напряженного состояния // Тр. мат. ин-та им. В.А. Стеклова. 1998. Т. 223. С. 220–232.
13. *Freidin A., Vilchevskaya E., Korolev I.* Stress-assist chemical reactions front propagation in deformable solids // Int. J. Eng. Sci. 2014. V. 83. P. 57–75.
14. *Вильчевская Е.Н., Фрейдin А.Б., Морозов Н.Ф.* Кинетика фронта химической реакции в центрально-симметричных задачах механохимии // Докл. РАН. 2015. Т. 461. № 5. С. 525–529.
15. *Freidin A., Morozov N.F., Petrenko S., Vilchevskaya E.* Chemical reactions in spherically symmetric problems of mechanochemistry // Acta Mech. 2016. V. 227 (1). P. 43–56.
16. *Poluektov M., Freidin A.B., Figiel L.* Modelling stress-affected chemical reactions in non-linear viscoelastic solids with application to lithiation reaction in spherical Si particles // Int. J. Engng. Sci. 2018. V. 128. P. 44–62.
17. *Freidin A.B., Korolev I.K., Aleshchenko S.P.* FEM-simulations of a chemical reaction front propagation in an elastic solid with a cylindrical hole // Mech.&Control of Solids&Struct. / Ed. by *Polyanskiy V.A. et al.*, 2012. P. 195–208.
18. *Гленцдорф П., Пригожин И.* Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Мир, 1973. 280 с.
19. *Бойко В.С., Гарбер Р.И., Косевич А.М.* Обратимая пластичность кристаллов. М.: Наука, 1991. 280 с.
20. *Труделл К.* Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. М.: Мир, 1975. 592 с.

21. *Wilmanski K.* Thermomechanics of Continua. Berlin: Springer, 1998. 273 p.
22. *Šilhavý M.* The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media. Berlin: Springer, 1997. 517 p.
23. *I-Shih Liu.* On interface equilibrium and inclusion problems // Cont. Mech. Thermodyn. 1992. V. 4. P. 177–186.
24. *Eshelby J.D.* Energy relations and the energy-momentum tensor in continuum mechanics // in: Inelastic Behavior of Solids / Ed. by *Kanninen M. et al.* New York: McGraw-Hill, 1970. P. 77–115.
25. *Eshelby J.D.* The elastic energy-momentum tensor // J. Elasticity. 1975. V. 5. № 4. P. 321–335.
26. *Knowles J.K.* On the dissipation associated with equilibrium shocks in finite elasticity // J. Elasticity. 1979. V. 9. № 2. P. 131–158.
27. *Гринфельд М.А.* Об условиях термодинамического равновесия фаз нелинейно-упругого материала // Докл. АН СССР. 1980. Т. 251. № 4. С. 824–828.
28. *Гринфельд М.А.* Методы механики сплошных сред в теории фазовых превращений. М.: Наука, 1990. 312 с.
29. *Трускиновский Л.* Равновесные межфазные границы // Докл. АН СССР. 1982. Т. 265. № 2. С. 306–310.
30. *Mueller R., Gross D.* 3D inhomogeneous, misfitting second phase particles equilibrium shapes and morphological development // Comput. Mater. Sci. 1999. Vol. 16. P. 53–60.
31. *Gross D., Kolling S., Mueller R. et al.* Configurational forces and their application in solid mechanics // Europ. J. Mech. A/Solids. 2003. V. 22. P. 669–692.
32. *Gross D.* Morphological equilibrium and kinetics of two-phase materials // in: Configurational Mechanics of Materials / Ed. by *Kienzler R., Maugin G.A.* Wien: Springer, 2001. P. 221–272.
33. *Berezovskii A., Engelbrecht J., Maugin G.A.* Numerical Simulation of Waves and Fronts in Inhomogeneous Solids. New Jersey: World Scientific, 2008. 229 p.
34. *Eremeyev V.A., Altenbach H.* Configurational forces in the theory of two-phase plates // in: Proc. IUTAM Symp. Held in Erlangen, Germany, 20–24 October 2008 / Ed. by *Steinmann P.* Dordrecht: Springer, 2009. P. 121–130.
35. *Eremeyev V.A., Pietraszkiewicz W.* Thermomechanics of shells undergoing phase transition // J. Mech. & Phys. Solids. 2011. V. 59. P. 1395–1412.
36. *Еремеев В.А., Фрейдин А.Б., Шарупова Л.Л.* Об устойчивости равновесия двухфазных упругих тел // ПММ. 2007. Т. 71. Вып. 1. С. 61–84.
37. *Freidin A.B., Eremeyev V.A.* On kinetic nature of hysteresis phenomena in stress-induced phase transformations // in: Dyn. Proc. in Generalized Continua and Struct. / Ed. by *Altenbach H. et al.*, Adv. Struct. Mater. 2019. V. 103. P. 223–229.
38. *Buttner C., Zacharias M.* Retarded oxidation of Si nanowires // Appl. Phys. Lett. 2006. V. 89. P. 263106.
39. *Heidemeyer H., Single C., Zhou F. et al.* Self-limiting and pattern dependent oxidation of silicon dots fabricated on silicon-on-insulator material // J. Appl. Phys. 2000. V. 8. P. 4580–4585.
40. *Jia Z., Li T.* Stress-modulated driving force for lithiation reaction in hollow nano-anodes // J. Power Sources. 2015. V. 275. P. 866–876.
41. *Freidin A.B., Vichevskaya E.N.* Chemical affinity tensor in coupled problems of mechanochemistry // in: Encycl. Cont. Mech. / Ed. by *Altenbach H. et al.* Berlin: Springer, 2020.
42. *Freidin A.B.* Chemical affinity tensor and stress-assist chemical reactions front propagation in solids // ASME 2013 Int. Mech. Engng. Congr. & Exposition. V. 9. Mechanics of Solids, Structures and Fluids. San Diego, CA, 2013. Paper No. IMECE2013-64957. P. V009T10A102.
43. *Фрейдин А.Б.* О тензоре химического сродства при химических реакциях в деформируемых материалах // Изв. РАН. МТТ. 2015. № 3. С. 35–68.
44. *Пригожин И., Дефей Р.* Химическая термодинамика. Новосибирск: Наука, 1966. 509 с.
45. *Русанов А.И.* Термодинамические основы механохимии. СПб.: Наука, 2006. 221 с.
46. *Rusanov A.I.* Surface thermodynamics revisited // Surf. Sci. Rep. 2005. V. 58. P. 111–239.
47. *Фрейдин А.Б., Шарупова Л.Л., Морозов Н.Ф.* О блокирующих деформациях в механохимии фронтов химических реакций // Чебышевский сб. 2017. Т. 18. № 3 (63). С. 475–487.
48. *Freidin A.B., Sharipova L.L.* Forbidden strains and stresses in mechanochemistry of chemical reaction fronts // in: Generalized Models and Non-classical Approaches in Complex Materials / Ed. by *Altenbach H. et al.*, Adv. Struct. Mat. Vol. 89. Cham: Springer, 2018. P. 335–348.

On Configurational Forces in Mechanics of Phase and Chemical Transformations

A. B. Freidin^{a,*}

^a Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS, St. Petersburg, Russia

*e-mail: alexander.freidin@gmail.com

A brief overview of the mechanics of configurational forces is given in relation to the description of the propagation of interphase boundaries and chemical reaction fronts. Configurations associated with transformations, kinematic conditions and balance equations across the interfaces are discussed. Then expressions are written for the energy dissipation due to the propagation of the interphase boundary or the chemical reaction front. This makes it possible to formulate additional constitutive equations – kinetic equations that determine the velocity of the interphase boundary or reaction front depending on the configuration force.

Keywords: interphase boundaries, configurational force, Eshelby energy-momentum tensor, chemical affinity tensor, mechanochemistry

REFERENCES

1. *Maugin G.* Material Inhomogeneities in Elasticity. L.: Chapman&Hall, 1993. 287 p.
2. *Gurtin M.E.* Configurational Forces as Basic Concepts of Continuum Physics Berlin: Springer, 2000. 249 p.
3. *Kienzler R., Herrmann G.* Mechanics in Material Space with Application to Defect and Fracture Mechanics. Berlin: Springer, 2000. 307 p.
4. Configurational mechanics of materials // CISM Courses and Lectures, no. 427, The International Centre for Mechanical Sciences / Ed. by *Kienzler R., Maugin G.A.* Wien: Springer, 2001. 307 p.
5. Mechanics of Material Forces / Ed. by *Steinmann P. et al.* Springer, 2005. 337 p.
6. *Abeyaratne R., Knowles J.K.* Kinetic relations and the propagation of phase boundaries in solids // Arch. Rat. Mech. Anal., 1991, vol. 114, pp. 119–154.
7. *Abeyaratne R., Knowles J.K.* Evolution of Phase Transformation. A Continuum Theory. Cambridge: Univ. Press, 2006. 242 p.
8. Proc. IUTAM Symp. Held in Erlangen, Germany, 20–24 October 2008 / Ed. by *Steinmann P.* Dordrecht: Springer, 2009. 282 p.
9. *Maugin G.* Configurational Forces. Thermomechanics, Physics, Mathematics, and Numerics. L.: Chapman&Hall/CRC Boca Raton, 2011. 527 p.
10. Defect and Material Mechanics / Ed. by *Kienzler R.*, Springer, 2017. 172 p.
11. *Morozov N.F., Nazyrov I.R., Freidin A.B.* One-dimensional problem of phase transformation of an elastic ball // Dokl. Akad. Nauk, 1996, vol. 346(2), pp. 188–191.
12. *Morozov N.F., Freidin A.B.* Phase transition zones and phase transformations of elastic solids under different stress states // Proc. Steklov Math. Inst., 1998, vol. 223, pp. 219–232.
13. *Freidin A., Vilchevskaya E., Korolev I.* Stress-assist chemical reactions front propagation in deformable solids // Int. J. Eng. Sci., 2014, vol. 83, pp. 57–75.
14. *Vilchevskaya E., Freidin A., Morozov N.* Chemical reaction front kinetics in spherically-symmetric problems of mechanochemistry // Dokl. Phys., 2015, vol. 60, no. 4, pp. 175–179.
15. *Freidin A., Morozov N.F., Petrenko S., Vilchevskaya E.* Chemical reactions in spherically symmetric problems of mechanochemistry // Acta Mech., 2016, vol. 227(1), pp. 43–56.
16. *Poluektov M., Freidin A.B., Figiel L.* Modelling stress-affected chemical reactions in non-linear viscoelastic solids with application to lithiation reaction in spherical Si particles // Int. J. Engng. Sci., 2018, vol. 128, pp. 44–62.
17. *Freidin A.B., Korolev I.K., Aleshchenko S.P.* FEM-simulations of a chemical reaction front propagation in an elastic solid with a cylindrical hole // in: Mechanics and Control of Solids and Structures / Ed. by *Polyanskiy V.A. et al.*, 2022, pp. 195–208.
18. *Glansdorff P., Prigogine I.* Thermodynamic theory of stability and fluctuation. N.Y.: Wiley-Intersci., 1971.
19. *Boiko V.S., Garber R.I., Kosevich A.M.* The Reversible Plasticity of Crystals. Moscow: Nauka; 1991. (in Russian)

20. *Truesdell C.* A First Course in Rational Continuum Mechanics. Baltimore: The Johns Hopkins Univ., 1972.
21. *Wilmanski K.* Thermomechanics of Continua. Berlin: Springer, 1998. 273 p.
22. *Šilhavý M.* The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media. Berlin: Springer, 1997. 517 p.
23. *I-Shih Liu.* On interface equilibrium and inclusion problems // *Cont. Mech. Thermodyn.*, 1992, vol. 4, pp. 177–186.
24. *Eshelby J.D.* Energy relations and the energy-momentum tensor in continuum mechanics // in: *Inelastic Behavior of Solids* / Ed. by *Kanninen M. et al.* N.Y.: McGraw-Hill, 1970. pp. 77–115.
25. *Eshelby J.D.* The elastic energy-momentum tensor // *J. Elasticity*, 1975, vol. 5, no. 4, pp. 321–335.
26. *Knowles J.K.* On the dissipation associated with equilibrium shocks in finite elasticity // *J. Elasticity*, 1979, vol. 9, no. 2, pp. 131–158.
27. *Grinfeld M.* On conditions of thermodynamic equilibrium of phases of a nonlinearly elastic material // *Sov. Math. Dokl.*, 1980, vol. 251, pp. 824–827.
28. *Grinfeld M.A.* Continuum Mechanics Methods in the Theory of Phase Transformations. Moscow: Nauka, 1991. (in Russian)
29. *Truskinovsky L.* Equilibrium interphase boundaries // *Sov. Phys. Dokl.*, 1982, vol. 27, pp. 306–331.
30. *Mueller R., Gross D.* 3D inhomogeneous, misfitting second phase particles equilibrium shapes and morphological development // *Comput. Mater. Sci.*, 1999, vol. 16, pp. 53–60.
31. *Gross D., Kolling S., Mueller R. et al.* Configurational forces and their application in solid mechanics // *Europ. J. Mech. A/Solids*, 2003, vol. 22, pp. 669–692.
32. *Gross D.* Morphological equilibrium and kinetics of two-phase materials. In: *Configurational mechanics of materials* // in: *CISM Courses and Lectures*. no. 427. The International Centre for Mechanical Sciences / Ed. by *Kienzler R., Maugin G.A.* Wien: Springer, 2001. pp. 221–272.
33. *Berezovski A., Engelbrecht J., Maugin G.A.* Numerical Simulation of Waves and Fronts in Inhomogeneous Solids. New Jersey: World Sci., 2008. 229 p.
34. *Eremeyev V.A., Altenbach H.* Configurational forces in the theory of two-phase plates // in: *Proc. IUTAM Symp. Held in Erlangen, Germany, 20–24 October 2008.* / Ed. by *Steinmann P.* Dordrecht: Springer, 2009. pp. 121–130.
35. *Eremeyev V.A., Pietraszkiewicz W.* Thermomechanics of shells undergoing phase transition // *J. Mech.&Phys. Solids*, 2011, vol. 59, pp. 1395–1412.
36. *Yeremeyev V.A., Freidin A.B., Sharipova L.L.* The stability of the equilibrium of two-phase elastic solids // *JAMM*, 2007, vol. 71, pp. 61–84.
37. *Freidin A.B., Eremeyev V.A.* On kinetic nature of hysteresis phenomena in stress-induced phase transformations // In: *Dyn. Proc. in Generalized Continua and Struct* / Ed. by *Altenbach H. et al.*, pp. 223–229.
38. *Buttner C., Zacharias M.* Retarded oxidation of Si nanowires // *Appl. Phys. Lett.*, 2006, vol. 89, pp. 263106.
39. *Heidemeyer H., Single C., Zhou F. et al.* Self-limiting and pattern dependent oxidation of silicon dots fabricated on silicon-on-insulator material // *J. Appl. Phys.*, 2000, vol. 8, pp. 4580–4585.
40. *Jia Z., Li T.* Stress-modulated driving force for lithiation reaction in hollow nano-anodes // *J. Power Sources*, 2015, vol. 275, pp. 866–876.
41. *Freidin A.B., Vilchevskaya E.N.* Chemical affinity tensor in coupled problems of mechanochemistry // in: *Encycl. Cont. Mech.* / Ed. by *Altenbach H. et al.* Berlin: Springer, 2020.
42. *Freidin A.B.* Chemical affinity tensor and stress-assist chemical reactions front propagation in solids // *ASME 2013 Int. Mech. Engng. Congr.&Expos.*, Vol. 9. *Mech. Solids, Struct.&Fluids*. San Diego, CA, 2013. Paper no. IMECE2013-64957. pp. V009T10A102.
43. *Freidin A.B.* On a chemical affinity tensor for chemical reactions in deformable solids // *Mech. Solids*, 2015, vol. 50, pp. 260–285.
44. *Prigogine I., Defay R.* Chemical thermodynamics. L.: Longmans, Green, 1954.
45. *Rusanov A.I.* Thermodynamic Foundations of Mechanochemistry. St-Petersburg: Nauka, 2006. (in Russian)
46. *Rusanov A.I.* Surface thermodynamics revisited // *Surface Sci. Rep.*, 2005, vol. 58, pp. 111–239.
47. *Freidin A.B., Sharipova L.L., Morozov N.F.* On locking strains in mechanochemistry of chemical reactions fronts // *Chebyshevskii Sb.*, 2017, vol. 18(3), pp. 469–481. (in Russian)
48. *Freidin A.B., Sharipova L.L.* Forbidden strains and stresses in mechanochemistry of chemical reaction fronts // in: *Generalized Models and Non-classical Approaches in Complex Materials* / Ed. by *Altenbach H. et al.* Cham: Springer, 2018. pp. 335–348.