

# LÝ THUYẾT KHUẾCH TÁN SUY RỘNG VỀ CÁC HỖN HỢP RẮN

## I. HỖN HỢP ĐỒNG THỂ ĐÀN HỒI — NHIỆT

TRƯƠNG MINH CHÁNH

CƠ sở lý thuyết về các hỗn hợp đồng thể lỏng theo quan điểm khuếch tán suy rộng đã được xây dựng và trình bày chi tiết trong công trình [1, 2]. Hỗn hợp đồng thể đàn hồi — nhiệt thường được mô tả bằng lý thuyết khuếch tán cổ điển [3, 4, 5]. Mô hình hỗn hợp đồng thể đàn hồi — nhiệt xây dựng dưới đây là sự phát triển lý thuyết khuếch tán suy rộng cho các vật rắn, trong phần II của bài báo sẽ trình bày việc mô hình hóa các vật liệu composit.

### §1. ĐỘNG HỌC

Xét một hỗn hợp đồng thể rắn  $n$  chất hợp thành lồng thắm lẫn nhau, các khái niệm như quy luật chuyển động, vận tốc, dòng khuếch tán của mỗi thành phần... được dẫn ra như trong (1, 2), sau đây ta định nghĩa thêm một số khái niệm khác cần thiết để xét hỗn hợp rắn. Đối với hỗn hợp đồng thể ta có thể đưa ra khái niệm «điểm vật chất chung»  $\vec{X}^a$  chuyển động với vận tốc trung bình  $\vec{u}^a$  và xét chuyển động trung bình của hỗn hợp theo quy luật đơn trị trong hồ:

$$\vec{x} = \vec{x}(\vec{X}^a, t) \quad (1.1)$$

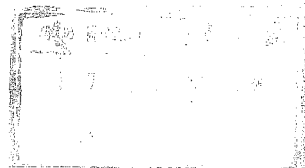
Quy luật chuyển động trung bình (1.1) của hỗn hợp được xác định từ bài toán:

$$\left. \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} \right|_{\vec{X}^a} = \vec{u}^a, \quad \vec{x}(\vec{X}^a, 0) = \vec{X}^a \quad (1.2)$$

Ta xác định các véc tơ dịch chuyển như sau:

$$\begin{aligned} \vec{W}_\alpha &= \vec{x}_\alpha - \vec{X}_\alpha, & \vec{w}^\alpha &= \vec{x} - \vec{X}^\alpha \\ \vec{w}_\alpha^a &= \vec{W}_\alpha - \vec{W}^a \end{aligned} \quad (1.3)$$

trong đó  $\vec{W}_\alpha$ ,  $\vec{W}^a$ , và  $\vec{W}_\alpha^a$  tương ứng là véc tơ dịch chuyển của thành phần thứ  $\alpha$ , véc tơ dịch chuyển trung bình của hỗn hợp và véc tơ dịch chuyển tương đối của thành phần thứ  $\alpha$  so với dịch chuyển trung bình của hỗn hợp.



liên quan giữa các dịch chuyển với các vận tốc có dạng:

$$\frac{\partial \vec{W}_\alpha}{\partial t} \Big|_{X_\alpha} = \vec{u}_\alpha, \quad \frac{\partial \vec{W}^a}{\partial t} \Big|_{X^a} = \vec{u}^a, \quad \frac{\partial \vec{W}_\alpha^a}{\partial t} \Big|_{X_\alpha} = (\vec{u}_\alpha - \vec{u}^a) \frac{\partial X^a}{\partial x} \quad (1.4)$$

c khái niệm như tensor biến dạng trung bình  $\bar{e}^a$ , ten xơ vận tốc biến dạng trung bình  $\bar{e}^a$  định nghĩa trong tự như trong cơ học môi trường liên tục.

Để kết thúc phần trình bày sơ bộ các khái niệm động học của lý thuyết khuếch tán mở rộng ta nhận xét rằng nhờ có các công thức (1.1), (1.3) và (1.4) ta có thể coi các đại lượng đặc trưng cơ bản của chuyển động tương đối là hàm của các biến  $X^a, t$  hoặc  $x, t$  và do đó cùng với các đặc trưng khác chung cho toàn hỗn hợp như vận tốc  $\vec{u}^a$ , dịch chuyển  $\vec{W}^a, \dots$  sẽ được mô tả hoặc trong hệ quy chiếu, hoặc trong hệ Lagrangio gắn liền với điểm  $X^a$ .

## §2. CÁC ĐỊNH LUẬT CÂN BẰNG CƠ BẢN

Các định luật cân bằng cơ bản của hỗn hợp đồng thể rắn và lỏng đã được giả định trong [1, 2]. Chúng bao gồm các phương trình:

$$\frac{d^{(a)}\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \vec{u}^a = - \sum_\alpha \nabla \cdot \vec{J}_\alpha^a \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{d^{(a)}\vec{u}^a}{dt} &= \rho \vec{f} + \nabla \cdot \vec{T} - \sum_\alpha \left\{ \frac{\mathcal{D}^{(a)} \vec{J}_\alpha^a}{\mathcal{D}t} + \nabla \cdot \frac{\vec{J}_\alpha^a \vec{J}_\alpha^a}{\rho_\alpha} \right\} \\ \rho \frac{d^{(a)}\vec{e}}{dt} + \sum_\alpha \vec{J}_\alpha^a \cdot \nabla \vec{e} &= \rho \vec{r} + \nabla \cdot \vec{q} + \frac{1}{2} \sum_\alpha m_\alpha \frac{\vec{J}_\alpha^a \cdot \vec{J}_\alpha^a}{\rho_\alpha} + \\ \sum_\alpha \vec{J}_\alpha^a \cdot \left\{ \left( \vec{r}_\sigma - \frac{\rho_{n\alpha} \sigma}{\rho_\sigma u_n} \vec{r}_n \right) - \left( 1 - \frac{\rho_{n\alpha} \sigma}{\rho_\sigma u_n} \right) \frac{d^{(a)}\vec{u}^a}{dt} - \frac{\vec{Q}_\sigma^u}{\rho_\sigma} + \right. \\ \left. \frac{a_\sigma}{a_n \rho_\sigma} \left( \frac{\mathcal{D}^{(a)} \vec{J}_n^a}{\mathcal{D}t} + \nabla \cdot \frac{\vec{J}_n^a \vec{J}_n^a}{\rho_n} \right) \right\} &+ \vec{r} : \Delta \vec{u}^a + \sum_\sigma \vec{R}_\sigma^a : \nabla \frac{\vec{J}_\sigma^u}{\rho_\sigma} \\ \rho \frac{d^{(a)}C_\alpha}{dt} &= - \nabla \cdot \vec{J}_\alpha^a + C_\alpha \sum_\beta \nabla \cdot \vec{J}_\beta^a + m_\alpha \cdot \sum_\alpha m_\alpha = 0. \end{aligned}$$

$$\frac{\mathcal{D}^{(a)} \vec{J}_\sigma^a}{\mathcal{D}t} + \nabla \cdot \frac{\vec{J}_\sigma^a \vec{J}_\sigma^a}{\rho_\sigma} = \vec{Q}_\sigma^a + \nabla \cdot \vec{R}_\sigma^a$$

$$(\alpha, \beta = 1, 2, \dots, n; \quad \sigma = 1, 2, \dots, n-1)$$

trong đó

$$\rho = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha}, \quad \rho \vec{r} = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \vec{r}_{\alpha}, \quad C_{\alpha} = \rho_{\alpha} / \rho$$

$$\frac{\mathcal{D}^{(a)} \vec{J}_{\alpha}^a}{\mathcal{D}t} = \frac{d^{(a)} \vec{J}_{\alpha}^a}{dt} + \vec{J}_{\alpha}^a \cdot \Delta \vec{u}^a + \vec{J}_{\alpha}^a \nabla \cdot \vec{u}^a \quad (2.2)$$

đại lượng  $\rho_{\alpha}$  được gọi là mật độ khối lượng của thành phần thứ  $\alpha$ ,  $C_{\alpha}$  là nồng độ của thành phần thứ  $\alpha$ ,  $\vec{r}_{\alpha}$  là lực khối tác động trong chất hợp thành thứ  $\alpha$ ,  $t$  là ten xơ ứng suất hạng hai đối xứng,  $\epsilon$  là mật độ nội năng,  $r$  là mật độ nguồn nhiệt,  $\vec{q}$  là mật độ dòng nhiệt  $\vec{R}_{\sigma}^a$  là ten xơ hạng hai - lực mật phụ được giả định chỉ sinh công trên quãng đường dịch chuyển tương đối,  $m_{\alpha}$  là vận tốc sản sinh khối lượng của thành phần thứ  $\alpha$ . Nếu giữa các thành phần của hỗn hợp không xảy ra các phản ứng hóa học thì  $m_{\alpha} = 0$ , nếu trong hỗn hợp xảy ra phản ứng hóa học độc lập thì ta có:

$$m_{\alpha} = \sum_{\delta} v_{\alpha\delta} M_{\alpha} \tilde{W}_{\delta}, \quad \sum_{\alpha} v_{\alpha\delta} M_{\alpha} = 0, \quad (\delta = 1, 2, \dots, r) \quad (2.3)$$

Đại lượng  $v_{\alpha\delta}$  được gọi là hệ số hợp thức của chất hợp thành thứ  $\alpha$  trong phản ứng thứ  $\delta$ ,  $M_{\alpha}$  là phân tử lượng của chất  $\alpha$  còn  $\tilde{W}_{\delta}$  là vận tốc của phản ứng hóa học thứ  $\delta$ .

Ký hiệu  $\sum_{\alpha}$  chỉ việc lấy tổng theo tập các giá trị của  $\alpha$ .

### § 3. BẤT ĐẲNG THỨC ENTROPI ĐỐI VỚI HỖN HỢP ĐỒNG THỂ ĐÀN HỒI NHIỆT

Giả định hỗn hợp ở trạng thái cân bằng nhiệt, khi đó đối với hỗn hợp đồng thể rắn ta có thể chọn các đại lượng đặc trưng ví mô như ten xơ biến dạng trung bình  $\bar{e}^a$  nhiệt độ  $T$  (hay mật độ entropi  $\eta_{\sigma}$  tương ứng) và các nồng độ  $C_{\sigma}$  ( $\sigma = 1, 2, \dots, n-1$ ) làm biến số cấu trúc của hàm nội năng. Như vậy ta có thể giả định đối với hỗn hợp đồng thể rắn:

$$\epsilon = \epsilon(\bar{e}^a, \eta, C_{\sigma}) \quad (3.1)$$

Hàm nội năng  $\epsilon$  cho ở dạng trên thỏa mãn nguyên lý khách quan.

Giả định rằng tốc độ thay đổi theo thời gian của hàm nội năng là một đại lượng bất biến, khi đó ta có thể trình bày nó ở dạng:

$$\frac{d^{(a)} \epsilon}{dt} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \bar{e}^a} \cdot \frac{\mathcal{D}^{(a)} \bar{e}^a}{\mathcal{D}t} + \frac{\partial \epsilon}{\partial \eta} \frac{d^{(a)} \eta}{dt} + \sum_{\sigma} \frac{\partial \epsilon}{\partial C_{\sigma}} \frac{d^{(a)} C_{\sigma}}{dt} = \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial \bar{e}^a} : \bar{d}^a + \frac{\partial \epsilon}{\partial \eta} \frac{d^{(a)} \eta}{dt} + \frac{1}{\rho} \sum_{\sigma} \frac{\partial \epsilon}{\partial C_{\sigma}} \left[ -\nabla \cdot \vec{J}_{\sigma}^a + C_{\sigma} \sum_{\alpha} \nabla \cdot \vec{J}_{\sigma}^a + m_{\sigma} \right]$$

trong đó  $\frac{\mathcal{D}^{(a)}}{\mathcal{D}t}$  (...) là đạo hàm bất biến Oldroyd.

Sử dụng (3.2) ta có thể viết phương trình năng lượng (2.1) dưới dạng:

$$\rho \frac{d^{(a)} \eta}{dt} + \sum_{\alpha} \vec{J}_{\alpha}^a \cdot \nabla \eta - \rho \frac{r}{T} - \nabla \cdot \frac{\vec{q}}{T} = \rho r \quad (3.3)$$

ở đó

$$\rho^l = \vec{q}^* \cdot \frac{\nabla T}{T^2} + \frac{1}{T} \sum_{\sigma} \ln_{\sigma} \left( \frac{1}{2} \frac{\vec{J}_{\sigma}^u \cdot \vec{J}_{\sigma}^a}{\rho_{\sigma}^2} - \frac{1}{2} \frac{\vec{J}_{n}^a \cdot \vec{J}_{n}^a}{\rho_n^2} - \mu_{\sigma} \right) - \quad (3.4)$$

$$\frac{1}{T} \sum_{\sigma} \vec{F}_{\sigma}^a \cdot \vec{J}_{\sigma}^a + \frac{1}{T} \bar{t}^D : \bar{d}^a + \frac{1}{T} \sum_{\sigma} \bar{R}_{\sigma}^a : \nabla \frac{\vec{J}_{\sigma}^a}{\rho_{\sigma}} \geq 0$$

án phẩm entropi được giả định không âm đối với mọi quá trình nhiệt động lực học độc  
Bất đẳng thức (3.4) là bất đẳng thức entropi biểu diễn nguyên lý nhiệt động học thứ  
đối với quá trình không thuận nghịch xảy ra trong hỗn hợp rắn đồng thể.

Trong (3.2)-(3.4) ta đặt:

$$T \equiv \frac{\partial E}{\partial \eta} \Big|_{e^a, C_{\sigma}}, \quad \mu_{\sigma} \equiv \frac{\partial s}{\partial C_{\sigma}} \Big|_{e^a, \eta, C_{\gamma \neq \sigma}}, \quad \bar{t}^E \equiv \rho \frac{\partial E}{\partial e^a} \Big|_{\eta, C_{\sigma}}$$

$$\vec{q}^* \equiv \vec{q} - \sum_{\sigma} \vec{J}_{\sigma}^a \left[ \left( 1 - \frac{\rho_n a_{\sigma}}{\rho_{\sigma} a_n} \right) \sum_{\gamma} C_{\gamma} \mu_{\gamma} - \mu_{\sigma} \right],$$

$$\vec{F}_{\sigma}^a \equiv \left( \vec{f}_{\sigma} - \frac{\rho_n a_{\sigma}}{\rho_{\sigma} a_n} \vec{f}_n \right) + \left( 1 - \frac{\rho_n a_{\sigma}}{\rho_{\sigma} a_n} \right) \left[ \sum_{\gamma} C_{\gamma} \nabla \mu_{\gamma} - \frac{d^{(a)} \vec{u}^a}{dt} - \nabla e^a : \frac{\partial \varepsilon}{\partial e^a} \right] - \frac{\vec{Q}_{\sigma}^a}{\rho_{\sigma}} - \nabla \mu_{\sigma} + \frac{a_{\sigma}}{\rho_{\sigma} a_n} \left( \frac{\mathcal{D}^{(a)} \vec{J}_n^a}{\mathcal{D}t} + \nabla \cdot \frac{\vec{J}_n^a \vec{J}_n^a}{\rho_n} \right).$$

$$\equiv \bar{t}^D + \bar{t}^E, \quad d^{(a)} = \frac{\mathcal{D}^{(a)} e^a}{\mathcal{D}t} = \frac{1}{2} (\nabla \vec{u}^a + \vec{u}^a \nabla) (\sigma, \gamma = 1, 2, \dots, n-1) \quad (3.5)$$

lượng  $\mu_{\sigma}$  là thế hóa học,  $\bar{t}^E$  là phần ứng xuất đàn hồi còn  $\bar{t}^D$  là phần ứng xuất  
to tán.

Để tiện cho việc tuyến tính hóa phương trình thường sử dụng hàm lượng tự do  $\psi$   
ay cho hàm nội năng.

$$\text{Với} \quad \psi = \varepsilon - T\eta = \psi(e^a, T, C_{\sigma}) \quad (3.6)$$

ằng cách làm hoàn toàn tương tự ta nhận được:

$$\eta \equiv - \frac{\partial \psi}{\partial T} \Big|_{e^a, C_{\sigma}}, \quad \mu_{\sigma} \equiv \frac{\partial \psi}{\partial C_{\sigma}} \Big|_{e^a, T, C_{\gamma \neq \sigma}}, \quad \bar{t}^E = \rho \frac{\partial \psi}{\partial e^a} \Big|_{T, C_{\gamma}} \quad (3.7)$$

#### §4. LÝ THUYẾT TUYẾN TÍNH VỀ HỖN HỢP ĐÀN HỒI NHIỆT ĐẲNG HƯỚNG

Xét hỗn hợp đồng thể nhiệt - đàn hồi  $\bar{t} = \bar{t}^E$  khi dịch chuyển  $\vec{w}^a$ , nồng độ  
 $\bar{C}_{\sigma} = C_{\sigma} - C_{\sigma}^0$ , nhiệt độ  $\theta = T - T^0$  rất nhỏ, trong đó  $C_{\sigma}^0, T^0$  là các giá trị tương ứng ở  
trạng thái tự nhiên ban đầu và bỏ qua ảnh hưởng của  $\bar{R}_{\sigma}^a$ .

Nhờ các giả thiết đã nêu và sử dụng phép phân tích tenxơ thành tổng các tenxơ trục  
giao [1], thì trong khuôn khổ lý thuyết tuyến tính đối với môi trường đẳng hướng ta có thể  
khai triển hàm  $\rho\psi$  ra chuỗi lũy thừa theo các biến số và chỉ giới hạn xét tới số hạng bậc  
hai ở dạng:

$$\rho\psi = \rho^0\psi = \frac{1}{2} \alpha^1 (e_0^a)^2 + \frac{1}{2} \alpha^2 \overline{e_2^a} : \overline{e_2^a} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\gamma} \alpha_{\sigma\gamma}^3 \tilde{C}_{\sigma} \tilde{C}_{\gamma} +$$

$$+ \sum_{\sigma} \alpha_{\sigma}^4 e_0^a \tilde{C}_{\sigma} + \frac{1}{2} \alpha^5 \theta^2 + \sum_{\sigma} \alpha_{\sigma}^6 \tilde{C}_{\sigma} \theta + \alpha^7 e_0^a \theta \quad (4.1)$$

(\sigma, \gamma = 1, 2, \dots, n-1)

trong đó  $\alpha_{\sigma\gamma}^3 = \alpha_{\sigma\gamma}^3$ ,  $\rho^0$  là mật độ ban đầu. Để nhận (4.1) ta đã sử dụng giả định là ở trạng thái ban đầu khi không có biến dạng thì cũng không có ứng suất và bỏ qua số hạng bậc nhất theo  $\theta$  vì nó không đóng vai trò quan trọng trong các phương trình sau này của ta. Sử dụng (3.7), (4.1) và phép phân tích tenxơ thành tổng các tenxơ trực giao ta nhận được các phương trình trạng thái:

$$t_0 = \frac{1}{3} \left( \alpha^1 e_0^a + \sum_{\sigma} \alpha_{\sigma}^4 \tilde{C}_{\sigma} + \alpha^7 \theta \right)$$

$$t_2 = \alpha^2 \overline{e_2^a}$$

$$\mu_{\sigma} = \frac{1}{\rho_0} \left( \sum_{\gamma} \alpha_{\sigma\gamma}^3 \tilde{C}_{\gamma} + \alpha_{\sigma}^4 e_0^a + \alpha_{\sigma}^6 \theta \right) \quad (4.2)$$

$$\eta = -\frac{1}{\rho_0} \left( \alpha^5 \theta + \sum_{\sigma} \alpha_{\sigma}^6 \tilde{C}_{\sigma} + \alpha^7 e_0^a \right)$$

(\sigma, \gamma = 1, 2, \dots, n-1)

Các phương trình trạng thái (4.2) có dạng tương tự như trong [5].

Các hệ số vật chất  $\alpha$  nói chung được coi là không đổi. Các điều kiện hạn chế nhiệt động học đối với các hệ số có thể khảo sát nếu cho rằng các điều kiện nhận được trong trường hợp đẳng nhiệt cũng đúng cho trường hợp chung. Trong trường hợp đẳng nhiệt nếu giả định  $\rho\psi \geq 0$  với mọi quá trình biến dạng và thay đổi nồng độ một cách độc lập thì ta sẽ nhận được các điều kiện nhiệt động học sau:

$$\alpha^1 \geq 0, \alpha^2 \geq 0, \alpha_{\sigma\sigma}^3 \geq 0, \alpha^5 \geq 0, \alpha^1 \alpha_{\sigma\sigma}^3 - (\alpha_{\sigma}^4)^2 \geq 0$$

$$\alpha^1 \alpha^5 - (\alpha^7)^2 \geq 0, \alpha_{\sigma\sigma}^3 \alpha^5 - (\alpha_{\sigma}^6)^2 \geq 0, \alpha_{\sigma\sigma}^3 \alpha_{\gamma\gamma}^3 - (\alpha_{\sigma\gamma}^3)^2 \geq 0 \quad (4.4)$$

Từ nguyên lý Curier đối với môi trường đẳng hướng, tương quan Onsager và giả thuyết tuyến tính ta có các hàm cấu trúc hao tán ở dạng:

$$\tilde{W}_{\delta} = \sum_{\kappa} l_{\delta\kappa}^1 \tilde{A}_{\kappa}, \quad \tilde{A}_{\kappa} = - \sum_{\delta} v_{\delta\kappa} M_{\sigma} \mu_{\sigma}$$

$$\vec{q}^* = l^2 \frac{\nabla T}{T} + \sum_{\sigma} l_{\sigma}^3 \vec{J}_{\sigma}^a = \vec{q}$$

$$\vec{F}_{\sigma}^a = -l_{\sigma}^3 \frac{\nabla T}{T} + \sum_{\gamma} l_{\sigma\gamma}^4 \vec{J}_{\gamma}^a \quad (4.5)$$

Để bất đẳng thức (3.4) thỏa mãn với mọi quá trình cơ nhiệt độc lập cần có các điều kiện hạn chế sau:

$$l_{\sigma\sigma}^1 \geq 0, l^2 \geq 0, l_{\sigma\sigma}^4 \geq 0, l_{\sigma\sigma}^1 l_{\gamma\gamma}^1 - (l_{\sigma\gamma}^1)^2 \geq 0,$$

$$l_{\sigma\gamma}^1 = l_{\gamma\sigma}^1, l_{\sigma\sigma}^1 l_{\kappa\kappa}^1 - (l_{\sigma\kappa}^1)^2 \geq 0, l_{\sigma\kappa}^1 = l_{\kappa\sigma}^1 \quad (4.6)$$

Để dàng chỉ ra rằng từ mô hình đã xây dựng có thể xét các mô hình cô điển [3-5] như các trường hợp riêng.

Tác giả chân thành cảm ơn anh Nguyễn Văn Điệp đã thảo luận và góp ý hoàn thiện công trình.

Địa chỉ:  
Đại học Tổng hợp

Ngày nhận 31/3/1981  
(Xem tiếp trang 24)