Диссертация
на соискание академической степени магистра
по направлению 15.04.03 «Прикладная механика»

Моделирование распространения фронтов химических реакций в деформируемых телах

Выполнила: студентка группы 63602/4 Петренко С.Е.
Научный руководитель: Проф.,д.ф.-м.н. Фрейдин А.Б.

Санкт-Петербург, 2017

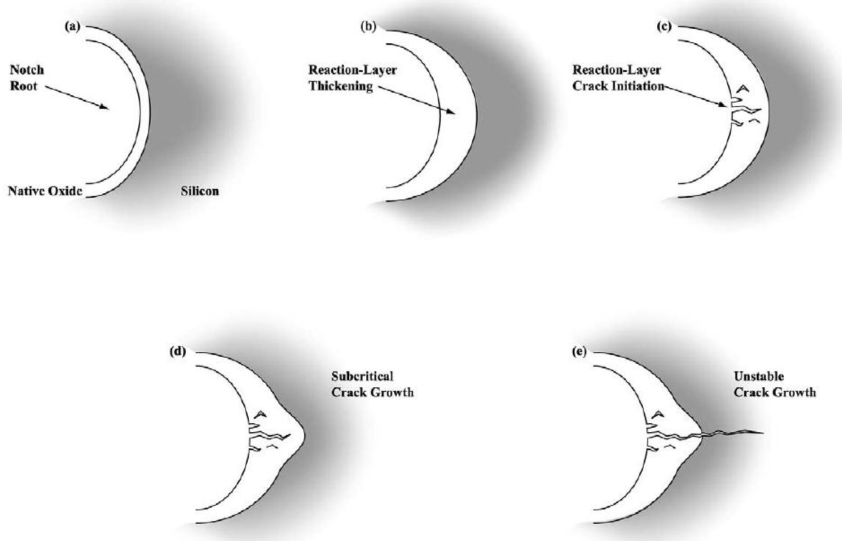
Актуальность проблемы

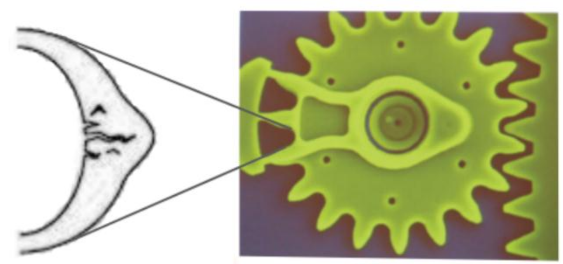
Механохимия. Связанные задачи описания химических и механических процессов.

MEMS: многоцикловая усталость кремниевых шестеренок

$Si + O_2 \rightarrow SiO_2$

Interface SiO_2/Si

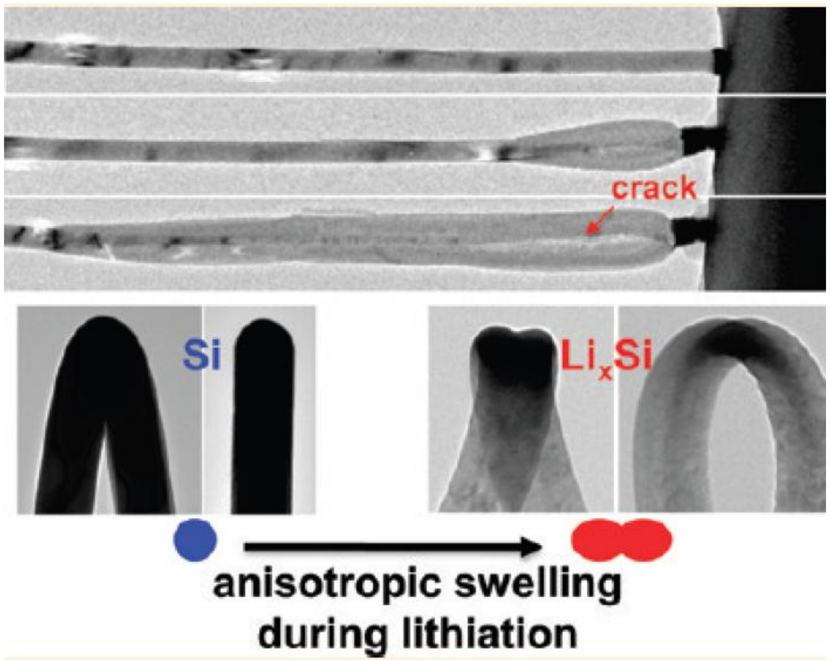


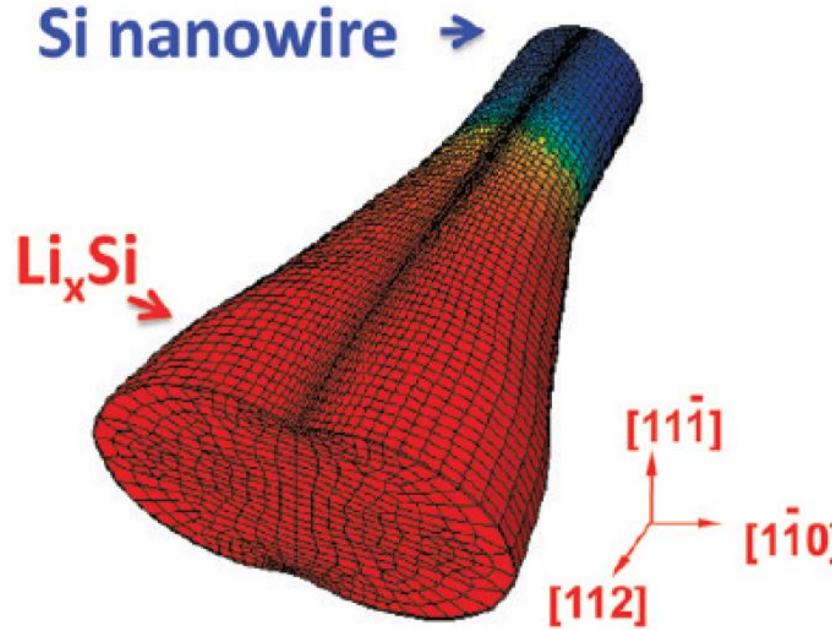


Эксперимент: Muhlstein et al (2001, 2002, …)

Актуальность проблемы

Разбухание кремниевых нанопроволок в процессе литизации





X.H. Liu et al. Anisotropic Swelling and Fracture of Silicon Nanowires during Lithiation, Nano Letters, 2011

Цели работы

Постановка и решение связанных задач механохимии для неупругих продуктов реакции

1) Плоский фронт реакции в зажатой пластине для:

- линейного вязко-упругого превращенного материала, описываемого моделью Максвелла
- линейно вязкого превращенного материала
- линейного вязко-упругого превращенного материала, описываемого моделью Кельвина-Фойгта

2) Плоский фронт химической реакции в свободной пластине для линейно вязкого превращенного материала

3) Сферический фронт химической реакции для:

- линейно вязкого превращенного материала
- линейного вязко-упругого превращенного материала, описываемого моделью Кельвина-Фойгта

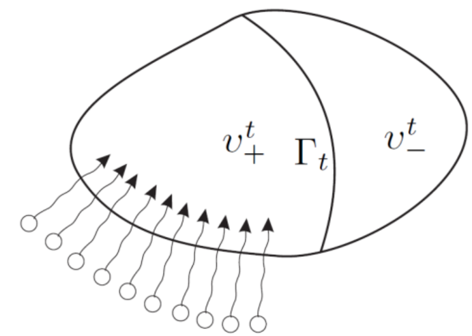
4) Распространение сферического фронта химической реакции для упруго-пластического превращенного материала

Модели реакций, контролируемых диффузией

Уравнение диффузии, напр., $\Delta c = 0$

$D \left.\frac{\partial c}{\partial N}\right|_{\Omega} - \alpha\big(c_* - c(\Omega)\big) = 0$ на внешней поверхности тела

$D \left.\frac{\partial c}{\partial N}\right|_{\Gamma} + k_* \omega(\Gamma) = 0$ на фронте химической реакции



D – коэффициент диффузии

α – коэффициент переноса, c_* - растворимость B_* в B_+

ω– скорость реакции

Модели:

- Deal-Groove – модель окисления (1965) – плоский фронт реакции, без напряжений
- Kao et al. 1987. Напряжения влияют через $D = D(\sigma), \kappa = \kappa(\sigma)$
- Дополнительные слагаемые в уравнении диффузии (J. Toribio, A.G. Knyazeva,…)

Влияние напряжений на скорость реакции через влияние на диффузию

Химическое сродство

Производство энтропии: $\mathrm{T}P[S] = A\omega \geq 0$, где ω – скорость реакции

$$A = -\sum n_i M_i \mu_i$$

- химическое сродство, M_i - молярная масса i-ой компоненты; μ_i - химический потенциал i-ой компоненты; n_i - стехиометрический коэффициент

Кинетическое уравнение (Пригожин И., Дефей Р., 1954) $\omega = \omega(A), \omega(0) = 0$

$$\omega = \vec{\omega}\left(1 - \exp\left(-\frac{A}{RT}\right)\right), W_N = \frac{n_- M_-}{\rho_-}\omega_{\ N}$$

Фрейдин А.Б.: Напряжения влияют на скорость реакции через тензор химического сродства

$$A_{NN} = \frac{n_- M_-}{\rho_-}\left(\gamma(T) + \frac{1}{2}\varepsilon_-: C_-: \varepsilon_- - \frac{1}{2}(\varepsilon_+ - \varepsilon_{tr}): C_+: (\varepsilon_+ - \varepsilon_{tr}) + \sigma_-: [\![\varepsilon]\!]\right) +$$

$$+ n_* RT ln\frac{c}{c_*}$$

Скорость реакции на площадке с нормалью N

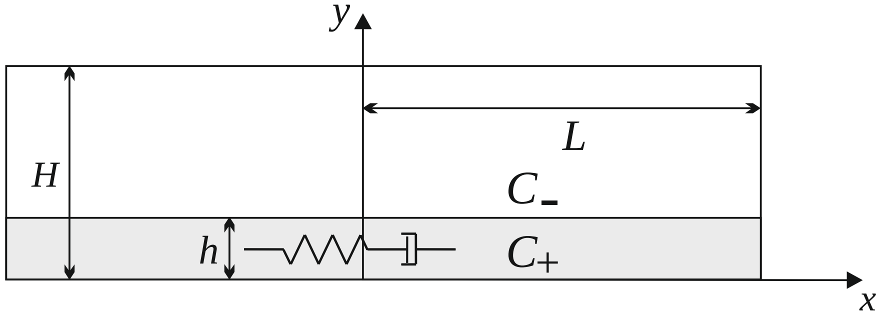
$$W_N = \frac{n_- M_-}{\rho_-} k_* c\left(1 - \exp\left(-\frac{A_{NN}}{RT}\right)\right)$$

В деформируемом теле реакция идет не в точках, а на ориентированных площадках$\Longrightarrow$ тензор химического сродства

Фрейдин А.Б. О тензоре химического сродства при химических реакциях в деформируемых материалах. МТТ. 2014
Freidin A., On chemical reaction fronts in nonlinear elastic solids, 2009

Распространение плоского фронта химической реакции зажатой пластине. Вязко-упругий превращенный материал

$$\varepsilon_z = 0$$
$$\sigma_y = 0,\ \sigma_{xy} = 0$$



$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma\boldsymbol{E} + \boldsymbol{S};\quad \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\vartheta}{3}\boldsymbol{E} + \boldsymbol{e}$$

$$\sigma^+ = k^+(\vartheta^+ - \vartheta^{tr})$$
$$\sigma^- = k^-\vartheta^-$$

Модель Максвелла:

$$\boldsymbol{S}^+ = \boldsymbol{S}^{el} = \boldsymbol{S}^{\eta},\qquad \boldsymbol{S}^{el} = 2\mu^+\boldsymbol{e}^{el},\qquad \boldsymbol{S}^{\eta} = \boldsymbol{2\eta}\dot{\boldsymbol{e}}^{\eta}$$
$$\boldsymbol{e}^+ = \boldsymbol{e}^{el} + \boldsymbol{e}^{\eta}$$
$$\boldsymbol{S}^- = 2\mu^-\boldsymbol{e}^-$$

Плоский фронт реакции в зажатой пластине. Модель Максвелла

Нормальная компонента тензора химического сродства:

$$A_{NN}=\frac{n_-M_-}{\rho_-}\left(\gamma+\frac{E_-}{2(1-\nu_-^2)}\varepsilon_0^2-\frac{k^+}{2}(\vartheta^+-\vartheta^{tr})^2-\right.$$
$$\left.-\mu^+\left((e_x^e)^2+\left(e_y^e\right)^2+(e_z^e)^2\right)\right)+n_*RT\ln\left(\frac{c_{eq}}{c_*}\right)$$

Критическое значение параметра γ:

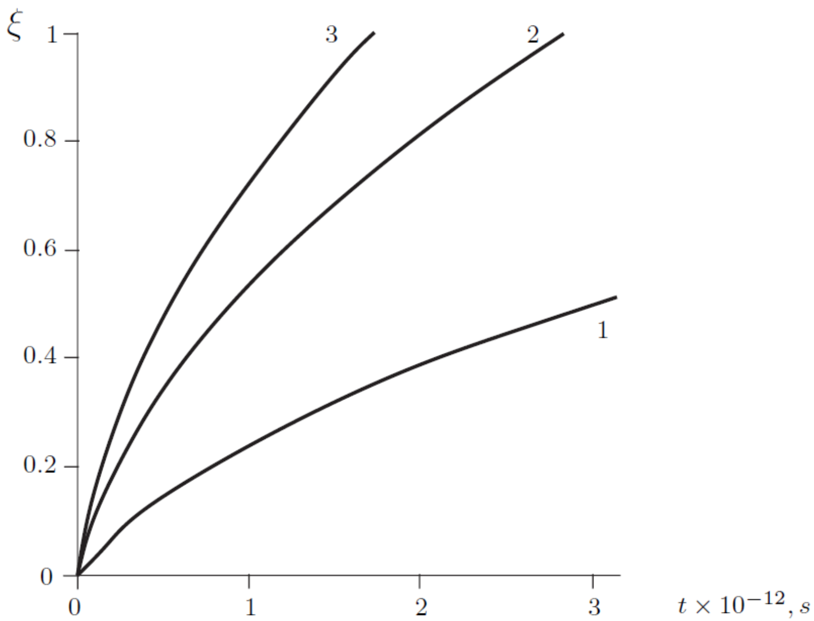
$$\gamma_*=\frac{\mu^+k^+(\vartheta^{tr})^2(8\mu^++13k^+)}{2(4\mu^++3k^+)^2}$$

Кинетика фронта реакции:

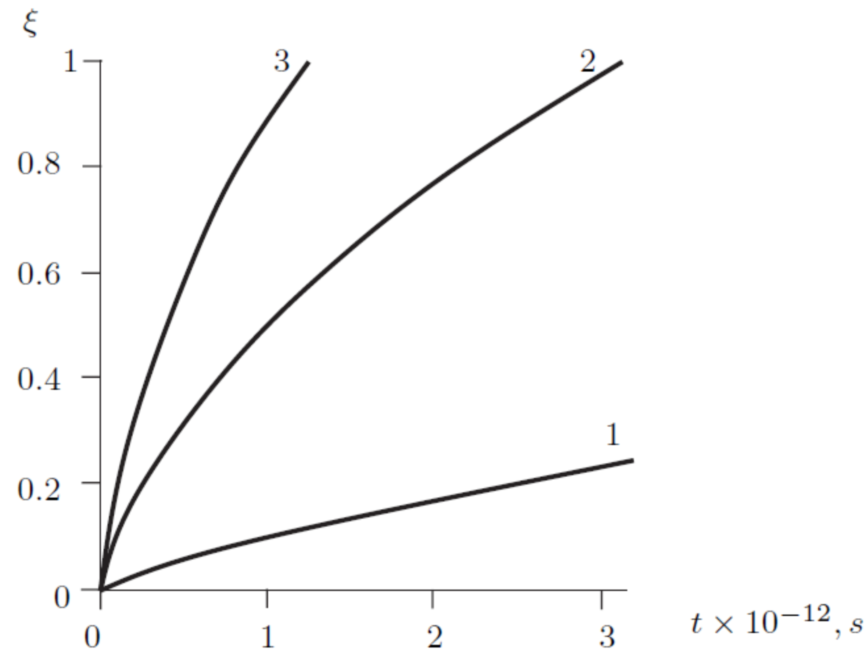
$$\xi=\frac{h}{H}$$

$$\frac{n_*^2k_*H}{2D}\cdot\xi^2+\left(1+\frac{n_*^2k_*}{\alpha}\right)\cdot\xi=\frac{n_-M_-}{\rho_-}\cdot\frac{k_*n_*c_*}{H}\left(1-exp\left(-\frac{n_-M_-}{\rho_-}+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\frac{E_-}{2(1-\nu_-^2)}\varepsilon_0^2-\frac{k^+}{2}(\vartheta^+-\vartheta^{tr})^2--\mu^+\left((e_x^e)^2+\left(e_y^e\right)^2+(e_z^e)^2\right)\right)\right)\cdot t$$

Зависимость кинетики фронта от величины внешней деформации и параметра γ

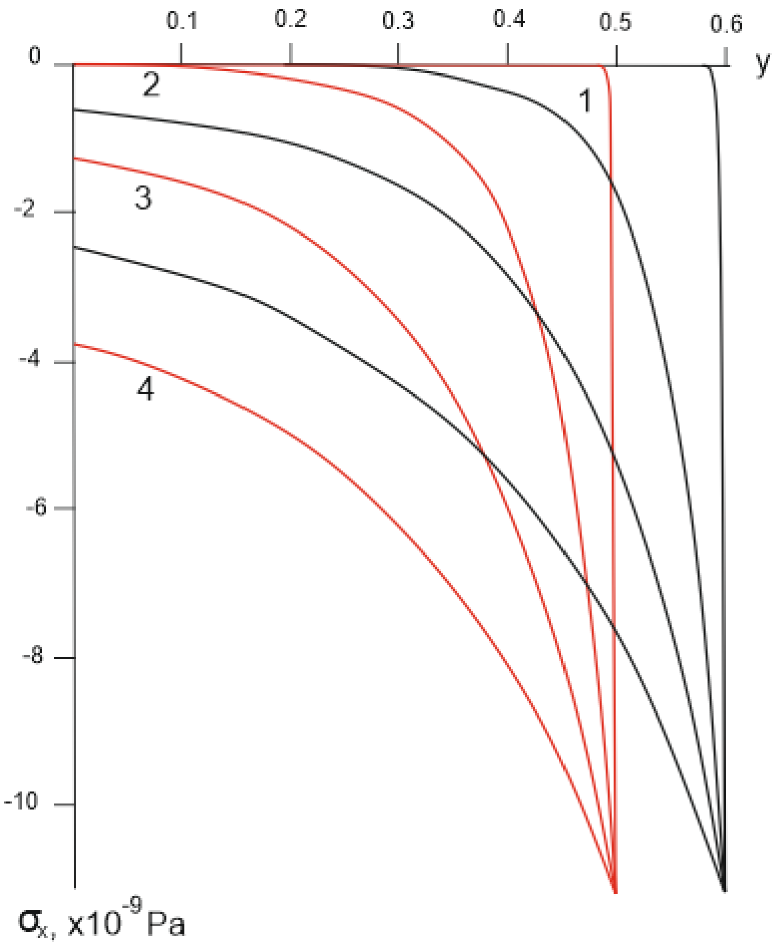


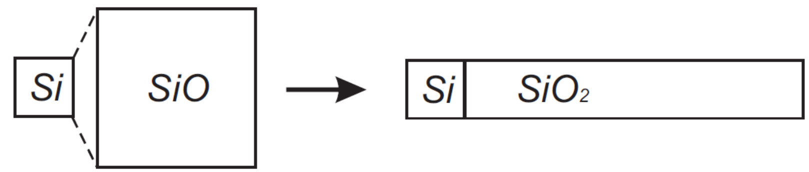
$1 - \ \varepsilon_0 = -0.01$
$2 - \ \varepsilon_0 = 0$
$3 - \ \varepsilon_0 = 0.01$
$(\gamma = 1.1\gamma_*)$



$1 \ - \ \gamma = 1.1\gamma_*$
$2 \ - \ \gamma = 1.3\gamma_*$
$3 \ - \ \gamma = 1.6\gamma_*$
$(\varepsilon_0 = 0)$

Релаксация напряжений позади фронта реакции



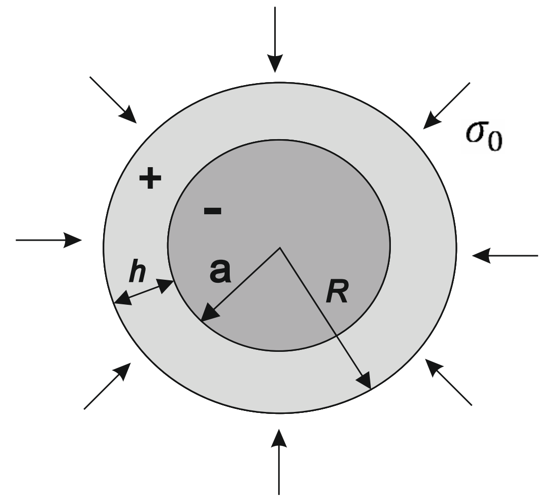


1 - $\eta = 10^{21}\ Pa \cdot s$,
2 - $\eta = 2 \cdot 10^{22}\ Pa \cdot s$,
3 - $\eta = 5 \cdot 10^{22} Pa \cdot s$,
4 - $\eta = 10^{23}\ Pa \cdot s$

$$\sigma_x^+(y,t) = \mu^+ \varepsilon_0 exp\left\{-\frac{\mu^+}{\eta}(t - t_y)\right\} +$$
$$+ \frac{3k^+\mu^+(3\varepsilon_0 - 2\vartheta^{tr})}{4\mu^+ + 3k^+} exp\left\{-\frac{3k^+\mu^+}{\eta(4\mu^+ + 3k^+)}(t - t_y)\right\}$$

t_y - момент времени, при котором $h(t_y) = y$

Химическое превращение упругого шара в случае упруго-пластического превращенного материала.



$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma \boldsymbol{E} + \boldsymbol{S}; \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\vartheta}{3}\boldsymbol{E} + \boldsymbol{e}$$

$$\sigma^{+} = k^{+}(\vartheta^{+} - \vartheta^{tr})$$

$$\sigma^{-} = k^{-}\vartheta^{-}$$

$$\boldsymbol{S}^{+} = 2\mu^{+}\boldsymbol{e}^{el} = 2\mu^{+}\left(\boldsymbol{e}^{+} - \boldsymbol{e}^{pl}\right)$$

$$\boldsymbol{e}^{+} = \boldsymbol{e}^{el} + \boldsymbol{e}^{pl}$$

$$\boldsymbol{S}^{-} = 2\mu^{-}\boldsymbol{e}^{-}$$

$$\dot{\boldsymbol{e}}^{+} = \dot{\boldsymbol{e}}^{el} + \dot{\boldsymbol{e}}^{pl} = \frac{\dot{\boldsymbol{S}}^{+}}{2\mu^{+}} + \begin{cases} 0, & \text{если } \left|\sigma_r^{+} - \sigma_\varphi^{+}\right| < \sigma_y \\ \dot{\lambda}\dfrac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^{+}}, & \text{если} \left|\sigma_r^{+} - \sigma_\varphi^{+}\right| = \sigma_y \end{cases}$$

$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + 2\frac{\sigma_r - \sigma_\varphi}{r} = 0$$

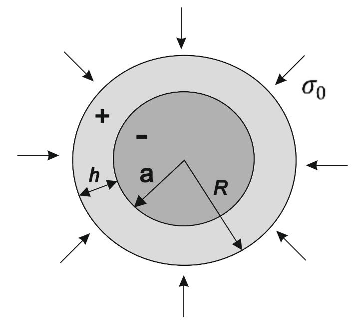
$$u^{\pm} = A^{\pm} r + \frac{B^{\pm}}{r^2}$$

Начальное упругое состояние ($\boldsymbol{\sigma_0 < \sigma_0^*}$)

$$\boldsymbol{\sigma}^+ = \left(k^+(3A^+ - \vartheta^{tr}) - \frac{4\mu^+ B^+}{r^3}\right)\boldsymbol{e_r e_r} + \left(k^+(3A^+ - \vartheta^{tr}) + \frac{2\mu^+ B^+}{r^3}\right)(\boldsymbol{E} - \boldsymbol{e_r e_r})$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^+ = \left(A^+ - \frac{2B^+}{r^3}\right)\boldsymbol{e_r e_r} + \left(A^+ + \frac{B^+}{r^3}\right)(\boldsymbol{E} - \boldsymbol{e_r e_r})$$

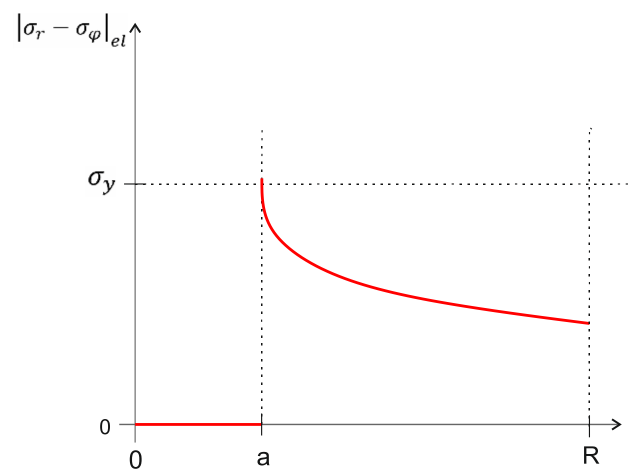
$$\boldsymbol{\sigma}^- = 3k^- A^- \boldsymbol{E}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^- = A^- \boldsymbol{E}$$



Интенсивность касательных напряжений:

$$|\sigma_r - \sigma_\phi| = 6\mu^+ \left| \frac{([k^{-1}]\sigma_0 + \vartheta^{tr})}{4\mu^+[k^{-1}] + \dfrac{3 + \dfrac{4\mu^+}{k^-}}{(1-\xi)^3}} \right| \frac{1}{\varrho^3}$$

$$\varrho = \frac{r}{R}$$



Упруго-пластическое состояние ($\boldsymbol{\sigma_0^*} < \boldsymbol{\sigma_0} < \boldsymbol{\sigma_0^{**}}$)

Упругий регион: $(a < \varsigma < r < R)$

$$\boldsymbol{\sigma^{el}} = \left(\sigma_0 + \frac{2}{3}\sigma_y\varsigma^3\left(\frac{1}{r^3} - \frac{1}{R^3}\right)\right)\boldsymbol{e_r e_r} + \left(\sigma_0 - \frac{1}{3}\sigma_y\varsigma^3\left(\frac{1}{r^3} + \frac{2}{R^3}\right)\right)(\boldsymbol{E} - \boldsymbol{e_r e_r})$$

$$\boldsymbol{\varepsilon^{el}} = \left(\frac{\sigma_0 + k^+\vartheta^{tr}}{3k^+} - \frac{\sigma_y\varsigma^3}{3}\left(\frac{2}{3R^3k^+} - \frac{1}{\mu^+}\right)\right)\boldsymbol{e_r e_r} + \left(\frac{\sigma_0 + k^+\vartheta^{tr}}{3k^+} - \frac{\sigma_y\varsigma^3}{9}\left(\frac{2}{R^3k^+} - \frac{1}{2\mu^+}\right)\right)(\boldsymbol{E} - \boldsymbol{e_r e_r})$$

Пластичный регион: $(a < r < \varsigma)$

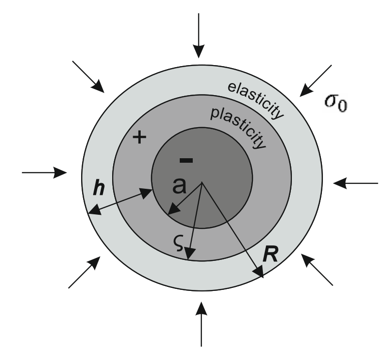
$$\boldsymbol{\sigma^{pl}} = \left(\sigma_0 - \sigma_y\left(\ln\frac{r}{\varsigma} - \frac{2}{3}\left(1 - \frac{\varsigma^3}{R^3}\right)\right)\right)\boldsymbol{e_r e_r} + \left(\sigma_0 - \sigma_y\left(\ln\frac{r}{\varsigma} + \frac{1}{3}\left(1 + \frac{2\varsigma^3}{R^3}\right)\right)\right)(\boldsymbol{E} - \boldsymbol{e_r e_r})$$

$$\boldsymbol{\varepsilon^{pl}} = \frac{\sigma_y(3k^+ + 4\mu^+)}{6\mu^+k^+}\left(\frac{\varsigma^3}{r^3} - 1\right)\boldsymbol{\alpha}$$

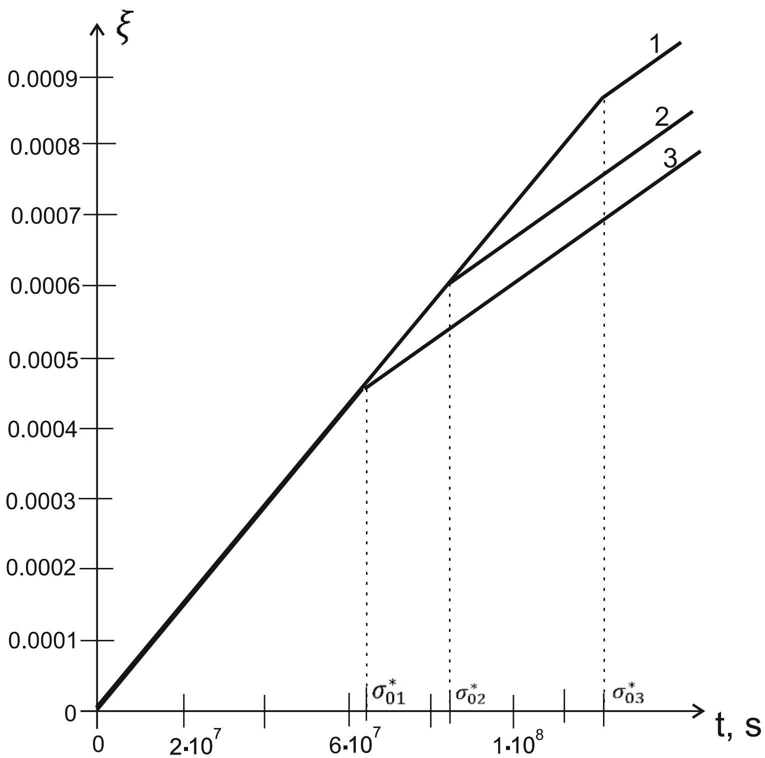
$$A_{NN} = \frac{n_-M_-}{\rho_-}\Bigg(\gamma + \frac{9}{2}k^-\left(A^-\right)^2 - \frac{1}{6}\Bigg(3\sigma_0 + 6\sigma_y ln\left(\frac{\varsigma}{R(1-\xi)}\right) - \frac{2\sigma_y\varsigma^3}{R^3}\Bigg)^2 -$$

$$-\frac{1}{2\mu^+}\Bigg(\sigma_r^p\Bigg(6\sigma_y ln\left(\frac{\varsigma}{R(1-\xi)}\right) + 3\sigma_0 - 3\sigma_y\left(1 + \frac{\varsigma^3}{R^3}\right)\Bigg)\Bigg) + 2\sigma_y^2\Bigg) +$$

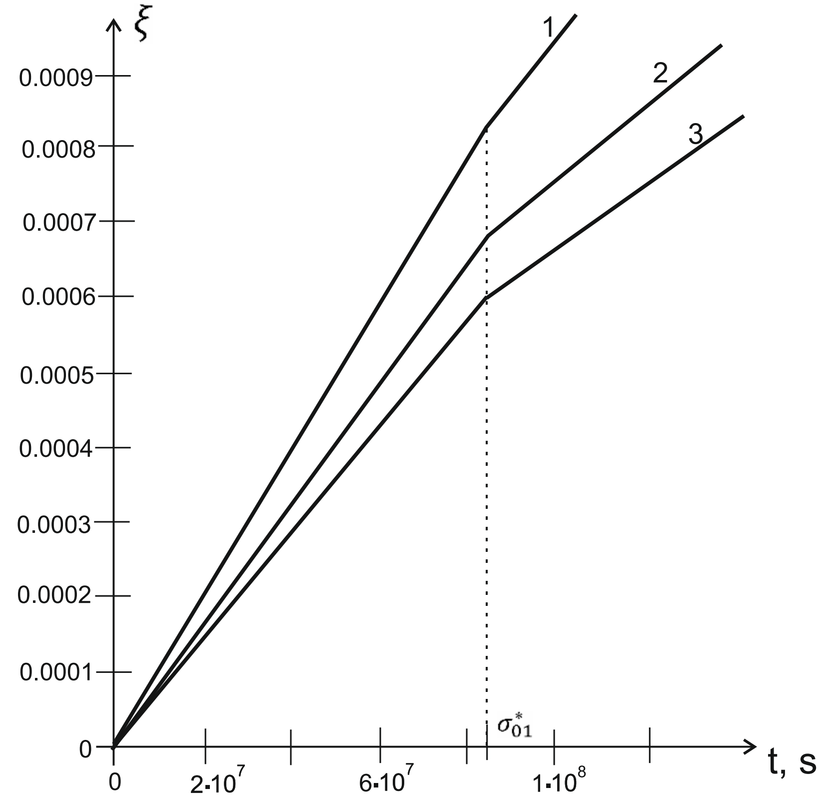
$$+3k^-A^-\left(\frac{3\sigma_r^p}{2\mu^+} - 3A^- - \frac{\sigma_y}{\mu^+}\right)\Bigg) + n_*RTln\frac{c}{c_*}$$



Зависимость кинетики фронта химической реакции от интенсивности внешней нагрузки и от энергетического параметра в случае постоянной нагрузки

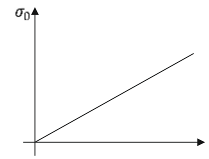


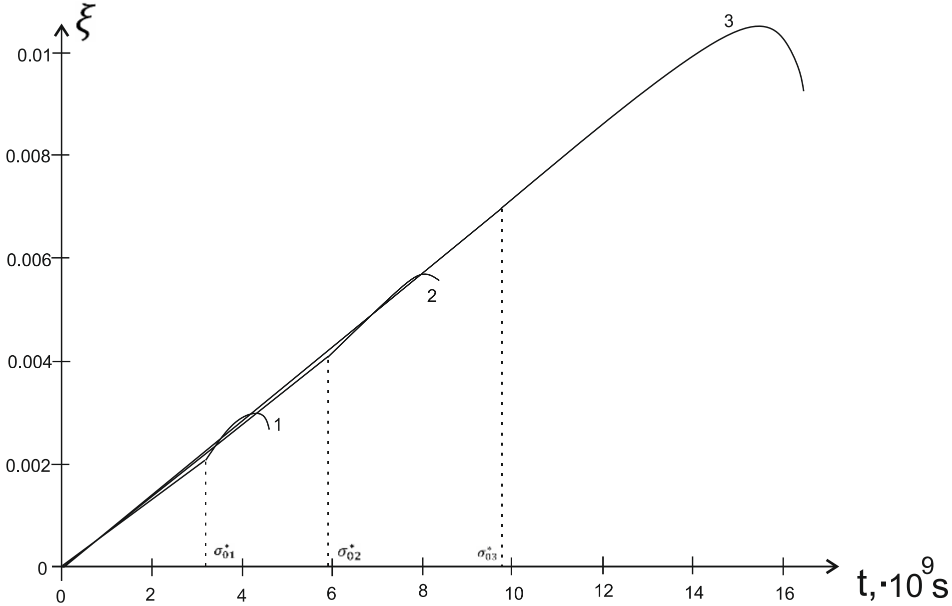
$1-\sigma_0=50\ Pa$
$2-\sigma_0=75\ Pa$
$3-\sigma_0=100\ Pa$

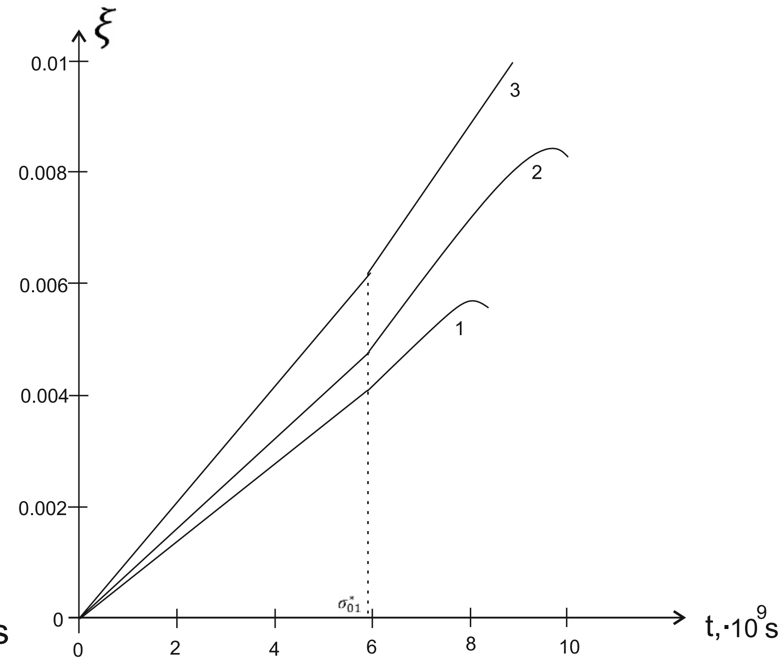


$1\ -\ \gamma=4\cdot10^9$
$2\ -\ \gamma=3\cdot10^9$
$3\ -\ \gamma=1.5\cdot10^9$

Зависимость кинетики фронта химической реакции от интенсивности внешней нагрузки и от энергетического параметра в случае изменяющейся со временем нагрузки







$1 - \sigma_0 = 100\ Pa$
$2 - \sigma_0 = 75\ Pa$
$3 - \sigma_0 = 50\ Pa$

$1\ -\ \gamma = 1.5 \cdot 10^9$
$2\ -\ \gamma = 3 \cdot 10^9$
$3\ -\ \gamma = 4 \cdot 10^9$

Результаты.

Решены связанные задачи механохимии в постановке, основанной на понятии тензора химического сродства

1) Задача о распространении плоского фронта химической реакции в зажатой пластине для линейного вязко-упругого превращенного материала (модели Максвелла и Кельвина-Фойгта)

Показано, что:

- вязкость не влияет на кинетику фронта химической реакции, так как не влияет на напряжения на фронте, но влияет на релаксацию напряжений позади фронта реакции;
- исследовано влияние зависящего от температуры энергетического параметра γ на кинетику фронта реакции;
- внешние деформации могут ускорять, замедлять и блокировать реакцию;
- увеличение объемного модуля упругости превращенного материала замедляет распространение фронта химической реакции, а уменьшение – ускоряет;
- исследованы предельные случаи перехода от материала Максвелла к линейно-упругому и линейно-вязкому материалам;

Результаты

2) Задача о распространении плоского фронта химической реакции в свободной пластине для линейно вязкого превращенного материала.

Показано, что:

- В случае свободной пластины реакция протекает быстрее, чем в случае зажатой пластины;
- Вязкость влияет на кинетику фронта химической реакции и на релаксацию напряжений позади фронта реакции. Увеличение коэффициента вязкости приводит к замедлению реакции, и наоборот;
- Исследовано влияние внешних напряжений на кинетику фронта химической реакции. Показано, что растягивающие напряжения ускоряют реакцию, и наоборот;
- Исследовано влияние зависящего от температуры энергетического параметра γ на скорость химической реакции. Было продемонстрировано, что увеличение энергетического параметра ускоряет реакции, а уменьшение – замедляет реакцию.

Результаты

3) Задача о распространении сферического фронта химической реакции для линейного вязко-упругого превращенного материала Кельвина-Фойгта.

Показано, что:

- Вязкость влияет на кинетику фронта химической реакции. показано., что увеличение коэффициента вязкости приводит к замедлению реакции;
- Исследовано влияние внешнего напряжения на кинетику фронта реакции. Показано, что растягивающие напряжения – ускоряют реакцию, а сжимающие – замедляют;
- Исследовано влияние энергетического параметра γ на скорость химической реакции. Было показано, что увеличение параметра γ – ускоряет реакцию, а уменьшение γ – замедляет реакцию;
- Показано, что в случае превращенного материала, описываемого моделью Кельвина Фойгта, увеличение объемного модуля упругости превращенного материала приводит к замедлению реакции, и наоборот;

Результаты

4) Задача о распространении сферического фронта химической реакции в случае упруго-пластического превращенного материала для:

- постоянной внешней нагрузки
- линейно изменяющейся во времени внешней нагрузки.

Показано, что:

- Существует область статически допустимых напряжения для упруго-пластического состояния. Существует напряжение $\sigma_0^{(1)}$, меньше которого не будет пластичности нигде – будет только упругое состояние. Существует напряжение $\sigma_0^{(2)}$, больше которого нет статически допустимых напряжений;
- показано, что если пластичность начнется, то она начнется на фронте реакции;
- Исследовано как интенсивность внешней нагрузки влияет на кинетику фронта химической реакции и влияет на упруго-пластическое состояние;
- Исследовано как энергетический параметр γ влияет на распространение фронта химической реакции.

Апробация Работы

Статья:

- Freidin, A., Morozov,·N., Petrenko, S., Vilchevskaya, E. Chemical reactions in spherically symmetric problems of mechanochemistry. Acta Mech., 2016, 227, 43-56

Личные доклады:

- С.Е. Петренко, А.Б. Фрейдин "Распространение фронтов химических реакций в упругих и вязко-упругих телах". Неделя науки СпбПУ 2015. Диплом 1 степени за доклад и тезисы в сборнике конференции
- Petrenko S., Freidin A., Spherically-symmetric problem of mechanochemistry with visco-elastic reaction product, p.94-95, Book of Abstracts, XLIV International Summer School-Conference ’Advanced Problems in Mechanics’, St.Petersburg, Russia, 2016

Соавторство докладов на 3 международных конференциях

Золотая Медаль Российской Академии Наук с премией для студентов высших учебных заведений

Грант Правительства Санкт-Петербурга 2016, для студентов вузов, расположенных на территории Санкт-Петербурга

Спасибо за внимание.

Распространение плоского фронта химической реакции в случае вязкого превращенного материала в свободной пластине

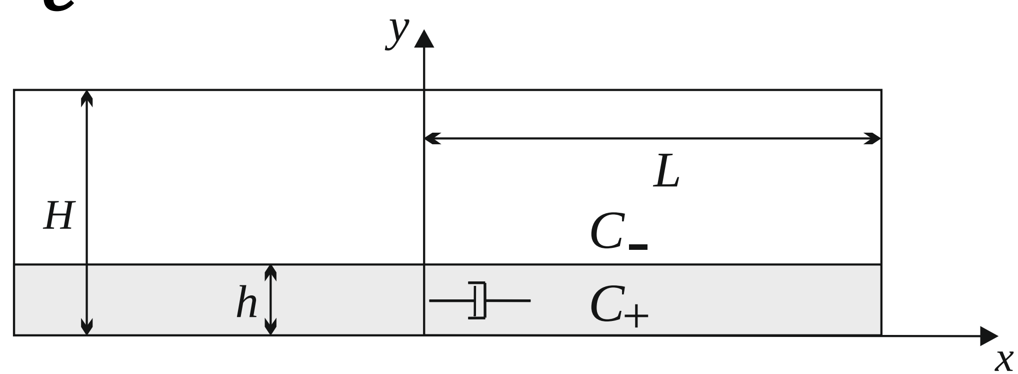
$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma \boldsymbol{E} + \boldsymbol{S}; \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\vartheta}{3}\boldsymbol{E} + \boldsymbol{e}$$

$$\sigma^{+} = k^{+}(\vartheta^{+} - \vartheta^{tr})$$

$$\sigma^{-} = k^{-}\vartheta^{-}$$

$$\boldsymbol{S}^{+} = 2\eta \dot{\boldsymbol{e}}^{+}$$

$$\boldsymbol{S}^{-} = 2\mu^{-}\boldsymbol{e}^{-}$$



$$\varepsilon_z = 0$$

$$\sigma_y = 0,\ \sigma_{xy} = 0$$

Граничные условия:

$$\int_0^h \sigma_x^{+}\, dy + \int_h^h \sigma_x^{-}\, dy = H\sigma_0$$

$$\int_0^h \sigma_x^{+}\, y\, dy + \int_h^h \sigma_x^{-}\, y\, dy = \frac{H^2\sigma_0}{2}$$

Гипотеза плоских сечений:

$$\varepsilon_x^{\pm} = a^{\pm}y + b^{\pm}$$

Плоский фронт реакции в свободной пластине в случае вязкого превращенного материала

$$\dot{q}y + \dot{r} + \frac{3k^+}{4\eta}(q\,y + r) = \frac{3k^+}{2}\big(\dot{a}(y-h) - a\dot{h}\big)$$

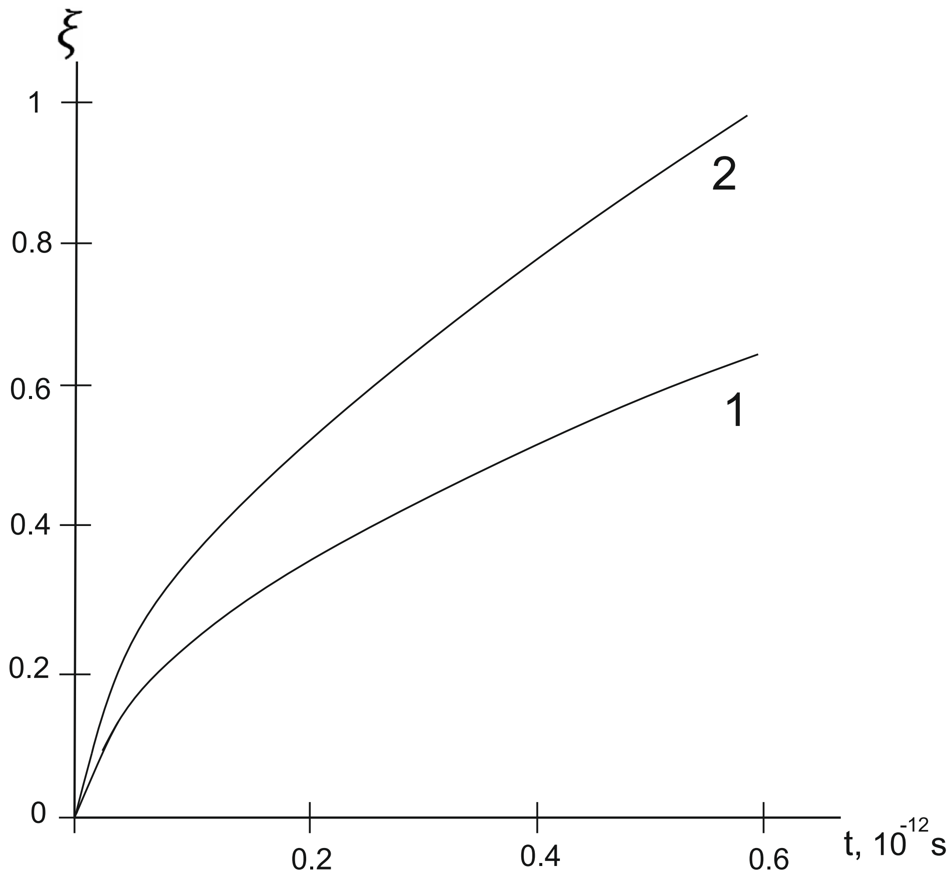
$$\dot{\vartheta}^+ + \frac{3k^+}{4\eta}(\vartheta^+ - \vartheta^{tr}) = \frac{3}{2}\big(\dot{a}(y-h) - a\dot{h}\big)$$

$$\alpha\left(\frac{aH^2}{2} + \frac{ah^2}{2} - ahH\right) + \frac{qh^2}{4} + \frac{rh}{2} + \eta\left(-\frac{\dot{a}h^2}{2} - ah\dot{h}\right) = H\sigma_0$$

$$\alpha\left(\frac{aH^3}{3} + \frac{ah^3}{6} - \frac{ahH^2}{2}\right) + \frac{qh^3}{6} + \frac{rh^2}{4} + \eta\left(-\frac{\dot{a}h^3}{6} - \frac{ah^2\dot{h}}{2}\right) = \frac{H^2\sigma_0}{2}$$

$$\dot{h} = \frac{n_- M_-}{\rho_-}\cdot\frac{k_* c_* n_*}{1 + n_*^2 k_*\left(\frac{h}{D} + \frac{1}{\alpha}\right)}\left(1 - \exp\left(-\frac{n_- M_-}{\rho_- n_* RT}\left(\gamma - \frac{k^+}{2}(\vartheta^+ - \vartheta^{tr})^2\right)\right)\right)$$

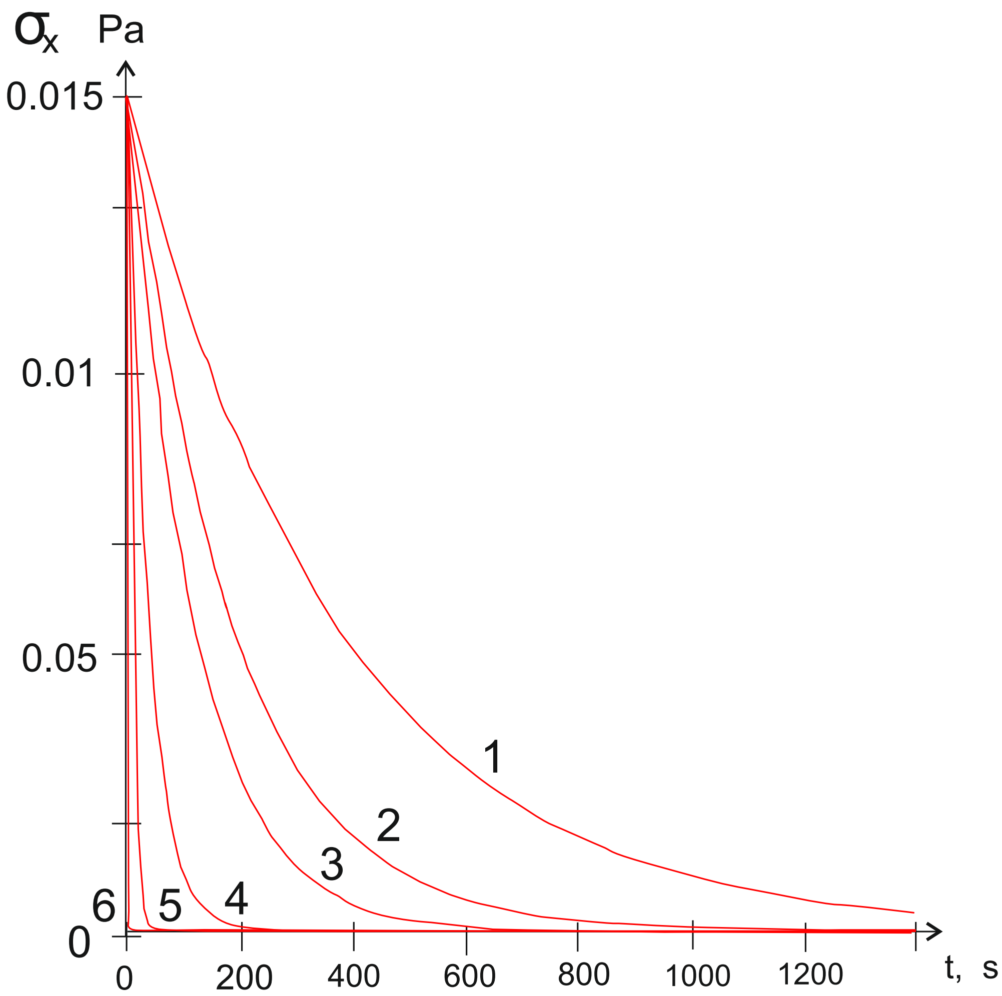
Зависимость кинетики фронта химической реакции от типа граничных условий



$1 - \sigma_0 = 0$

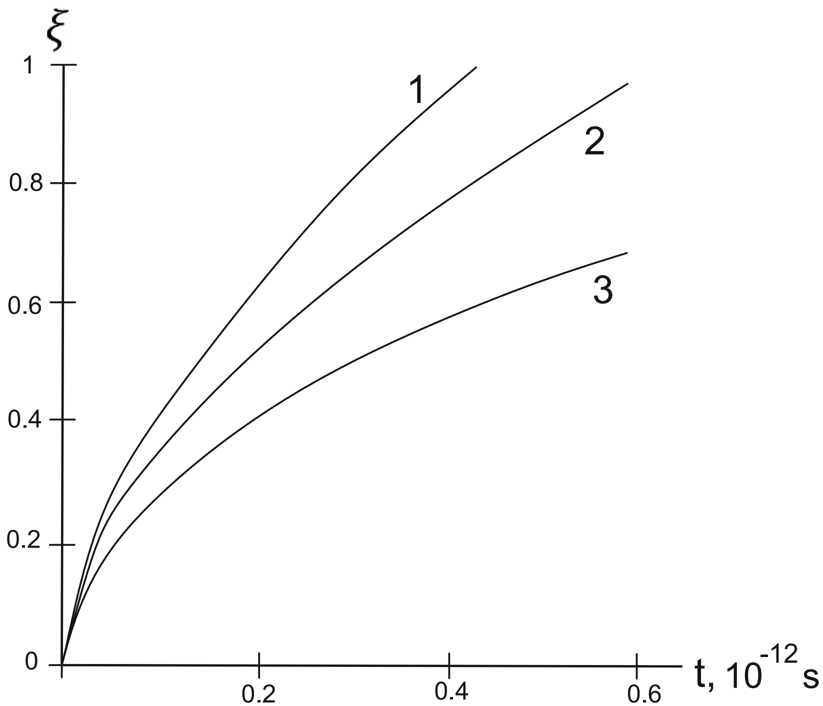
$2 - \varepsilon_0 = 0$

Релаксация напряжений позади фронта реакции в свободной пластине

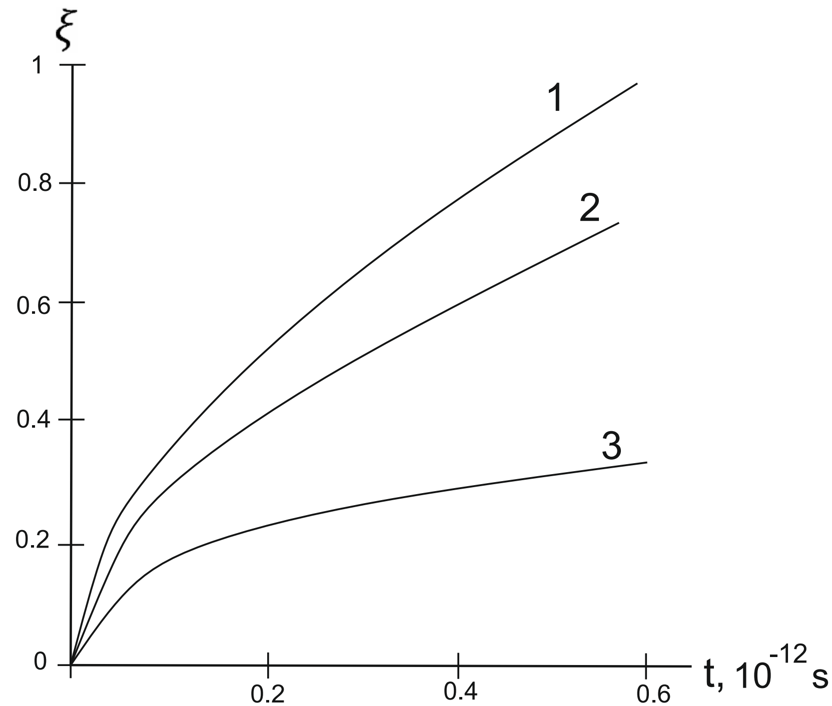


1 - $\eta = 2.5 \cdot 10^{12}\ Pa \cdot s$,
2 - $\eta = 1.5 \cdot 10^{12}\ Pa \cdot s$,
3 - $\eta = 5 \cdot 10^{11} Pa \cdot s$,
4 - $\eta = 10^{10}\ Pa \cdot s$
5 - $\eta = 10^{9}\ Pa \cdot s$
6 - $\eta = 10^{8}\ Pa \cdot s$

Зависимость кинетики фронта химической реакции от внешнего напряжения σ_0 и от коэффициента вязкости η

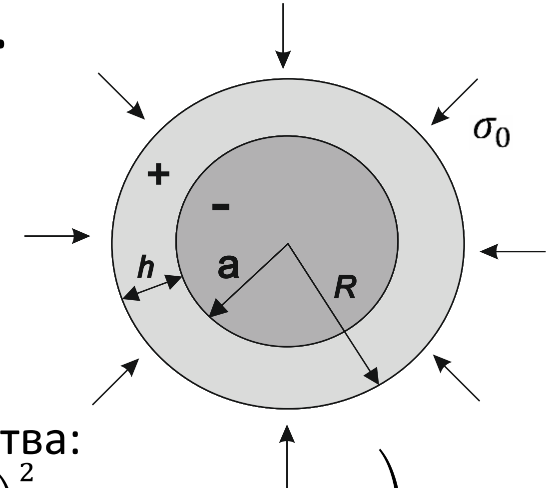


$1 - \sigma_0 = 10\ Pa$
$2 - \sigma_0 = 0\ Pa$
$3 - \sigma_0 = -10\ Pa$



$1 - \eta = 10^8\ Pa \cdot s$
$2 - \eta = 10^{10}\ Pa \cdot s$
$3 - \eta = 10^{17}\ Pa \cdot s$

Распространение сферического фронта химической реакции в случае вязко-упругого превращенного материала. Модель Кельвина-Фойгта.



$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma \boldsymbol{E} + \boldsymbol{S}; \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\vartheta}{3}\boldsymbol{E} + \boldsymbol{e}$$

$$\sigma^{+} = k^{+}(\vartheta^{+} - \vartheta^{tr})$$

$$\sigma^{-} = k^{-}\vartheta^{-}$$

$$\boldsymbol{S}^{+} = 2\eta \dot{\boldsymbol{e}}^{+} + 2\mu^{+}\boldsymbol{e}^{+}$$

$$\boldsymbol{S}^{-} = 2\mu^{-}\boldsymbol{e}^{-}$$

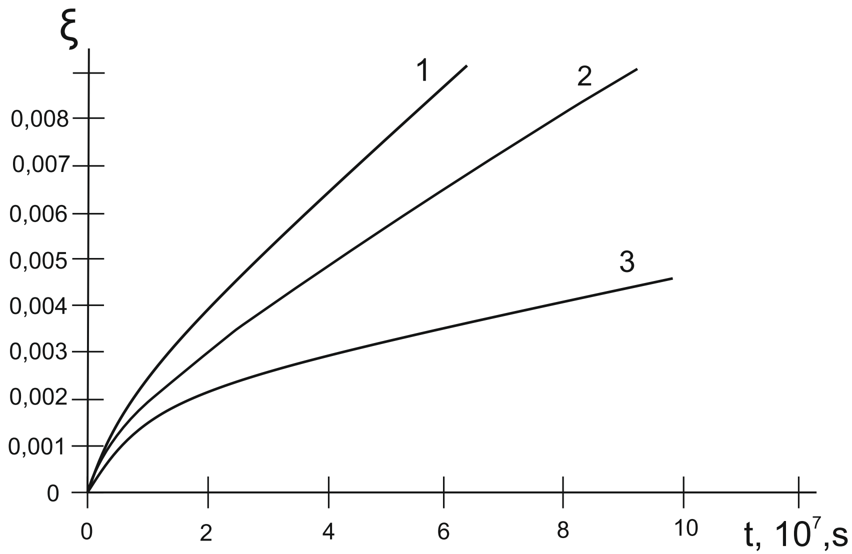
Нормальная компонента тензора химического сродства:

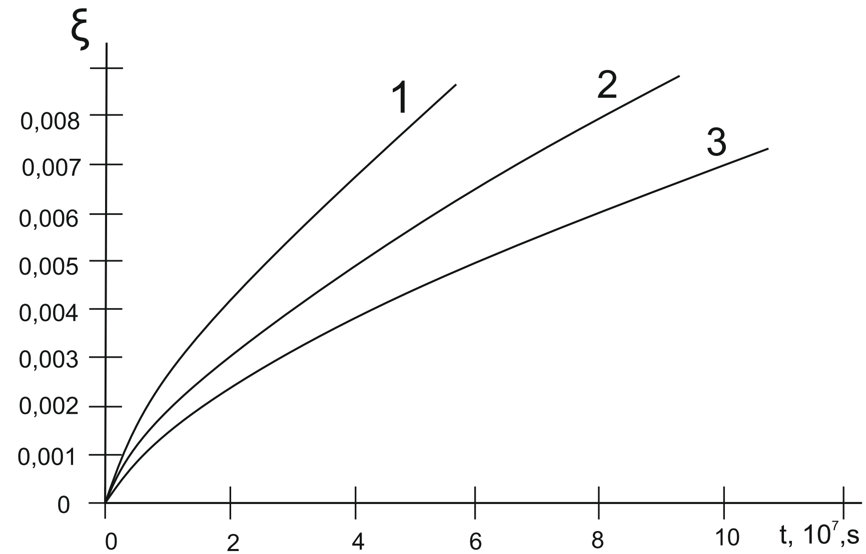
$$A_{NN} = \frac{n_{-}M_{-}}{\rho_{-}}\left(\gamma + \frac{9}{2}k^{-}(A^{-})^2 - \frac{k^{+}}{2}(3A^{+} - \vartheta^{tr})^2 - 24\mu^{+}\left(\frac{B^{+}}{a^3}\right)^2 + 9k^{-}A^{-}(A^{+} - A^{-})\right) +$$
$$+ n_{*}RT\ln\frac{c}{c_{*}}$$

Радиальная скорость фронта химической реакции:

$$\dot{\xi} = \frac{n_{-}M_{-}}{\rho_{-}} \cdot \frac{k_{*}n_{*}c_{*}}{1 + n_{*}^{2}k_{*}\left(\frac{1-\xi}{\alpha} + \frac{\xi}{D}\right)(1-\xi)}\left(1 - exp\left(-\frac{n_{-}M_{-}}{\rho_{-}RTn_{*}}\left(\gamma + \frac{9}{2}k^{-}(A^{-})^2 -\right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left. - \frac{k^{+}}{2}(3A^{+} - \vartheta^{tr})^2 - 24\mu^{+}\left(\frac{B^{+}}{a^3}\right)^2 + 9k^{-}A^{-}(A^{+} - A^{-})\right)\right)\right)$$

Зависимость кинетики фронта химической реакции от величины внешнего напряжения и от энергетического параметра γ

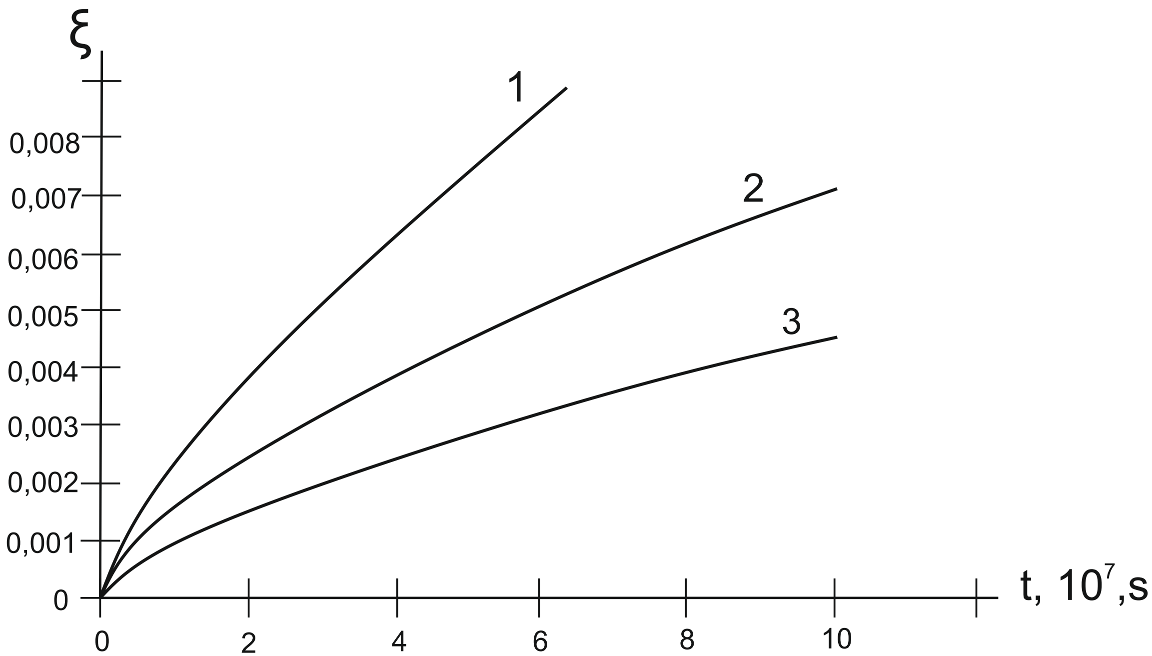




$1 - \sigma_0 = 10\ Pa$
$2 - \sigma_0 = 0\ Pa$
$3 - \sigma_0 = -10\ Pa$

$1\ -\ \gamma = 10^{10}$
$2\ -\ \gamma = 10^{8}$
$3\ -\ \gamma = 10^{7}$

Зависимость кинетики фронта химической реакции от величины коэффициента вязкости



$1 - \ \eta = 10^9\ Pa \cdot s$
$2 - \ \eta = 10^{11}\ Pa \cdot s$
$3\ - \eta = 5 \cdot 10^{12}\ Pa \cdot s$