

УДК 539.3

ДО ОЦІНКИ ПАРАМЕТРІВ МОДЕЛІ СТРУКТУРНО НЕОДНОРІДНОГО ТВЕРДОГО ТІЛА

Зоя БОЙКО¹, Тарас НАГІРНИЙ^{1,2}

¹Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем
механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України,
вул. Дж. Дудаєва, 15 79005 Львів, Україна

²Зеленогурський університет,
вул. проф. Шафрана, 4 65-516 Зелена Гура, Польща

Сформульовано та досліджено розв'язок задачі, що описує рівноважний стан структурно неоднорідного твердого шару. Оцінку коефіцієнтів моделі проведено на підставі відомих експериментальних даних для поверхневого натягу. Вивчено розмірні ефекти поверхневих напружень і міцності шару. З'ясовано, що поверхневі напруження, які виникають у вільному від силового навантаження шарі, є більшими від експериментально вимірювальної межі міцності.

Ключові слова: структурно неоднорідні тверді тіла, тонкі плівки, розмірні ефекти, параметри моделі.

1. Вступ. У зв'язку з інтенсивним розвитком нанотехнологій і широким використанням тонкоплівкових та тонковолокнистих систем важливого значення набуває побудова та дослідження математичних моделей, які достатньо ґрунтовно враховують властивості приповерхневих областей тіла та структуру матеріалу. До таких моделей належать, зокрема, моделі, побудовані за локально градієнтного підходу у термомеханіці [1-6]. У рамках цього підходу простір параметрів локального стану розширено хімічним потенціалом та його градієнтом, спряженими до яких, відповідно, є густина та вектор зміщення маси. При формулюванні та дослідженні розв'язків крайових задач на підставі цих моделей, на поверхні тіла задавалося постійне значення хімічного потенціалу. Однак способів вимірювання чи визначення такого значення не зазначили. У [3] показано, що збурення хімічного потенціалу можна ототожнити зі збуренням енергії зв'язку, тому вимірювання її неможливе. У [7] граничною умовою є фізично обґрунтована умова на густину. У цій же праці розглянуто узгодженість з відомими в літературі підходами [8, 9], в яких враховують неідеальну форму поверхні при контактній взаємодії твердих тіл, розрізняючи фізичну неоднорідність приповерхневих шарів і геометричну неоднорідність поверхонь тіл. Зазначимо також, що в літературі немає праць, у яких би проводилась оцінка модельних коефіцієнтів за локально градієнтного підходу.

У рамках моделі структурно неоднорідного твердого тіла, на підставі розв'язку задачі для пружного шару та відомих у літературі експериментальних даних ми провели оцінку модельних коефіцієнтів. Це дало змогу також оцінити поверхневі напруження та вивчити розмірний ефект міцності шару (тонкої плівки).

2. Формулювання задачі. Розглянемо вільний від зовнішнього силового навантаження структурно неоднорідний ізотропний пружний шар, що займає область $-l \leq x \leq l$ у прямокутній декартовій системі координат (x, y, z) . Вважаємо, що на поверхнях шару $x = -l$, $x = l$ задано постійне значення густини ρ_a . За відліковий стан тіла приймаємо стан, який відповідає стану необмеженого середовища вільного від зовнішнього навантаження. Ключова система рівнянь моделі пружного тіла за локально градієнтного підходу, записана стосовно тензора напружень $\hat{\sigma}$ та вектора зміщення маси Π_M , набула вигляду [10]

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \hat{\sigma} &= 0, \\ \nabla \times \left\{ \hat{\sigma} - \frac{1}{3K} \left[\left(K - \frac{2}{3}G \right) \sigma + 2G\beta (\nabla \cdot \Pi_M) \right] \hat{I} \right\} \times \nabla &= 0, \\ \nabla (\nabla \cdot \Pi_M) + \frac{K\gamma}{\beta^2 - \alpha K} \Pi_M - \frac{\beta}{3(\beta^2 - \alpha K)} \nabla \sigma &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

де $\sigma = \hat{\sigma} \cdot \hat{I}$; $\hat{I}$ – одиничний тензор; K , G – модулі об'ємного стиску та зсуву; α , β , γ – характеристики матеріалу; ∇ – диференціальний оператор Гамільтона; « $\times$ » – знак векторного добутку.

Систему рівнянь (1) доповнюємо такими граничними умовами:

$$\mathbf{n} \cdot \hat{\sigma}|_{\partial V} = 0, \quad \nabla \cdot \Pi_M|_{\partial V} = \rho_a \quad (2)$$

на зовнішніх поверхнях тіла та умовами рівності нулю головного вектора та головного моменту зусиль у довільному поперечному перерізі. Тут $\rho_a = (\rho - \rho_*)|_{\partial V}$ – задане поверхнєве значення збурення густини; ρ_* – густина безмежного середовища, матеріал якого ідентичний матеріалу тіла; $\mathbf{n}$ – вектор одиничної зовнішньої до поверхні тіла. Якщо прийняти, що поверхня тіла проходить через найбільшу висоту профілю реальної поверхні, то $\rho = 0$ і $\rho_a = -\rho_*$ [11, 12].

Розв'язок сформульованої задачі, записаний стосовно головних компонент σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} тензора напружень $\hat{\sigma}$ та ненульової складової Π_M вектора Π_M ($\Pi_M = \Pi_M(P_M, 0, 0)$) набув вигляду

$$\sigma_{yy}(x) = \sigma_{zz}(x) = \frac{2G\beta\rho_a}{K + 4/3G} \left[\frac{\text{ch}(\xi x)}{\text{ch}(\xi l)} - \frac{\text{th}(\xi l)}{\xi l} \right], \quad (3)$$

$$\sigma_{xx}(x) = 0, \quad (4)$$

$$P_M(x) = \frac{\rho_a}{\xi} \frac{\text{sh}(\xi x)}{\text{ch}(\xi l)}. \quad (5)$$

$$\text{Тут } \xi = \sqrt{\frac{(K + 4 / 3G)\gamma}{\alpha(K + 4 / 3G) - \beta^2}}.$$

Використовуючи визначальні співвідношення моделі [10], на підставі (3)-(5) для густини та хімічного потенціалу одержуємо

$$\rho - \rho_* = \rho_a \frac{\text{ch}(\xi x)}{\text{ch}(\xi l)},$$

$$\eta(x) - \eta_* = -\frac{\rho_a}{3K(K + 4 / 3G)} \left\{ 3K \left[\alpha(K + 4 / 3G) - \beta^2 \right] \frac{\text{ch}(\xi x)}{\text{ch}(\xi l)} - 4G\beta^2 \frac{\text{th}(\xi l)}{\xi l} \right\}. \quad (6)$$

Аналіз розв'язку (3) засвідчує, що у вільному від силового навантаження шарі існують ненульові напруження, зумовлені структурною неоднорідністю тіла. Найбільшими напруженнями в шарі є поверхневі напруження $\sigma_{yy}(\pm l) = \sigma_{zz}(\pm l)$

$$\sigma_{yy}(\pm l) = \sigma_{zz}(\pm l) = \frac{2G\beta\rho_a}{K + 4 / 3G} \left[1 - \frac{\text{th}(\xi l)}{\xi l} \right], \quad (7)$$

які є розтягуючими. Тому на підставі (7) одержуємо $-\beta\rho_a > 0$. Оскільки $\rho_a < 0$, то для коефіцієнта β отримуємо оцінку

$$\beta < 0.$$

З формули (7) видно, що поверхневим напруженням властивий розмірний ефект, оскільки вони залежать від товщини шару. Зі збільшенням товщини шару поверхневі напруження збільшуються, прямуючи до усталеного значення

$$\sigma_0 = \frac{2G\beta\rho_a}{K + 4 / 3G},$$

яке відповідає поверхневим напруженням у півпросторі.

Зазначимо також, що характерним розміром приповерхневої неоднорідності є величина $1/\xi$. Якщо товщина шару сумірна з характерним розміром приповерхневої неоднорідності, то неоднорідність у розподілі σ_{yy} , σ_{zz} властива усій області тіла. Такі шари звичайно називають тонкими плівками. Якщо ж товщина шару значно більша від $1/\xi$ (товсті шари), то неоднорідність у розподілі напружень зосереджена біля зовнішніх повер-

хонь тіла, тоді як напруження у внутрішній області шару практично дорівнюють нулеві.

3. Поверхневий натяг. Оцінка параметрів моделі. У ненавантаженому шарі поверхневий натяг визначається як інтегральна характеристика приповерхневих напружень по товщині області, де вони є розтягуючими, тобто

$$f_p = \int_{x_a}^l \sigma_{yy}(x) dx. \quad (8)$$

Тут $x_a > 0$ – точка переходу розтягуючих приповерхневих напружень σ_{yy} у стискаючі

$$\sigma_{yy}(x_a) = 0. \quad (9)$$

На підставі співвідношень (3) та (8) для поверхневого натягу отримаємо

$$f_p = -\frac{2G\beta\rho_a}{K+4/3G} \frac{l \operatorname{sh}(\xi x_a) - x_a \operatorname{sh}(\xi l)}{\xi l \operatorname{ch}(\xi l)}. \quad (10)$$

З використанням співвідношень (3), (9) для знаходження точки переходу x_a розтягуючих приповерхневих напружень у стискаючі отримуємо трансцендентне рівняння

$$\frac{\operatorname{ch}(\xi x_a)}{\operatorname{ch}(\xi l)} - \frac{\operatorname{th}(\xi l)}{\xi l} = 0,$$

розв'язком якого є

$$x_a = \frac{1}{\xi} \operatorname{arcch}\left(\frac{\operatorname{sh}(\xi l)}{\xi l}\right).$$

Якщо прийняти наближення $\exp(\xi l) \gg \xi l$, то для x_a отримуємо

$$x_a = l \left[1 - \frac{\ln(\xi l)}{\xi l} \right].$$

Підставивши це співвідношення в (10), для поверхневого натягу одержимо формулу

$$f_p = \frac{2G\beta\rho_a}{\xi(K+4/3G)} \left[1 - \frac{\ln(\xi l)}{\xi l} - \frac{1}{\xi l} \right], \quad (11)$$

яка описує вплив товщини шару на поверхневий натяг. Зі збільшенням товщини шару величина f_p прямує до свого усталеного значення, яке має сенс поверхневого натягу у півпросторі

$$f_p^\infty = \frac{2G\beta\rho_a}{\xi(K + 4/3G)}.$$

У літературі відомі експериментальні дані, що стосуються поверхневого натягу. Використаємо їх для визначення величини коефіцієнта β . У [13] для поверхневого натягу алюмінію на межі з повітрям приведено значення 1.9 Н/м. Прийmemo його за значення поверхневого натягу для масивного зразка, тобто $f_p^\infty = 1.9$ Н/м. На підставі [14] для характерного розміру області приповерхневої неоднорідності для алюмінію можна прийняти - $\xi \approx 5 \cdot 10^7$ м⁻¹. Модулі пружності та густина алюмінію такі:

$$K = 7.3 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2, G = 2.6 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2, \rho_* = 2.7 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3.$$

Тоді, використовуючи вираз поверхневого натягу f_p^∞ у півпросторі, для $\beta\rho_a$ одержуємо

$$\beta\rho_a = 2 \cdot 10^8 \text{ Н/м}^2.$$

Якщо прийняти, що маса шару в початковий та актуальний моменти часу однакова, то для ρ_a отримаємо - $\rho_a = -\rho_*/2$. Тому для коефіцієнта β одержуємо

$$\beta = -1.5 \cdot 10^5 \text{ Н} \cdot \text{м/кг}.$$

Тоді для поверхневого значення напружень у півпросторі з відпаленого алюмінію записуємо

$$\sigma_0 = 9.5 \cdot 10^7 \text{ Н/м}^2.$$

Зазначимо, що межа міцності при розтягу відпаленого алюмінію дорівнює $8 \cdot 10^7$ Н/м².

Якщо ж для характерного розміру приповерхневої неоднорідності прийняти оцінку $\xi \approx 10^8$ м⁻¹, то одержимо

$$\beta\rho_a = 3.9 \cdot 10^8 \text{ Н/м}^2, \beta = -7 \cdot 10^4 \text{ Н} \cdot \text{м/кг}, \sigma_0 = 1.9 \cdot 10^8 \text{ Н/м}^2.$$

До ключової системи рівнянь моделі (1) входять три коефіцієнти. Оцінку двох із них провели раніше. Єдиним невизначеним коефіцієнтом моделі

варто вважати коефіцієнт α . Хоча його знак можна оцінити ($\alpha < 0$), однак зазначити навіть числових експериментів визначення його величини неможливо. Тому й неможливо обчислити значення хімічного потенціалу, що усталюється на поверхні тіла на підставі формули (6). Коефіцієнти ξ , β дають змогу однозначно описувати напружено-деформований стан тіла.

4. Міцність шару. Розмірний ефект. Для розтягнутого вздовж осі Oy шару зусиллями σ_a ($\sigma_a > 0$) найбільшими розтягуючими напруженнями у шарі є поверхневі напруження σ_{yy} , які є суперпозицією σ_a і напружень, що описуються формулою (3), тобто

$$\sigma_{yy}(\pm l) = \sigma_a + \frac{2G\beta\rho_a}{K + 4/3G} \left[1 - \frac{\text{th}(\xi l)}{\xi l} \right]. \quad (12)$$

Зі збільшенням товщини шару поверхневі напруження (12) зростають, прямує до значення

$$\sigma_{yy}^{\infty} = \sigma_a + \frac{2G\beta\rho_a}{K + 4/3G},$$

яке має сенс поверхневого напруження у розтягнутому зусиллями σ_a пів-просторі.

Співвідношення (12) треба враховувати під час розрахунку міцності шару. Якщо за основу вибрати критерій першої класичної теорії міцності [15] та використати методику, наведену у праці [16], то для інтенсивності силового навантаження σ_a^{kr} , що приводить до руйнування шару, одержуємо

$$\sigma_a^{kr} = \sigma_p - \frac{2G\beta\rho_a}{K + 4/3G} \left(1 - \frac{\text{th}(\xi l)}{\xi l} \right), \quad (13)$$

де σ_p – теоретична межа міцності.

При $l \rightarrow \infty$ значення σ_a^{kr} прямує до сталої величини σ_+

$$\sigma_+ = \sigma_p - \frac{2G\beta\rho_a}{K + 4/3G}, \quad (14)$$

яка відповідає інтенсивності силового навантаження, що призводить до руйнування товстих шарів. Цю величину визначають на підставі експериментальних даних.

Використовуючи (14), співвідношення (13) перетворюємо до вигляду

$$\sigma_a^{kr} = \sigma_+ + \frac{2G\beta\rho_a}{K + 4/3G} \frac{\text{th}(\xi l)}{\xi l}. \quad (15)$$

Праву частину співвідношення (15) можна трактувати як таку, що описує вплив розмірів шару на межу міцності (розмірний ефект межі міцності). Бачимо, що зі збільшенням товщини шару, величина прикладеного до шару силового навантаження, що призводить до його руйнування σ_a^{kr} , зменшується, прямуючи до σ_+ . Це й ілюструють графіки на рисунку, де показано залежність σ_a^{kr} / σ_+ від товщини шару (параметра ξl) для $b = 1.1, 3, 6$ (криві 1–3 відповідно); ($b = 4G\beta\rho_a / (K + 4/3G)\sigma_+$).

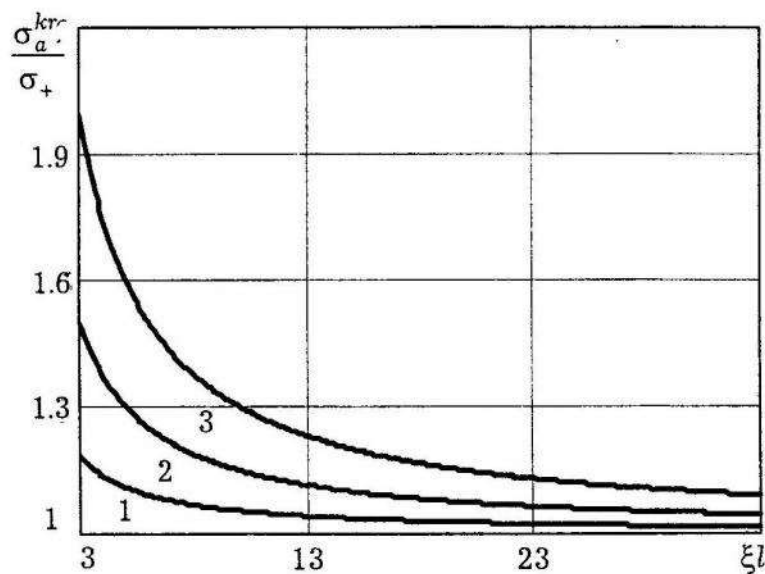


Рис. 1. Залежність σ_a^{kr} / σ_+ від товщини шару

Використовуючи числові дані для міцності шару, виготовленого з відпаленого алюмінію, на підставі (15) записуємо

$$\sigma_a^{kr} / 10^7 = 8 + 9.5 \frac{\text{th}(\xi l)}{\xi l} \text{ [Н/м}^2 \text{]}. \quad (16)$$

Варто пам'ятати, що $\xi \approx 5 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$. Якщо ж для характерного розміру приповерхневої неоднорідності прийняти – $\xi \approx 10^8 \text{ м}^{-1}$, то

$$\sigma_a^{kr} / 10^7 = 8 + 19 \frac{\text{th}(\xi l)}{\xi l} \text{ [Н/м}^2 \text{]}. \quad (17)$$

Для наближення $\exp(\xi l) \gg \xi l$ формули (16), (17) спрощуються до вигляду

$$\sigma_a^{kr} = \sigma_+ + \frac{2G\beta\rho_a}{K + 4/3Gkl} \frac{1}{l},$$
$$\sigma_a^{kr} / 10^7 = 8 + \frac{19}{\xi l} \text{ [Н/м}^2\text{]},$$

тобто значення σ_a^{kr} зменшується обернено пропорційно до зростання товщини шару. Про таку залежність свідчать експериментальні дослідження.

5. Висновки. В рамках моделі структурно неоднорідного твердого тіла на підставі розв'язку задачі для пружного шару та відомих у літературі експериментальних даних, що стосуються поверхневого натягу алюмінію, проведено оцінку модельних коефіцієнтів. До ключової системи рівнянь згаданої моделі входять три коефіцієнти. Ми провели оцінку двох із них, тоді як третій коефіцієнт залишається невизначеним. Хоча його знак оцінено, однак зазначити числових експериментів визначення його величини неможливо. Тому й неможливо обчислити значення хімічного потенціалу, що усталюється на поверхні тіла. Оцінені параметри моделі дають змогу однозначно описувати напружено-деформований стан тіла.

Отримані результати допомогли оцінити поверхневі напруження та вивчити розмірний ефект міцності шару (тонкої плівки). З'ясовано, що поверхневі напруження, які усталюються у вільному від силового навантаження шарі, більші від експериментально вимірюваної межі міцності.

Список використаної літератури

1. Бурак Я. И. Математическое моделирование локально-градиентных процессов в инерционных термомеханических системах / Я. И. Бурак, Т. С. Нагирный // Прикл. механика. – 1992. – Т. 28, №12. – С. 3–23.
2. Нагирний Т. С. Термодинамічні моделі та методи у локально градієнтній термомеханіці з врахуванням приповерхневих явищ: автореферат дисертації д. ф.-м. н.: 01.02.04 / Нагирний Т. С. – Львів, 1998. – 32 с. – Рукопис.
3. Фізико-математичне моделювання складних систем / Я. Бурак, Є. Чапля, Т. Нагирний та ін.; під ред. Я. Бурака, Є. Чаплі. – Львів: СПОЛОМ, 2004.
4. Нагирний Т. Моделювання та дослідження квазістатичних механодифузійних процесів із врахуванням приповерхневої неоднорідності / Т. Нагирний, О. Грицина // 4-а Українсько-Польська конференція: матеріали конференції (Львів, 24-26 червня 2004 р.). – Львів, 2004. – Т. 1. – С. 159–174.

5. Грицина О. Р. Локально-градієнтний підхід у термомеханіці / О. Р. Грицина, Т. С. Нагірний, К. А. Червінка // Фіз.-мат. моделювання та інформаційні технології. – 2006. – № 3. – С. 59–64.
6. Nahirnyj T. Interface Phenomena and Interaction Energy at the Surface of Electroconductive Solids / T. Nahirnyj, K. Tchervinka // Computational Methods in Science and Technology. – 2008. – 14(2). – P. 105–110.
7. Нагірний Т. С. До вибору крайових умов у задачах локально градієнтного підходу в термомеханіці / Т. С. Нагірний, К. А. Червінка, З. В. Бойко // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 2011. – Т. 54, № 3. – С. 199–206.
8. Shvets R.M. Discontinuous Contact of an Anisotropic Half-plane and a Rigid Base with Disturbed Surface / R. M. Shvets, R. M. Martynyak, A. A. Kryshchak / Int. J. Engng. Sci. – 1996. – 34, № 2. – P. 183–200.
9. Adams G. G. Adhesion at the wavy contact interface between two elastic bodies / G. G. Adams // Trans. ASME. J. Appl. Mech. – 2004. – 71. – P. 851–856.
10. Нагірний Т. Про один підхід до формулювання крайових задач нелокальної теорії пружності / Т. Нагірний, З. Бойко // Фіз.-мат. моделювання та інформаційні технології. – 2011. – Вип. 14. – С. 95–104.
11. ГОСТ 2789-73 – Шероховатость поверхности. Параметры и характеристики.
12. Degarmo E. P. Materials and Processes in Manufacturing (9th ed.) / E. P. Degarmo, J. T. Black, R. A. Kohser. – Wiley, 2003. – P. 223.
13. Фролов Ю. А. Курс коллоидной химии: Поверхностные явления и дисперсные системы / Ю. А. Фролов. – М.: Химия. – 1982.
14. Непийко С. А. Физические свойства малых металлических частиц / С. А. Непийко. – К.: Наук. думка, – 1985.
15. Механика разрушения и прочность материалов: справ. пособие; под ред. В. В. Панасюка; в 4-х т. Т. 1. Основы механики разрушения материалов / В. В. Панасюк, А. Е. Андрейкив, В. С. Партон. – К.: Наук. думка, – 1988.
16. Нагірний Т. С. Поверхневі напруження в шарі. Поверхневий натяг та міцність шару / Т. С. Нагірний // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 1999. – Т. 42, №4. – С. 111–115.

К ОЦЕНКЕ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ СТРУКТУРНО НЕОДНОРОДНОГО ТВЕРДОГО ТЕЛА

Зоя БОЙКО¹, Тарас НАГІРНИЙ^{1,2}

¹*Центр математического моделирования Института прикладных
проблем механики и математики им. Я. С. Подстригача НАН Украины,
ул. Дж. Дудаева, 15 79005 Львов, Украина*

²*Зеленогурский университет,
ул. проф. Шафрана, 4 65-516 Зелёна-Гура, Польша*

Сформулировано и исследовано решение задачи, которое описывает равновесное состояние структурно неоднородного твердого слоя. Оценку коэффициентов модели проведено на основании известных экспериментальных данных для поверхностного натяжения. Изучено размерные эффекты поверхностных напряжений и прочности слоя. Показано, что поверхностные напряжения, что устанавливаются в свободном от силовых нагрузок слое, большие от экспериментально измеряемой границы прочности.

Ключевые слова: структурно неоднородные твердые тела, тонкие пленки, размерные эффекты, параметры модели.

TO ESTIMATION OF MODEL PARAMETERS STRUCTURALLY HETEROGENEOUS SOLID

Zoya BOIKO¹, Taras NAHIRNYJ^{1,2}

¹*Center of Mathematical Modelling of Pidstryhach
Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics
of Ukrainian National Academy of Sciences
Dudaieva Str., 15 79005 Lviv, Ukraine*

²*University of Zielona Gora,
Prof. Shafran Str., 4 65-516 Zielona Gora, Poland*

The solution of the problem which describes equilibrium state of structurally heterogeneous solid layer is investigated. The estimation of model coefficients is conducted using known data for a surface tension. The size effects of surface stress and strength layer are studied. It is shown that the surface stress that are established in the layer, which is free of a force loading, are more than experimentally measuring strength limit.

Key words: structurally heterogeneous solid, thin films, size effects, model parameters.

Стаття надійшла до редколегії 08.11.2011
Прийнята до друку 31.05.2012