Поверхнева Енергія Деформації і Поляризації у Межах Градієнтної Теорії Пружних Діелектриків з Квадрупольними Електричними Моментами

Ольга Грицина
відділ математичних методів
обчислювального експерименту,
Центр математичного моделювання
Інституту прикладних проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України
Львів, Україна
gryt@cmm.lviv.ua, gryt045@gmail.com

Василь Кондрат
кафедра інженерної механіки,
Національна академія сухопутних військ
імені гетьмана Петра Сагайдачного
Львів, Україна
vasyl.kondrat@gmail.com

Surface Energy of Deformation and Polarization in the Framework of Gradient Theory of Elastic Dielectrics with Quadruple Polarization

Olha Hrytsyna
department for mathematical methods
of computing experiment,
Center of Mathematical Modeling of Pidstryhach Institute
for Applied Problems of Mechanics and Mathematics,
National Academy of Sciences of Ukraine
Lviv, Ukraine
gryt@cmm.lviv.ua, gryt045@gmail.com

Vasyl Kondrat
department of engineering mechanics,
Hetman Petro Sahaydachnyi Academy
of Army Ground Forces
Lviv, Ukraine
vasyl.kondrat@gmail.com

***Анотація*—У роботі сформульовано замкнену систему рівнянь нелінійної градієнтного типу теорії термоелектропружності неферомагнітних діелектриків. Розроблена модель враховує поряд із електричним дипольним моментом також квадрупольний момент. З умови інваріантності рівняння балансу енергії відносно просторових трансляцій, за використання рівнянь балансу маси й ентропії, а також рівняння балансу енергії електромагнітного поля, отримано рівняння балансу механічного імпульсу і нелокальні визначальні співвідношення. Одержані рівняння описують п'єзоелектричні й флексоелектричні явища, а також термоізоляційний ефект. В ізотермічному наближенні співвідношення розробленої теорії використані для розрахунку поверхневої енергії деформації і поляризації твердих тіл. Показано, що зазначена енергія визначається поверхневим значенням скалярного добутку вектора електричного поля і квадрупольного моменту.**

***Abstract*—In the present work, a complete nonlinear gradient-type theory of the thermoelectroelasticity of non-ferromagnetic dielectrics is proposed. In addition to the electric dipole moment, this model includes the quadruple one as well. If we subject the energy balance equation to invariance under rigid body translation and make use of the mass and entropy balance equations as well as of the balance equation for the energy of an electromagnetic field, then the moment equation and the nonlocal constitutive relations are obtained in a systematic manner. The resulting equations also encompass such phenomena as piezoelectricity, flexoelectricity, and the thermopolarization effect. For an isothermal approximation, the proposed theory is used to calculate the surface energy of deformation and polarization. It is shown that the mentioned energy is defined by the scalar product of the electric field vector and the quadruple moment.**

Ключові слова—градієнтна електротермопружність; неферомагнітні діелектрики; нелокальні визначальні співвідношення; дипольний і квадрупольний електричні моменти; поверхнева енергія деформації і поляризації.

Keywords—gradient electrothermoelasticity; non-ferromagnetic dielectrics; nonlocal constitutive equations; dipole and quadruple electric moments; surface energy of deformation and polarization.

I. Вступ

Останні кілька десятиліть у науковій літературі значна увага надається розвитку нелокальних теорій діелектриків. Побудова нових математичних моделей діелектриків була стимульована, з одного боку, необхідністю подолати низку невідповідностей, які виникають у класичних (локальних) теоріях (наприклад, уникнути сингулярностей розв'язків у задачах із зосередженими чинниками), а з іншого — потребою обґрунтувати ряд спостережуваних ефектів, які не охоплюють класичні моделі. Один із шляхів побудови узагальнених моделей діелектриків – розвиток теорій поляризовних середовищ із внутрішніми ступенями свободи (урахування мікроповоротів, мікродеформацій тощо). До таких належать, наприклад, мікроморфні і мікрополярні теорії та похідні від них [1]. Інший шлях розбудови узагальнених моделей діелектриків полягав у розвитку теорій градієнтного типу [2, 3]. Їх будували, постулюючи залежність внутрішньої енергії від градієнтів деяких фізичних величин, наприклад, від градієнтів тензора деформації [4], вектора поляризації [5] чи вектора напруженості електричного поля [6]. При цьому, зазвичай, відповідні системи рівнянь моделей формували з використанням варіаційних методів. Метою пропонованого дослідження є розвиток континуально-термодинамічного підходу до побудови градієнтного типу моделей діелектриків. Покажемо, що для градієнтної теорії діелектриків «природним» фізичним параметром термодинамічного стану є градієнт вектора напруженості електричного поля. При цьому для одержання нелокальних рівнянь стану достатньо у поляризаційному струмі врахувати вищі електричні моменти, наприклад, квадрупольний момент. Співвідношення розробленої теорії застосуємо для визначення у твердих тілах поверхневої енергії деформації і поляризації.

II. Система рівнянь моделі

Розглядаємо ізотропне термопружне поляризовне неферомагнітне тверде тіло, яке займає область (V) евклідового простору та обмежене гладкою поверхнею (Σ). У тілі протікають механічні, теплові й електромагнітні процеси, спричинені зовнішніми діями. Усі поля, які характеризують процеси, що протікають у тілі, повинні задовольняти фундаментальні закони фізики – балансу маси, імпульсу, моменту імпульсу, ентропії й енергії, а також рівняння Максвелла.

Запишемо рівняння балансу маси в інтегральній формі

$$\frac{d}{dt}\int_{(V)}\rho\,dV=-\int_{(\Sigma)}\rho\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}\,d\Sigma\,. \tag{1}$$

У локальній формі рівняння (1) запишемо так [7]:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{v})=0\,. \tag{2}$$

Тут ρ – густина маси, $\mathbf{v}$ – вектор швидкості конвективного руху, t – час, $\mathbf{n}$ – зовнішня нормаль до поверхні (Σ), ∇ – оператор Гамільтона, «$\cdot$» – скалярний добуток.

Швидкість зміни ентропії елемента тіла визначається притоком ентропії ззовні, конвективним складником потоку ентропії через поверхню тіла, виникненням ентропії σ_s за одиницю часу та джерелами тепла $\Re$. В інтегральній формі рівняння балансу ентропії має вигляд [8]

$$\frac{d}{dt}\int_{(V)}\rho s\,dV=-\oint_{(\Sigma)}\mathbf{J}_s\cdot\mathbf{n}\,d\Sigma-\oint_{(\Sigma)}\rho s\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}\,d\Sigma+ +\int_{(V)}\sigma_s dV+\int_{(V)}\rho\frac{\Re}{T}dV\,, \tag{3}$$

де s – питома ентропія, $\mathbf{J}_s$ – вектор густини потоку ентропії, T – абсолютна температура.

Рівняння (3) у локальній формі запишемо так

$$\rho\frac{ds}{dt}=-\nabla\cdot\mathbf{J}_s+\sigma_s+\rho\frac{\Re}{T}\,.$$

Враховуючи співвідношення $\mathbf{J}_s=\mathbf{J}_q/T$, яке пов'язує вектори густин потоків ентропії $\mathbf{J}_s$ й тепла $\mathbf{J}_q$, маємо

$$\rho T\frac{ds}{dt}=-\nabla\cdot\mathbf{J}_q+\frac{1}{T}\mathbf{J}_q\cdot\nabla T+T\sigma_s+\rho\Re\,. \tag{4}$$

Рівняння електродинаміки мають вигляд [9, 10]

$$\nabla\times\mathbf{E}=-\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t},\ \nabla\times\mathbf{H}=\mathbf{J}_{ef}\,, \tag{5}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{B}=0\,,\ \nabla\cdot\mathbf{D}=\rho_e \tag{6}$$

Тут $\mathbf{B}$, $\mathbf{H}$ – вектори індукції та напруженості магнітного поля; $\mathbf{E}$ і $\mathbf{D}$ – вектори напруженості та індукції електричного поля; $\mathbf{J}_{ef}=\mathbf{J}_e+\mathbf{J}_{ed}+\mathbf{J}_{es}$ – вектор густини повного електричного струму; $\mathbf{J}_e$ – вектор густини електричного струму, пов'язаного з переміщенням вільних зарядів; $\mathbf{J}_{ed}=\varepsilon_0\left(\partial\mathbf{E}/\partial t\right)$ – струм зміщення; $\mathbf{J}_{es}$ – поляризаційний струм, пов'язаний зі зміною не лише дипольного, а й квадрупольного електричних моментів; ρ_e – густина вільного електричного заряду; ε_0 – електрична стала; «$\times$» – векторний добуток.

Для неферомагнітного середовища, яке розглядаємо тут, можна записати, що

$$\mathbf{B}=\mu_0\mathbf{H}\,, \tag{7}$$

де μ_0 – магнітна стала.

Введемо вектор $\mathbf{\Pi}_e$ електричної поляризації, який пов'язаний з вектором $\mathbf{J}_{es}$ співвідношенням [10]

$$\mathbf{\Pi}_e = \int_0^t \mathbf{J}_{es}\, dt \;\Rightarrow\; \mathbf{J}_{es} = \frac{\partial \mathbf{\Pi}_e}{\partial t}.$$

Відтак, для вектора $\mathbf{J}_{ef}$ густини повного електричного струму маємо співвідношення

$$\mathbf{J}_{ef} = \mathbf{J}_e + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{\Pi}_e}{\partial t}. \qquad (8)$$

Формулою

$$\rho_{e\pi} = -\nabla \cdot \mathbf{\Pi}_e \qquad (9)$$

введемо у розгляд густину наведеного електричного заряду [9]. Введена величина справджує закон збереження наведеного електричного заряду [9]

$$\frac{\partial \rho_{e\pi}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_{es} = 0. \qquad (10)$$

Вектор поляризації $\mathbf{\Pi}_e$ пов'язаний з дипольним моментом $\mathbf{P}$ та тензором електричного квадрупольного моменту $\hat{\mathbf{Q}}$ формулою [10]

$$\mathbf{\Pi}_e = \mathbf{P} - \frac{1}{6}\nabla \cdot \hat{\mathbf{Q}}. \qquad (11)$$

Тоді для вектора $\mathbf{D}$ електричної індукції маємо [10]

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{\Pi}_e = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} - \frac{1}{6}\nabla \cdot \hat{\mathbf{Q}}. \qquad (12)$$

Із рівнянь Максвелла (5), (6) випливає співвідношення, яке трактують як рівняння балансу енергії електромагнітного поля [7]

$$\frac{\partial U_e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{S}_e + \left(\mathbf{J}_e + \frac{\partial \mathbf{\Pi}_e}{\partial t}\right) \cdot \mathbf{E} = 0. \qquad (13)$$

Тут $U_e = \frac{1}{2}\left(\varepsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mu_0^{-1}\mathbf{B}^2\right)$ – густина енергії електромагнітного поля, $\mathbf{S}_e = \mu_0^{-1}\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ – густина потоку енергії електромагнітного поля [7].

Зазначимо, що останній доданок у формулі (13) відображає вплив електромагнітного поля на речовину, яка разом з полем складає єдину матеріальну систему. Запишемо цей доданок таким чином, щоб у нього входили тензор квадрупольного моменту $\hat{\mathbf{Q}}_*$ та вектори $\mathbf{E}_*, \mathbf{P}_*, \mathbf{J}_{e*}$ напруженості електричного поля, дипольного моменту й густини електричного струму в системі відліку центрів мас, яка рухається зі швидкістю $\mathbf{v}$ відносно лабораторної системи відліку. Для неферомагнітного тіла у нерелятивістському наближенні маємо: $\mathbf{E}_* = \mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}$, $\hat{\mathbf{Q}}_* = \hat{\mathbf{Q}}$, $\mathbf{P}_* = \mathbf{P}$, $\mathbf{J}_{e*} = \mathbf{J}_e - \rho_e \mathbf{v}$. Тут вектор $\mathbf{J}_{e*}$ трактуємо як вектор густини струму провідності. Враховуючи це, а також рівняння балансу маси (2), після деяких перетворень надамо рівнянню (13) балансу енергії електромагнітного поля вигляду

$$\frac{\partial U_e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{S}_e + \mathbf{J}_{e*} \cdot \mathbf{E}_* + \rho \frac{d\mathbf{p}}{dt} \cdot \mathbf{E}_* + \rho \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{dt} : \left(\nabla \otimes \mathbf{E}_*\right) +$$
$$+ \mathbf{v} \cdot \left[\rho_e \mathbf{E}_* + \left(\mathbf{J}_{e*} + \frac{\partial \mathbf{\Pi}_e}{\partial t}\right) \times \mathbf{B} + \rho\left(\nabla \otimes \mathbf{E}_*\right) \cdot \mathbf{p} -\right.$$
$$\left. - \rho\left(\nabla \otimes \nabla \otimes \mathbf{E}_*\right) : \hat{\mathbf{q}}\right] - \nabla \cdot \left\{\left[\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}_* + \hat{\mathbf{q}} : \left(\nabla \otimes \mathbf{E}_*\right)\right]\rho \mathbf{v}\right\} = 0. \qquad (14)$$

Тут «$\otimes$» – діадний добуток.

Замкнену систему рівнянь моделі одержимо, виходячи з рівняння балансу повної енергії, яке для системи «тіло-електромагнітне поле» запишемо так:

$$\frac{d}{dt}\int_{(V)} \mathscr{E}\, dV = -\oint_{(\Sigma)} \left[\rho\left(u + \frac{1}{2}\mathbf{v}^2\right)\mathbf{v} - \hat{\mathbf{\sigma}} \cdot \mathbf{v} +\right.$$
$$\left. + \mathbf{S}_e + \mathbf{J}_q\right] \cdot \mathbf{n}\, d\Sigma + \int_{(V)} \left(\rho \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} + \rho \Re\right) dV. \qquad (15)$$

Тут $\mathscr{E} = \rho u + \frac{1}{2}\rho \mathbf{v}^2 + U_e$ – повна енергія системи, u – питома внутрішня енергія, $\rho \mathbf{v}^2/2$ – кінетична енергія, $\hat{\mathbf{\sigma}}$ – тензор напружень Коші, $\mathbf{F}$ – вектор масових сил.

Трансформуючи співвідношення (15) із урахуванням рівнянь балансу маси (2), ентропії (4) та енергії електромагнітного поля (14), одержимо

$$\rho \frac{du}{dt} = \rho T \frac{ds}{dt} + \hat{\mathbf{\sigma}}_* : \frac{d\hat{e}}{dt} + \rho \mathbf{E}_* \cdot \frac{d\mathbf{p}}{dt} + \rho \nabla \otimes \mathbf{E}_* : \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{dt} +$$
$$+ \mathbf{J}_{e*} \cdot \mathbf{E}_* - \mathbf{J}_q \cdot \frac{\nabla T}{T} - T\sigma_s +$$
$$+ \mathbf{v} \cdot \left(-\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla \cdot \hat{\mathbf{\sigma}}_* + \mathbf{F}_e + \rho \mathbf{F}\right). \qquad (16)$$

Тут $\hat{e}$ – тензор деформації Гріна, який пов'язаний з вектором переміщень $\mathbf{u}$ співвідношенням Коші

$$\hat{e} = \left[\nabla \otimes \mathbf{u} + \left(\nabla \otimes \mathbf{u}\right)^{\mathrm{T}}\right]/2. \qquad (17)$$

З умови інваріантності співвідношення (16) відносно просторових трансляцій отримаємо рівняння балансу механічного імпульсу

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{\sigma}}_* + \mathbf{F}_e + \rho \mathbf{F} = \rho \frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2}, \qquad (18)$$

узагальнене рівняння Гіббса

$$\rho \frac{du}{dt} = \rho T \frac{ds}{dt} + \hat{\mathbf{\sigma}}_* : \frac{d\hat{e}}{dt} + \rho \mathbf{E}_* \cdot \frac{d\mathbf{p}}{dt} + \rho \nabla \otimes \mathbf{E}_* : \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{dt} \qquad (19)$$

та вираз для виробництва ентропії

$$\sigma_s = \mathbf{J}_{e*} \cdot \mathbf{E}_* \frac{1}{T} - \mathbf{J}_q \cdot \frac{\nabla T}{T^2} . \qquad (20)$$

Тут

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_* = \hat{\boldsymbol{\sigma}} - \rho\left[\left(\mathbf{p}\cdot\mathbf{E}_*\right) + \rho\hat{\mathbf{q}} : \left(\nabla\otimes\mathbf{E}_*\right)\right]\hat{\mathbf{I}} ,$$

$$\mathbf{F}_e = \rho_e\mathbf{E}_* + \rho\left(\nabla\otimes\mathbf{E}_*\right)\cdot\mathbf{p} + \left(\mathbf{J}_{e*} + \frac{\partial\boldsymbol{\Pi}_e}{\partial t}\right)\times\mathbf{B} -$$
$$-\rho\left(\nabla\otimes\nabla\otimes\mathbf{E}_*\right) : \hat{\mathbf{q}},$$

$\hat{\mathbf{I}}$ – одиничний тензор.

Наслідком урахування квадрупольного електричного моменту є модифікація тензора напружень $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_*$ і виникнення у пондеромоторній силі $\mathbf{F}_e$ додаткових складників.

Формули (19), (20) є основою для формування визначальних співвідношень моделі, а саме, нелокальних рівнянь стану та кінетичних співвідношень.

Якщо у формулі (19) за допомогою перетворення Лежандра

$$f = u - Ts - \mathbf{E}_* \cdot \mathbf{p} - \hat{\mathbf{q}} : \left(\nabla\otimes\mathbf{E}_*\right) , \qquad (21)$$

перейти до вільної енергії Гельмгольца, то отримаємо такі нелокальні рівняння стану:

$$s = -\frac{\partial f}{\partial T} ,\ \hat{\boldsymbol{\sigma}}_* = \rho\frac{\partial f}{\partial\hat{\boldsymbol{e}}} ,\ \mathbf{p} = -\frac{\partial f}{\partial\mathbf{E}_*} ,\ \hat{\mathbf{q}} = -\frac{\partial f}{\partial\nabla\otimes\mathbf{E}_*} . \qquad (22)$$

Нелокальність визначальних співвідношень розробленої математичної моделі зумовлена урахуванням у поляризаційному струмі $\boldsymbol{\Pi}_e$ поряд із дипольним $\mathbf{P}$ також квадрупольного $\hat{\mathbf{Q}}$ електричного моменту.

Щоб записати рівняння стану в явному вигляді, конкретизуємо вигляд вільної енергії. Розвинемо вільну енергію f в ряд за збуреннями параметрів стану і для малих збурень обмежимося в цьому розвиненні квадратичними членами. Приймемо, що у вихідному стані $\hat{e} = 0$, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_* = 0$, $T = T_0$, $s = s_0$, $\mathbf{E}_* = 0$, $\mathbf{p} = 0$, $\nabla\otimes\mathbf{E}_* = 0$, $\hat{\mathbf{q}} = 0$. Тоді для ізотропного початково однорідного тіла запишемо

$$f = f_0 - s_0\theta + \frac{1}{2\rho_0}\left(K - \frac{2}{3}G\right)I_{e1}^2 + \frac{G}{\rho_0}I_{e2} - \frac{C_V}{2T_0}\theta^2 -$$
$$-\frac{\chi_E}{2}\mathbf{E}_*^2 + \frac{\chi_{q1}}{2}I_{E1}^2 - \chi_{q2}I_{E2} - \frac{K\alpha_T}{\rho_0}I_{e1}\theta +$$
$$+\beta_{TE}I_{E1}\theta - \frac{K\alpha_{E1}}{\rho_0}I_{e1}I_{E1} + 2G\frac{\alpha_{E2}}{\rho_0}\hat{\boldsymbol{e}} : \left(\nabla\otimes\mathbf{E}_*\right) . \qquad (23)$$

Тут $I_{e1} = \hat{\boldsymbol{e}} : \hat{\mathbf{I}} = \boldsymbol{e}$, $I_{E1} = \left(\nabla\otimes\mathbf{E}_*\right) : \hat{\mathbf{I}} = \nabla\cdot\mathbf{E}_*$, $I_{e2} = \hat{\boldsymbol{e}} : \hat{\boldsymbol{e}}$, $I_{E2} = \left(\nabla\otimes\mathbf{E}_*\right) : \left(\nabla\otimes\mathbf{E}_*\right)$; $\theta = T - T_0$ – збурення температури; K, G, C_V, χ_E, χ_{q1}, χ_{q2}, α_T, β_{TE}, α_{E1}, α_{E2} – характеристики матеріалу.

Для ізотропних матеріалів на основі (22) і (23) маємо

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = 2G\hat{\boldsymbol{e}} + 2G\alpha_{E2}\nabla\otimes\mathbf{E} +$$
$$+\left[\left(K - \frac{2}{3}G\right)e - K\alpha_T\theta - K\alpha_{E1}\nabla\cdot\mathbf{E}\right]\hat{\mathbf{I}} , \qquad (24)$$

$$s = s_0 + \frac{C_V}{T_0}\theta + \frac{K\alpha_T}{\rho_0}e - \beta_{TE}\nabla\cdot\mathbf{E} , \qquad (25)$$

$$\mathbf{p} = \chi_E\mathbf{E} , \qquad (26)$$

$$\hat{\mathbf{q}} = 2\chi_{q2}\nabla\otimes\mathbf{E} - 2G\alpha_{E2}\hat{\boldsymbol{e}} - \left(\chi_{q1}\nabla\cdot\mathbf{E} - \frac{K\alpha_{E1}}{\rho_0}e + \beta_{TE}\theta\right)\hat{\mathbf{I}} . \qquad (27)$$

Аналіз одержаних визначальних співвідношень засвідчив, що розроблена модель враховує електромеханічну взаємодію у матеріалах високої симетрії (ізотропних матеріалах) і описує флексоелектричний та термополяризаційний ефекти у них.

Подамо рівняння (20) для виробництва ентропії у вигляді: $\sigma_s = \sum_{k=1}^{2}\mathbf{j}_k\cdot\mathbf{X}_k$. Тут $\mathbf{j}_k$ та $\mathbf{X}_k$ – термодинамічні потоки та сили: $\mathbf{j}_1 = \mathbf{J}_{e*}$, $\mathbf{X}_1 = \mathbf{E}_*/T$, $\mathbf{j}_2 = \mathbf{J}_q$, $\mathbf{X}_2 = -\nabla T/T^2$. Тоді на основі цього виразу можемо записати такі кінетичні рівняння

$$\mathbf{j}_1 = \mathbf{j}_1(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2) ,\ \mathbf{j}_2 = \mathbf{j}_2(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2) . \qquad (28)$$

У лінійному наближенні кінетичні рівняння (28) набудуть вигляду

$$\mathbf{J}_{e*} = \sigma_e\mathbf{E}_* + \sigma_e\eta\nabla T ,\ \mathbf{J}_q = -\lambda\nabla T + \pi_t\mathbf{J}_{e*} , \qquad (29)$$

де σ_e, λ – коефіцієнти електро- й теплопровідності, коефіцієнти η, π_t характеризують термоелектричні явища. Зазначимо, що $\pi_t = -\eta T_0$.

Замкнена нелінійна система рівнянь градієнтної електромагнітотермомеханіки поляризовних неферомагнітних тіл охоплює: рівняння балансу маси (2), ентропії (4) та імпульсу (18), співвідношення (5), (6), які відповідають законам Ампера, Фарадея, Гауса-Фарадея та Гауса-Кулона, формулу (8), визначальні співвідношення (7), (12), (22) і (28), формулу Коші (17), а також закон збереження наведеного електричного заряду (10).

III. Визначення поверхневої енергії деформації та поляризації

Відомо, що для поділу довільного твердого деформівного тіла на дві частини вздовж деякої поверхні (Σ) необхідно подолати енергію зв'язку між частинками, розташованими на та в околі цієї поверхні. Під такою розуміють енергію, яку необхідно затратити, щоб, залишивши незмінною деформацію тіла, зруйнувати атомні зв'язки вздовж поверхні (Σ) [11]. Цього можна досягти, приклавши зовнішнє поле. Якщо ж це поле забрати, то тіло в околі поверхні здеформується. Енергію, пов'язану з цією деформацією, називають поверхневою енергією деформації. Отже, поверхнева енергія деформації — це та енергія, яку необхідно відняти від енергії зв'язку, щоб визначити поверхневу енергію. У працях [4, 11] показано, що поверхнева енергія деформації завжди від'ємна і складає до 30% від повної енергії зв'язування, а тому нехтувати нею не можна.

Класичні теорії пружності не пропонують шляху обчислення поверхневої енергії деформації. Використаємо для визначення цієї енергії записані вище співвідношення градієнтної теорії електропружності. Для спрощення викладок приймемо ізотермічне наближення.

Розглянемо рівноважний стан ізотропного тіла, що займає область (V) евклідового простору й обмежене гладкою поверхнею (Σ) із зовнішньою нормаллю $\mathbf{n}$. Нехай тіло є ідеальним діелектриком ($\rho_e = 0$) і контактує з вакуумом (область (V_v)).

У поданні (23) для вільної енергії Гельмгольца f враховуємо лінійні рівняння стану (24)-(27). Відтак, надамо потенціалу f вигляду

$$f - f_0 = \frac{1}{2\rho_0}\hat{\boldsymbol{\sigma}} : \hat{e} - \frac{1}{2}\mathbf{E}\cdot\mathbf{p} - \frac{1}{2}\hat{\mathbf{q}} : (\nabla\otimes\mathbf{E}). \qquad (30)$$

Якщо у співвідношенні (30) врахувати формулу $\mathbf{E} = -\nabla\varphi_e$, де φ_e — електричний потенціал [11], а також подання (21) для вільної енергії, формулу Коші (17), закон Гауса (6_2) і рівняння рівноваги

$$\nabla\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} + \rho_0\mathbf{F} = 0,$$

то після низки перетворень надамо йому вигляду

$$\mathscr{E} = \frac{1}{2}\rho_0\mathbf{F}\cdot\mathbf{u} + \frac{1}{2}\nabla\cdot(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{u}) - \frac{1}{2}\nabla\cdot(\varphi_e\mathbf{D}) + \frac{1}{12}\nabla\cdot(\mathbf{E}\cdot\hat{\mathbf{Q}}).$$

Інтегруємо обидві частини записаної вище рівності по області $(V') = (V)\cup(V_v)$, яку займає тіло з вакуумом. Перейшовши в останніх трьох доданках справа від знаку рівності до поверхневих інтегралів, запишемо

$$\int_{(V')}\mathscr{E}\,dV = \frac{1}{2}\rho_0\int_{(V)}\mathbf{F}\cdot\mathbf{u}\,dV + \frac{1}{2}\int_{(\Sigma)}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{u} - \varphi_e[\mathbf{D}] + \frac{1}{6}\mathbf{E}\cdot\hat{\mathbf{Q}}\right)\cdot\mathbf{n}\,d\Sigma. \qquad (31)$$

Тут $[\mathbf{D}]$ – стрибок вектора електричної індукції на поверхні (Σ).

Розглядаємо рівноважний стан тіла, поверхні якого вільні від дії зовнішніх зусиль ($\forall\mathbf{r}\in(\Sigma)$: $\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{n} = 0, [\mathbf{D}] = 0$), масові сили відсутні $(\forall\mathbf{r}\in(V)$: $\mathbf{F} = 0)$. Тоді з виразу (31) за відсутності зовнішньої дії на тіло отримаємо таке співвідношення

$$\int_{(V)}\mathscr{E}\,dV = \frac{1}{2}\rho_0\int_{(\Sigma)}(\mathbf{E}\cdot\hat{\mathbf{q}})\cdot\mathbf{n}\,d\Sigma.$$

Права частина цієї рівності визначає поверхневу енергію деформації і поляризації U_Σ, для визначення якої у межах розробленої теорії маємо формулу

$$U_\Sigma = \frac{1}{2}\rho_0\mathbf{E}\cdot\hat{\mathbf{q}}\cdot\mathbf{n}\Big|_{\mathbf{r}\in\Sigma}.$$

Отже, питома поверхнева енергія деформації і поляризації визначається поверхневим значенням проекції на нормаль до поверхні тіла скалярного добутку вектора напруженості електричного поля $\mathbf{E}$ і квадрупольного електричного моменту $\hat{\mathbf{q}}$.

IV. Висновки

Наслідком урахування у поляризаційному струмі електричних моментів вищого порядку є нелокальні рівняння стану узагальненої моделі електротермопружних неферомагнітних діелектриків. Показано, що з фізичної точки зору природним параметром для градієнтного типу теорій діелектриків є градієнт вектора напруженості електричного поля, спряженим до якого є питомий квадрупольний електричний момент. Розроблена теорія на рівні рівнянь стану враховує електромеханічну взаємодію в ізотропних матеріалах, а також описує флексоелектричний і термополяризаційний ефекти. Співвідношення цієї теорії дозволяють визначити поверхневу енергію деформації і поляризації твердих діелектриків. Ця енергія визначається поверхневим значенням проекції на нормаль до поверхні тіла згортки вектора напруженості електричного поля та квадрупольного електричного моменту.

Література References

[1] J A. C. Eringen, Microcontinuum field theories: foundations and solids. NewYork: Springer-Verlag, 1999.

[2] J. Yang, "Review of a few topics in piezoelectricity", *Appl Mech Rev.*, vol. 59, pp. 335–345, 2006.

[3] В. Кондрат, О. Грицина, «Лінійні теорії електромагнітомеханіки діелектриків», *Фіз.-мат. моделювання та інформ. технології*, вип. 9, с. 7-46, 2009.

[4] R. D. Mindlin, "Elasticity, piezoelectricity and crystal lattice dynamics", *J. Elasticity*, vol. 2, pp. 217–282, 1972.

[5] R. D. Mindlin, "Polarization gradient in elastic dielectrics", *Int. J. Solids Structures*, vol. 4, pp. 637–642, 1968.

[6] J. S. Yang, X. M. Yang, "Electric field gradient effect and thin film capacitance", *World. J. Eng.*, vol. 2, pp. 41–45, 2004.

[7] Я. Бурак, В. Кондрат, О. Грицина, Основи локально градієнтної теорії діелектриків. Ужгород: Поліграфцентр «Ліра», 2011.

[8] С. Де Гроот, П. Мазур, Неравновесная термодинаміка. Москва: Мир, 1964.

[9] М. М. Бредов, В. В. Румянцев, И. Н. Топтыгин, Классическая электродинамика. Москва: Наука, 1985.

[10] А. М. Федорченко, Теоретическая физика. Классическая электродинамика: Учеб. пособие. Киев: Вища школа, 1988.

[11] Ж. Можен, Механика электромагнитных сплошных сред. Москва: Мир, 1991.