

Вплив Локального Зміщення Маси на Приповерхневі Явища в Кулі

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

Галина Мороз

відділ математичного моделювання
нерівноважних процесів,
Центр математичного моделювання
Інституту прикладних проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України
Львів, Україна
halynamoroz.ua@gmail.com

The Effect of Local Mass Displacement on Near-Surface Phenomena in Sphere

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

Halyna Moroz

department for mathematical modelling
of irreversible processes,
Center of Mathematical Modeling of Pidstryhach Institute
for Applied Problems of Mechanics and Mathematics,
National Academy of Sciences of Ukraine
Lviv, Ukraine
halynamoroz.ua@gmail.com

Анотація—Співвідношення градієнтного типу теорії деформації твердих тіл, що враховують взаємозв'язок процесу деформування з локальним зміщенням маси, застосовані для вивчення впливу останнього на приповерхневу неоднорідність напружено-деформованого стану в ізотропній суцільній кулі. Досліджено вплив кривини поверхні на приповерхневу неоднорідність напружень, поверхневий натяг та поверхневу енергію деформації.

Abstract—The equations for the gradient-type theory of the deformation of solids, which take into account the interrelation between the deformation process and local mass displacement, were used to study the effect of local mass displacement on the near-surface inhomogeneity of a stress-strain state in an isotropic solid sphere. The effect of surface curvature on the near-surface inhomogeneous stresses, surface tension, and surface energy of deformation is studied.

Ключові слова—локально градієнтна теорія; локальне зміщення маси; нелокальні визначальні співвідношення; приповерхневі ефекти, поверхнева енергія деформації.

Keywords—local gradient theory; local mass displacement; nonlocal constitutive equations; near-surface phenomena, surface energy of deformation.

I. ВСТУП

Дослідження напружено-деформованого стану тонких волокон, малих частинок, а також синтез нових нанопористих та нанокомпозитних матеріалів вимагає коректного врахування у модельному описі приповерхневих та розмірних ефектів. У межах одноконтинуумного підходу згадані ефекти коректно описують нелокальні теорії пружності [1-3]. Однією із таких є локально градієнтна теорія термопружних твердих тіл, яка ґрунтується на врахуванні взаємозв'язку процесів деформування й теплопровідності із локальним зміщенням маси, з яким пов'язують можливість зміни структури матеріалу у межах фізично малого елемента тіла [4, 5]. Такі зміни структури матеріалу характерні примезовим областям твердих тіл [6]. Замкнену систему співвідношень локально градієнтної термомеханіки одержано у працях [4, 5]. Метою пропонованого дослідження є вивчення впливу локального зміщення маси на приповерхневу неоднорідність зв'язаних полів у суцільній твердій ізотропній кулі, а також використання

одержаних результатів для аналізу впливу кривини поверхні на приповерхневу неоднорідність напружень, поверхневий натяг і поверхневу енергію деформації малорозмірних твердих тіл сферичної геометрії.

II. СИСТЕМА РІВНЯНЬ МОДЕЛІ

Вивчимо вплив вільної поверхні на напружено-деформований стан вільної від зовнішнього навантаження суцільної кулі. З цією метою розглянемо рівноважний стан ізотропної кулі, яка у сферичній системі координат (r, φ, θ) займає область $r \leq R$. Приймаючи ізотермічне наближення, обмежимося розглядом процесів деформування й локального зміщення маси.

Для ізотропних матеріалів лінеаризована система рівнянь нелокальної теорії деформації пружних тіл охоплює рівняння балансу механічного імпульсу й наведеної маси [5]

$$\nabla \cdot \bar{\sigma} + \rho_0 \mathbf{F} = \rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_{m\pi}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_{ms} = 0, \quad (2)$$

лінійні рівняння стану

$$\bar{\sigma} = 2G\bar{e} + \left[\left(K - \frac{2}{3}G \right) e - K\alpha_p \rho_m \right] \hat{\mathbf{I}}, \quad (3)$$

$$\mu'_\pi = \mu_{\pi 0} + d_p \rho_m - \frac{1}{\rho_0} K \alpha_p e, \quad (4)$$

$$\pi_m = -\chi_m \nabla \mu'_\pi, \quad (5)$$

а також геометричні співвідношення, які пов'язують тензор деформації \bar{e} і вектор переміщення \mathbf{u}

$$\bar{e} = \frac{1}{2} \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right]. \quad (6)$$

Тут $\bar{\sigma}$ — тензор напружень; $e = \bar{e} : \hat{\mathbf{I}}$; $\hat{\mathbf{I}}$ — одиничний тензор; $\mathbf{J}_{ms} = \partial \mathbf{\Pi}_m / \partial t$; $\mathbf{\Pi}_m$ — вектор локального зміщення маси [4, 5]; $\pi_m = \mathbf{\Pi}_m / \rho_0$; $\rho_m = \rho_{m\pi} / \rho_0$, де $\rho_{m\pi} = -\nabla \cdot \mathbf{\Pi}_m$ — густина наведеної маси [5]; $\mu'_\pi = \mu_\pi - \mu$; μ_π — міра зміни внутрішньої енергії системи, зумовленої локальним зміщенням маси [5]; μ — хімічний потенціал; $\mu_{\pi 0}$ і ρ_0 — значення потенціалу μ'_π та густини маси у природному стані безмежного однорідного середовища; K — модуль об'ємного стиску за сталої густини наведеної маси; G — модуль зсуву; α_p — коефіцієнт об'ємного розширення, спричиненого локальним зміщенням маси; χ_m — коефіцієнт, який характеризує локальне зміщення маси, зумовлене градієнтом потенціалу μ'_π ; d_p — ізохоричний коефіцієнт залежності потенціалу μ'_π від питомої густини наведеної маси; t — час; ∇ — оператор Гамільтона.

Розв'язувальну систему рівнянь отримаємо, підставивши у балансіві рівняння (1), (2) визначальні та геометричні співвідношення (3)-(6). За ключові функції вибираємо вектор переміщень \mathbf{u} і потенціал μ'_π . Тоді для стаціонарних задач локально градієнтної механіки розв'язувальна система рівнянь є такою

$$\left(\bar{K} + \frac{1}{3}G \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + G \Delta \mathbf{u} - K \frac{\alpha_p}{d_p} \nabla \mu'_\pi + \rho_0 \mathbf{F} = 0, \quad (7)$$

$$\Delta \mu'_\pi - \lambda_\mu^2 \mu'_\pi = \lambda_\mu^2 \frac{K \alpha_p}{\rho_0} \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (8)$$

У співвідношеннях (7), (8) введено позначення

$$\bar{K} = K - \frac{K^2 \alpha_p^2}{\rho_0 d_p}, \quad \lambda_\mu^2 = \frac{1}{d_p \chi_m}.$$

Значимо, що параметр $l_* = \lambda_\mu^{-1}$ має розмірність довжини і є характерною віддаллю для приповерхневих явищ.

Вважаємо, що задача характеризується центральною симетрією, а тому шукані функції залежать лише від радіуса: $\mathbf{u} = (u_r(r), 0, 0)$, $\mu'_\pi = \mu'_\pi(r)$. Тоді компоненти тензора деформації визначаються співвідношеннями:

$$e_{rr} = \frac{du_r}{dr}, \quad e_{\varphi\varphi} = \frac{u_r}{r}, \quad e_{\theta\theta} = \frac{u_r}{r} \quad (9)$$

Виходячи із рівнянь стану моделі (3)-(5) та співвідношень (9), для компонент тензора напружень, збурення $\mu'_\pi = \mu'_\pi - \mu_{\pi 0}$ модифікованого хімічного потенціалу та вектора локального зміщення маси маємо формули

$$\sigma_{rr} = \left(\bar{K} + \frac{4}{3}G \right) \frac{du_r}{dr} + 2 \left(\bar{K} - \frac{2}{3}G \right) \frac{u_r}{r} - \frac{K \alpha_p}{d_p} \mu'_\pi, \quad (10)$$

$$\sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{\theta\theta} = \left(\bar{K} - \frac{2}{3}G \right) \frac{du_r}{dr} + 2 \left(\bar{K} + \frac{1}{3}G \right) \frac{u_r}{r} - \frac{K \alpha_p}{d_p} \mu'_\pi, \quad (11)$$

$$\mu'_\pi = d_p \rho_m - \frac{K \alpha_p}{\rho_0} \left(\frac{du_r}{dr} + 2 \frac{u_r}{r} \right),$$

$$\pi_m(r) = -\chi_m \frac{d\mu'_\pi}{dr}. \quad (12)$$

За відсутності дії масових сил, ґрунтуючись на співвідношеннях (7)-(12), для визначення компонент вектора переміщення u_r та потенціалу μ'_π маємо таку систему рівнянь

$$\frac{d}{dr} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d(r^2 u_r)}{dr} - \frac{K \alpha_p}{d_p (\bar{K} + 4G/3)} \mu'_\pi \right] = 0, \quad (13)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mu'_\pi}{dr} \right) - \lambda_\mu^2 \mu'_\pi = \lambda_\mu^2 \frac{K \alpha_p}{\rho_0 r^2} \frac{d(r^2 u_r)}{dr}. \quad (14)$$

Врахувавши, що $\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\tilde{u}'_{\pi}}{dr} \right) = \frac{d^2(r\tilde{u}'_{\pi})}{dr^2}$, запишемо рівняння (14) так

$$\frac{d^2(r\tilde{u}'_{\pi})}{dr^2} - \lambda_{\mu}^2 r \tilde{u}'_{\pi} = \lambda_{\mu}^2 \frac{K\alpha_p}{\rho_0 r} \frac{d(r^2 u_r)}{dr}. \quad (15)$$

Загальний розв'язок рівнянь (13) і (15) має вигляд

$$u_r = \frac{K\alpha_p}{d_p(\bar{K} + 4G/3)\tilde{\lambda}r} \left[B_1 \left(ch(\tilde{\lambda}r) - \frac{sh(\tilde{\lambda}r)}{\tilde{\lambda}r} \right) + B_2 \left(sh(\tilde{\lambda}r) - \frac{ch(\tilde{\lambda}r)}{\tilde{\lambda}r} \right) \right] + \frac{B_3 r}{3(I + \mathbf{M})} + \frac{B_4}{r^2}, \quad (16)$$

$$\tilde{u}'_{\pi} = \frac{1}{r} \left[B_1 sh(\tilde{\lambda}r) + B_2 ch(\tilde{\lambda}r) \right] - \frac{K\alpha_p}{\rho_0(I + \mathbf{M})} B_3, \quad (17)$$

де B_i , $i = \overline{1,4}$, — сталі інтегрування, які визначаємо з крайових умов, а

$$\tilde{\lambda}^2 = \lambda_{\mu}^2 (I + \mathbf{M}), \quad \mathbf{M} = \frac{K^2 \alpha_p^2}{\rho_0 d_p} \left/ \left(\bar{K} + \frac{4}{3} G \right) \right.$$

Розглядаємо рівноважний стан вільної від зовнішнього навантаження кулі. Вважаємо, що куля контактує з середовищем, яке описуємо у наближенні вакууму. Відтак, крайові умови запишемо так [5]:

$$\forall r = R: \sigma_{rr}(R) = 0, \quad u_r(0) = 0, \quad \tilde{u}'_{\pi}(R) = -\mu_{\pi 0}. \quad (18)$$

До цих умов слід долучити умову обмеженості потенціалу \tilde{u}'_{π} у разі $r \rightarrow 0$.

Розв'язок (16), (17), що задовольняє крайовим умовам (18), має вигляд

$$u_r(r) = -\frac{\mu_{\pi 0} R K \alpha_p}{(\bar{K} + 4G/3) d_p} \left[\frac{I}{\tilde{\lambda} r sh(\tilde{\lambda} R)} \left(I + \frac{\mathbf{M}}{\zeta} \right) \left(ch(\tilde{\lambda} r) - \frac{sh(\tilde{\lambda} r)}{\tilde{\lambda} r} \right) + \frac{r}{3\zeta R} \right], \quad (19)$$

$$\tilde{u}'_{\pi}(r) = -\mu_{\pi 0} \left[\left(I + \frac{\mathbf{M}}{\zeta} \right) \frac{sh(\tilde{\lambda} r)}{sh(\tilde{\lambda} R)} \frac{R}{r} - \frac{\mathbf{M}}{\zeta} \right], \quad (20)$$

$$\text{де } \zeta = \frac{K \tilde{\lambda}^2 R^2}{4G(\tilde{\lambda} R ch(\tilde{\lambda} R) - I)} - \mathbf{M}.$$

На основі формул (19), (20) та (9)-(12) для компонент тензора напружень та вектора локального зміщення маси отримаємо формули

$$\sigma_{rr} = \frac{4\mu_{\pi 0} K G \alpha_p}{d_p(\bar{K} + 4G/3)} \left[\left(I + \frac{\mathbf{M}}{\zeta} \right) \frac{R}{\tilde{\lambda} r^2 sh(\tilde{\lambda} R)} \times \left(ch(\tilde{\lambda} r) - \frac{sh(\tilde{\lambda} r)}{\tilde{\lambda} r} \right) - \frac{K}{4G\zeta} \right], \quad (21)$$

$$\sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{\theta\theta} = -\frac{\mu_{\pi 0} R K \alpha_p}{r d_p} \left[\left(I + \frac{\mathbf{M}}{\zeta} \right) \frac{2G}{\bar{K} + 4G/3} \frac{I}{\tilde{\lambda} r sh(\tilde{\lambda} R)} \times \left(ch(\tilde{\lambda} r) - \left(I + \tilde{\lambda}^2 r^2 \right) \frac{sh(\tilde{\lambda} r)}{\tilde{\lambda} r} \right) + \left(\frac{\bar{K}}{\bar{K} + 4G/3} + \mathbf{M} \right) \frac{r}{\zeta R} \right] \quad (22)$$

$$\pi_m(r) = \mu_{\pi 0} \lambda_m \left(I + \frac{\mathbf{M}}{\zeta} \right) \frac{\tilde{\lambda} R}{r sh(\tilde{\lambda} R)} \left[ch(\tilde{\lambda} r) - \frac{sh(\tilde{\lambda} r)}{\tilde{\lambda} r} \right]. \quad (23)$$

На рис. 1 показано розподіл напружень σ_{rr} та $\sigma_{\varphi\varphi}$ у радіальному напрямку. Напруження σ_{rr} є стискальними. Напруження $\sigma_{\varphi\varphi}$ у приповерхневій області кулі є розтягувальними. Ці напруження досягають максимальних значень на поверхні кулі. У міру віддалення від поверхні напруження $\sigma_{\varphi\varphi}$ стрімко спадають. У точці $r = R'$ вони набувають нульових значень ($\sigma_{\varphi\varphi}(R') = 0$), а далі стають стискальними.

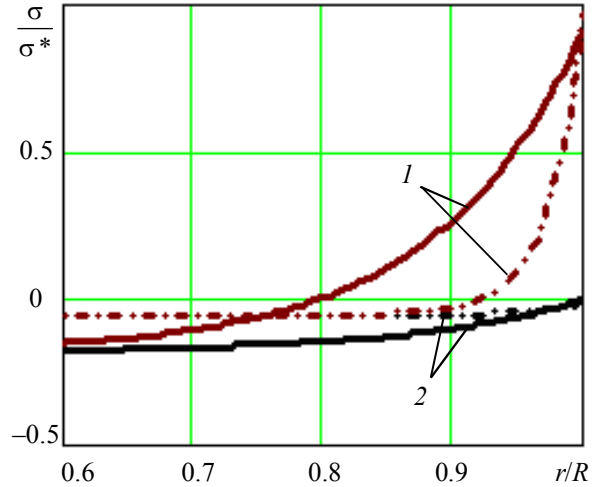


Рис. 1. Розподіл напружень $\sigma_{\varphi\varphi}$ (криві 1) та σ_{rr} (криві 2) у радіальному напрямку у кристалах хлористого натрію ($G/K = 0.41$, $\mathbf{M} = 10^{-3}$). Суцільна та штрих-пунктирна лінії відповідають $R = 10l_*$ і $R = 40l_*$, $\sigma^* = 2GK\alpha_p\mu_{\pi 0}/d_p(\bar{K} + 4G/3)$

Бачимо, що зі зменшенням радіуса кулі неоднорідність у розподілі напружень збільшується і охоплює ширші приповерхневі області.

Знаючи розподіл напружень у приповерхневій області тіла, згідно формули

$$F_n = \frac{1}{2\pi R} \int_{R'}^R \int_0^{2\pi} r \sigma_{\varphi\varphi} dr d\theta$$

можна обчислити поверхневий натяг F_n у кулі.

III. ВПЛИВ КРИВИНИ ПОВЕРХНІ НА ПОВЕРХНЕВУ ЕНЕРГІЮ ДЕФОРМАЦІЇ

Використаємо розв'язок сформульованої задачі для обчислення поверхневої енергії деформації у кулі. Згідно [7] ця енергія визначається поверхневим значенням проекції вектора локального зміщення маси π_m на нормаль до поверхні (Σ), тобто

$$U_\Sigma = -\frac{1}{2} \rho_0 \mu'_{\pi 0} \mathbf{n} \cdot \pi_m \Big|_{r \in (\Sigma)} \quad (24)$$

Грунтуючись на співвідношеннях (23) і (24), для поверхневої енергії деформації $U_\Sigma^{кулі}$ у суцільній кулі радіуса R маємо:

$$\frac{U_\Sigma^{кулі}}{U_\Sigma^\infty} = \frac{\tilde{\lambda} R [\tilde{\lambda} R ch(\tilde{\lambda} R) - sh(\tilde{\lambda} R)]}{(\tilde{\lambda} R)^2 sh(\tilde{\lambda} R) - 4 \frac{G}{K} \mathbf{M} (\tilde{\lambda} R ch(\tilde{\lambda} R) - sh(\tilde{\lambda} R))} \quad (25)$$

де $U_\Sigma^\infty = -\frac{\rho_0}{2l_*} \mu_{\pi 0}^2 \chi_m$ — поверхнева енергія деформації у масивному тілі з цього ж матеріалу з плоскою поверхнею (півпросторі). Аналіз формули (25) показує, що при

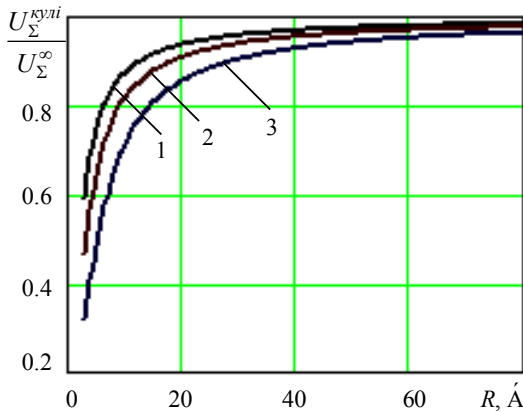


Рис.2. Залежність поверхневої енергії деформації від радіуса кривизни для різних матеріалів. Лінія 1: $G/K = 0,41$, $l_* = 1,3 \cdot 10^{-10}$ м; лінія 2: $G/K = 0,45$, $l_* = 1,89 \cdot 10^{-10}$ м, лінія 3: $G/K = 0,5$, $l_* = 3 \cdot 10^{-10}$ м

$$R \rightarrow +\infty, U_\Sigma^{кулі} \rightarrow -\frac{1}{2} \rho_0 \mu_{\pi 0}^2 \chi_m = U_\Sigma^\infty$$

Однак у наночастинках (кулях малих радіусів, сумірних із областю приповерхневої неоднорідності) поверхнева енергія деформації зменшується у міру збільшення кривини поверхні (див. рис.2). Це узгоджується з результатами експериментальних спостережень [8-10]. Зазначимо, що криві 1 та 2 на рис. 1 відповідають хлористому натрію і хлористому калію. Характерні віддалі для цих матеріалів визначені з використанням теорії ґратки і наведені у працях [11, 12].

Отже формула (25) описує розмірний ефект поверхневої енергії деформації у твердих тілах сферичної геометрії.

IV. ВИСНОВКИ

Грунтуючись на співвідношеннях локально градієнтної пружності вивчено приповерхневу неоднорідність напружено-деформованого стану у суцільній ізотропній кулі. З використанням аналітичного розв'язку сформульованої крайової задачі математичної фізики визначено поверхневу енергію деформації та проаналізовано вплив на неї кривини поверхні. Показано, що зі збільшенням кривини поверхні абсолютне значення поверхневої енергії деформації зменшується, порівняно з тілом із плоскою межею.

ЛІТЕРАТУРА REFERENCES

- [1] E. C. Aifantis, "Gradient effects at the micro-, macro- and nanoscales", *J. Mech. Behaviour of Materials*, vol. 5, no 3, pp. 355-375, 1994.
- [2] A. Eringen, *Nonlocal continuum field theories*. Springer-Verlag, New York Inc., 2002.
- [3] R. D. Mindlin, "Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity", *Int. J. Solids Struct.*, vol. 1, pp. 417-438, 1965.
- [4] Я. Й. Бурак, Є. Я. Чапля, В. Ф. Кондрат, О. Р. Грицина, "Математичне моделювання термомеханічних процесів у пружних тілах із врахуванням локального зміщення маси", *Доп. НАН України*, № 6, с. 45-49, 2007.
- [5] О. Грицина, "Крайові задачі нелокальної термопружності з урахуванням локального зміщення маси", *Фіз.-мат. моделювання та інформ. технології*, вип. 21, с. 79-88, 2015.
- [6] И. Г. Марченко, И. М. Неклюдов, И. И. Марченко, "Коллективные процессы атомного упорядочения при низкотемпературном осаждении пленок", *Доп. НАН Украины*, № 10, с. 97-103, 2009.
- [7] О. Грицина, "Визначення поверхневої енергії твердих тіл", *Фіз.-мат. моделювання та інформ. технології*, вип. 17, с. 43-54, 2013.
- [8] Н. Т. Гладких, С. В. Дукаров, А. П. Крышталь и др, *Поверхностные явления и фазовые превращения в конденсированных пленках*. Под ред. Н. Т. Гладких, Харьков: ХНУ имени В. Н. Каразина, 276 с., 2004.
- [9] В. М. Юров, Н. Х. Ибраев, С. А. Гученко, "Экспериментальное определение поверхностного натяжения наночастиц и нанопленок", *Известия высших учебных заведений. Физика*, № 1/3, с. 334-338, 2011.
- [10] В. М. Юров, В. С. Портнов, Н. Х. Ибраев, С. А. Гученко, "Поверхностное натяжение твердых тел, малых частиц и тонких пленок", *Успехи современного естествознания. Физико-математические науки*, № 11, с. 55-58, 2011.
- [11] A. Askar, P. C. Y. Lee, A. S. Cakmak, "The effect of surface curvature and discontinuity on the surface energy density and other induced fields in elastic dielectrics with polarization gradient", *Int. J. Solids and Struct.*, vol. 7, issue 5, pp. 523-537, 1971.
- [12] R. D. Mindlin, *Elasticity, piezoelectricity and crystal lattice dynamics. J. Elast.*, vol. 2, pp. 217-282, 1972.