

Пружно-деформований стан і розклинювальний тиск у тонкому шарі ідеального діелектрика

Ольга Грицина

К. ф.-м. н., с. н. с., Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005, e-mail: gryt@cmm.lviv.ua

Грунтуючись на співвідношеннях градієнтного типу моделі електромагнітоме-ханіки неферромагнітних діелектричних тіл із локальним зміщенням маси, вивчено напружений стан безмежного шару ідеального діелектрика із заземленими межами. Показано, що завдяки врахуванню у модельному описі локального зміщення маси вдається обґрунтувати можливість виникнення розклинювального тиску у твердих тонких плівках. Одержано аналітичну формулу, яка пов'язує величину розклинювального тиску з товщиною плівки.

Ключові слова: градієнтна теорія, взаємозв'язані процеси, локальне зміщення маси, масштабний ефект, розклинювальний тиск.

Вступ. Тенденції розвитку механіки суцільних середовищ значною мірою визначаються потребами сучасної техніки та новітніх технологій. Останні десятиріччя характеризуються інтенсивним розвитком нанотехнологій, синтезом і широким впровадженням у техніку нанокompatитних і нанопористих діелектричних матеріалів. Відтак, одним із важливих напрямків сучасної механіки суцільного середовища є вивчення закономірностей зв'язаних полів і процесів у таких структурах. Для дослідження напружено-деформованого стану малорозмірних об'єктів ефективно застосовують нелокальні теорії електромагнітопружності, які, на відміну від класичних (локальних) моделей, враховують ефекти далекодії. Такі теорії будували шляхом постулювання функціонального зв'язку між параметрами стану [1] або вводячи у простір параметрів стану градієнти тензора деформації [2], вектора поляризації [3], напруженості електричного поля [4].

Інший підхід до побудови нелокальних теорій започатковано професором Бураком Я. Й. та розвинуто у працях його учнів. Він ґрунтується на прийнятті до розгляду процесу локального зміщення маси — потоку маси неконвективної та недифузійної природи, пов'язаного зі зміною структури середовища [5]. Наслідком врахування процесу локального зміщення маси є нелокальні рівняння стану. У праці [6] підхід до опису процесу локального зміщення маси був узагальнений і на цьому підґрунті було побудовано градієнтного типу модель електромагніто-термомеханіки неферромагнітних діелектричних пружних тіл. У дослідженнях [7-9] та ін. було показано, що співвідношення такої моделі описують низку масштабних

ефектів і є ефективні для вивчення зв'язаних полів і процесів у малорозмірних об'єктах, у тому числі, тонких плівок. Тонкі плівки відрізняються від товстих тим, що у них не можна виділити об'ємну фазу й оточуючі її поверхневі шари. У теорії рідких плівок важливою характеристикою, яка відрізняє тонку плівку від товстої, є розклинювальний тиск. Поняття розклинювального тиску було введено Б. В. Дерягіним стосовно тонких рідких плівок [10]. Під ним розуміли надлишковий тиск, який виникає у тонкій плівці, порівняно з тиском в об'ємній фазі, з якої утворено плівку. Для плівки завтовшки $2l$ цей тиск вводили як різницю між тиском p_1 на її поверхні та тиском p_0 в об'ємній фазі, з якої утворено тонку плівку шляхом повільного зменшення її товщини: $p_{роз.}(2l) = p_1 - p_0$. Експериментальне підтвердження наявності розклинювального тиску стосується прошарків завтовшки у 5-10 нм [10]. Покажемо, що співвідношення моделі електромагнітомеханіки неферромагнітних поляризованих середовищ із локальним зміщенням маси передбачають наявність розклинювального тиску у твердих тонких плівках.

1. Формулювання задачі

Розглянемо рівноважний стан вільного від силового навантаження безмежного шару $|x| \leq l$ ідеального ізотропного діелектрика із защемленими межами. Шар контактує з середовищем, яке за електромагнітними властивостями є вакуумом.

Для вивчення напружено-деформованого стану такого тіла, збурення електромагнітного поля, спричиненого наявністю у ньому поверхні, а також закономірностей поведінки потенціалу μ_π , який є енергетичною мірою впливу локального зміщення маси на внутрішню енергію системи, використаємо розв'язувальну систему рівнянь моделі електромагнітної механіки неферромагнітних діелектричних середовищ, отриману у монографії [8]. Базовими вважаємо процеси деформування, поляризації та пружного зміщення маси і за ключові функції приймаємо вектори переміщення \mathbf{u} та напруженості електричного поля \mathbf{E} , а також потенціал $\tilde{\mu}'_\pi = \mu'_\pi - \mu_{\pi 0}$, де $\mu_{\pi 0}$ — значення потенціалу $\mu'_\pi = \mu_\pi - \mu$ у природному стані безмежного однорідного середовища, μ — хімічний потенціал. Розв'язувальна система рівнянь включає рівняння рівноваги (модифіковане внаслідок врахування локального зміщення маси), рівняння балансу наведеної маси та рівняння електростатики

$$\left(K + \frac{1}{3}G - \frac{K^2\alpha_p^2}{\rho_0 d_p} \right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + G\Delta \mathbf{u} - K \frac{\alpha_p}{d_p} \nabla \tilde{\mu}'_\pi = 0, \quad (1)$$

$$\Delta \tilde{\mu}'_\pi - \lambda_\mu^2 \tilde{\mu}'_\pi = K \lambda_\mu^2 \frac{\alpha_p}{\rho_0} \nabla \cdot \mathbf{u} + \frac{\chi_{Em}}{\chi_m} \nabla \cdot \mathbf{E}, \quad (2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{E} - \kappa_E \Delta \tilde{\mu}'_\pi = 0. \quad (3)$$

Тут $\lambda_\mu^2 = (d_p \chi_m)^{-1}$; $\kappa_E = \rho_0 \chi_{Em} / \varepsilon$; $\varepsilon = \varepsilon_0 + \rho_0 \chi_E$; ρ_0 — густина маси у вихідному стані; K — модуль об'ємного стиску за сталої питомої густини наведеної маси;

G — модуль зсуву; α_p — коефіцієнт об'ємного розширення, спричиненого локальним зміщенням маси; χ_E — діелектрична сприйнятливість; χ_m і χ_{Em} — коефіцієнти, які характеризують відповідно локальне зміщення маси та поляризованість тіла, зумовлені градієнтом потенціалу μ'_π ; d_p — ізохоричний коефіцієнт залежності потенціалу μ'_π від питомої густини наведеної маси; « \cdot » і « \times » — знаки скалярного та векторного множення; ∇ — оператор Гамільтона; Δ — оператор Лапласа. Знаючи переміщення \mathbf{u} , напруженість електричного поля \mathbf{E} та потенціал $\tilde{\mu}'_\pi$, на основі лінійних рівнянь стану моделі [8]

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = 2G\hat{\boldsymbol{e}} + \left[\left(K - \frac{2}{3}G - \frac{K^2\alpha_p^2}{\rho_0 d_p} \right) e - K \frac{\alpha_p}{d_p} \tilde{\mu}'_\pi \right] \hat{\mathbf{I}}, \quad (4)$$

$$\mathbf{p} = \chi_E \mathbf{E} - \chi_{Em} \nabla \tilde{\mu}'_\pi \quad (5)$$

визначаємо тензор напружень $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ та вектор поляризації \mathbf{p} . Тут $\hat{\mathbf{I}}$ — одиничний тензор, $\hat{\boldsymbol{e}}$ — тензор деформації, який пов'язаний із вектором переміщення \mathbf{u} співвідношенням Коші

$$\hat{\boldsymbol{e}} = \frac{1}{2} \left[\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T \right], \quad (6)$$

$e = \hat{\boldsymbol{e}} : \hat{\mathbf{I}}$, « \otimes » — знак тензорного добутку, а індекс «Т» означає операцію транспонування.

Крайові умови задачі запишемо так [8]:

$$u(\pm l) = 0, \quad \tilde{\mu}'_\pi(\pm l) = -\mu'_{\pi 0}, \quad \varphi_e(\pm l) = 0. \quad (7)$$

Тут напруженість електричного поля у тілі E визначаємо через електричний потенціал φ_e згідно формули: $E = -\partial\varphi_e/\partial x$.

2. Розв'язок задачі та його аналіз

З огляду на відсутність зовнішньої дії шукані функції залежать лише від просторової координати x , тобто $\mathbf{u} = (u(x), 0, 0)$, $\tilde{\mu}'_\pi = \tilde{\mu}'_\pi(x)$, $\mathbf{E} = (E(x), 0, 0)$. Відтак, розв'язок системи рівнянь (1)-(3), що задовольняє крайовим умовам (7), має вигляд:

$$u(x) = B_0 \frac{K\alpha_p}{\left(\bar{K} + \frac{4}{3}G\right)d_p\tilde{\lambda}} \left[\text{sh}(\tilde{\lambda}x) - \frac{x}{l} \text{sh}(\tilde{\lambda}l) \right], \quad (8)$$

$$\tilde{\mu}'_\pi(x) = B_0 \left[\text{ch}(\tilde{\lambda}x) + \mathfrak{M} \frac{\text{sh}(\tilde{\lambda}l)}{\tilde{\lambda}l} \right], \quad (9)$$

$$E(x) = \kappa_E B_0 \tilde{\lambda} \text{sh}(\tilde{\lambda}x). \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \text{Тут } B_0 &= -\frac{\mu'_{\pi 0}}{\operatorname{ch}(\tilde{\lambda}l) + \mathfrak{M} \operatorname{sh}(\tilde{\lambda}l)/(\tilde{\lambda}l)}, \quad \bar{K} = K - \frac{K^2 \alpha_p^2}{\rho_0 d_p}, \quad \mathfrak{M} = \frac{K^2 \alpha_p^2}{\rho_0 d_p} \left(\bar{K} + \frac{4}{3} G \right)^{-1}, \quad \tilde{\lambda} = \\ &= \lambda_{\mu E} \sqrt{1 + \mathfrak{M}}, \quad \lambda_{\mu E}^2 = \frac{\lambda_{\mu}^2}{1 - \kappa_E \chi_{Em} / \chi_m}. \end{aligned}$$

На основі формул (8) і (6) для єдиної відмінної від нуля компоненти e_{xx} тензора деформації маємо

$$e_{xx}(x) = B_0 \frac{K \alpha_p}{\tilde{K} d_p} \left[\operatorname{ch}(\tilde{\lambda}x) - \frac{\operatorname{sh}(\tilde{\lambda}l)}{\tilde{\lambda}l} \right]. \quad (11)$$

Відповідно, ґрунтуючись на співвідношеннях (4), (9) і (11), для ненульових компонент σ_{xx} , σ_{yy} і σ_{zz} тензора напружень одержуємо

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(\tilde{\lambda}l) &= \mu'_{\pi 0} \frac{K \alpha_p (1 + \mathfrak{M})}{d_p [\tilde{\lambda}l \operatorname{cth}(\tilde{\lambda}l) + \mathfrak{M}]} = \frac{\sigma^* K}{2G [\tilde{\lambda}l \operatorname{cth}(\tilde{\lambda}l) + \mathfrak{M}]}, \\ \sigma_{yy}(x) = \sigma_{zz}(x) &= \sigma^* \frac{\tilde{\lambda}l \operatorname{ch}(\tilde{\lambda}x) + (3K - 2G) \operatorname{sh}(\tilde{\lambda}l) / (6G)}{\tilde{\lambda}l \operatorname{ch}(\tilde{\lambda}l) + \mathfrak{M} \operatorname{sh}(\tilde{\lambda}l)}, \end{aligned}$$

де $\sigma^* = 2GK\alpha_p \mu'_{\pi 0} / d_p \left(\bar{K} + \frac{4}{3} G \right)$.

Розподіл тангенціальних напружень у шарах різної товщини показано на рис. 1 для таких значень параметрів: $K = 1,7412 \cdot 10^{10}$ Па, $G = 6,24 \cdot 10^9$ Па, $\mathfrak{M} = 0,5 \cdot 10^{-3}$ та $l_* = \tilde{\lambda}^{-1}$. Порівняно із шаром з вільними межами, у тілі із защемленими поверхнями напруження $\sigma_{yy}(x)$, $\sigma_{zz}(x)$ набувають дещо більших значень. Максимальними є поверхневі значення $\sigma_{yy}(\pm l) = \sigma_{zz}(\pm l)$ тангенціальних напружень. На величину поверхневих напружень у шарі зі защемленими межами впливає його товщина (див. штрих-пунктирну криву на рис. 2). У тонких шарах із защемленими межами поверхневі напруження можуть набувати значно більших значень, аніж у такому ж шарі з вільними поверхнями [8]. На відміну від ненавантаженого тіла, у шарі з защемленими межами окрім напружень σ_{yy} і σ_{zz} виникають сталі за величиною нормальні напруження $\sigma_{xx}(\tilde{\lambda}l)$. Ці напруження залежать від товщини тіла та є причиною виникнення у ньому розклинювального тиску. У межах пропонованого модельного опису такий тиск зумовлений зміною структури приповерхневих областей твердих тіл. Його визначаємо формулою

$$p_{роз} = \frac{1}{2l} \int_{-l}^l \sigma_{xx} dx.$$

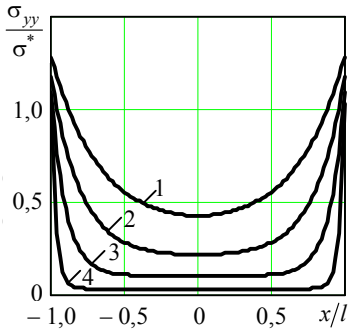


Рис. 1. Розподіл напружень σ_{yy}/σ^* у тілі з зашкеленими межами. Криві 1-4 відповідають $l = 3l_*, 5l_*, 10l_*, 30l_*$

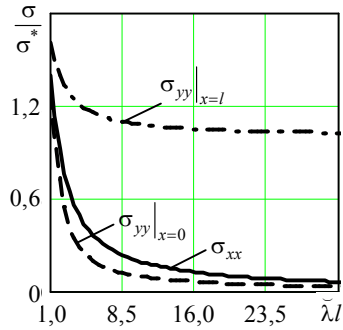


Рис. 2. Вплив товщини шару на напруження σ_{xx}/σ^* (суцільна лінія), $\sigma_{yy}(l)/\sigma^*$ (штрихпунктирна лінія) та $\sigma_{yy}(0)/\sigma^*$ (штрихована лінія)

Розклинювальний тиск — це надлишковий тиск, який виникає у тонких плівках, які характеризуються перекриттям областей приповерхневої неоднорідності та відсутністю об'ємної фази. У тонких плівках нормальні напруження σ_{xx} зі зменшенням товщини плівки доволі стрімко зростають і прямують до величини $p_{роз} \rightarrow \mu'_{\pi 0} K \alpha_p / d_p$, якщо $\tilde{\lambda} l \rightarrow 0$ (суцільна лінія на рис. 2). Зі збільшенням товщини розклинювальний тиск спадає. У масивних шарах напруження σ_{xx} нехтовно малі ($\sigma_{xx} \rightarrow 0$, якщо $\tilde{\lambda} l \rightarrow \infty$) і розклинювальний тиск у таких тілах відсутній.

З огляду на те, що величини K і d_p додатновизначені [8], то знак розклинювального тиску залежатиме від знаку коефіцієнта об'ємного розширення, спричиненого локальним зміщенням маси α_p . Оскільки хімічний потенціал μ за абсолютною величиною більший від абсолютного значення потенціалу μ_{π} , то $\mu'_{\pi 0}$ — величина від'ємна. Тому розклинювальний тиск буде додатним, якщо $\alpha_p < 0$ і навпаки. Зазначимо, що додатний розклинювальний тиск перешкоджає зменшенню товщини плівки під дією зовнішніх сил, тоді як від'ємний — призводить до зменшення товщини плівки та може стати причиною її руйнування (розриву).

Висновки. Співвідношення континуального типу теорії взаємозв'язаної електромагнітної механіки неферромагнітних діелектричних твердих тіл, яка у модельному описі поряд із деформуванням та електромагнітними процесами, приймає до розгляду також локальне зміщення маси, дозволяють обґрунтувати наявність розклинювального тиску у твердих плівках. Такий тиск виникає у тонких шарах, які характеризуються перекриттям областей приповерхневої неоднорідності полів і відсутністю об'ємної фази. Розклинювальний тиск слід враховувати у разі вивчення напруженого стану тонкоплівкових структур, оскільки він може вагомо впливати на параметри їх міцності та надійності.

Література

- [1] *Eringen A. C.* Theory of nonlocal piezoelectricity // *J. Math. Phys.* — 1984. — Vol. 25, No 3. — P. 717-727.
- [2] *Tagancev A. K.* Piezoelectricity and flexoelectricity in crystalline dielectrics // *Phys. Rev. B.* — 1986. — Vol. 34. — P. 5883-5889.
- [3] *Mindlin R. D.* Polarization gradient in elastic dielectrics // *Int. J. Solids and Struct.* — 1968. — Vol. 4. — P. 637-642.
- [4] *Yang J. S.* Effects of electric field gradient on an anti-plane crack in piezoelectric ceramics // *Int. J. Fract.* — 2004. — Vol. 127. — P. L111-L116.
- [5] *Бурак Я. Й.* Визначальні співвідношення локально-градієнтної термомеханіки // *Доп. АН УРСР. Сер. А.* — 1987. — № 12. — С. 19-23.
- [6] *Бурак Я. Й., Кондрат В. Ф., Грицина О. Р.* Приповерхневі механоелектромагнетні явища у термопружних поляризованих тілах за локального зміщення маси // *Фіз.-хім. механіка матеріалів.* — 2007. — № 4. — С. 5-17.
- [7] On electromechanical phenomena in thin dielectric films / *Ye. Chapla, S. Kondrat, O. Hrytsyna, V. Kondrat* // *Task Quarterly.* — 2009. — Vol. 13, No 1. — P. 1001-1010.
- [8] *Бурак Я., Кондрат В., Грицина О.* Основи локально-градієнтної теорії діелектриків. — Ужгород: Поліграфцентр «Ліра», 2011. — 208 с.
- [9] *Грицина О.* Поверхнева енергія деформівних твердих тіл // *Фіз.-мат. моделювання та інформ. технології.* — 2013. — Вип. 17. — С. 43-54.
- [10] *Дерягин Б. В., Чураев Н. В.* Смачивающие пленки. — Москва: Наука, 1984. — 160 с.

Elastic strained state and a disjoining pressure in thin layer of ideal dielectric

Olha Hrytsyna

The relationships of gradient type theory of electromagnetomechanics of the nonferromagnetic dielectric solids with local displacement of mass are used to study of the stress state of infinite layer of an ideal dielectric with clamped boundary. It is possible to describe the existence of the disjoining pressure in solid thin films due to accounting local displacement of mass in the mentioned theory. We obtained the analytical formula which couples the disjoining pressure and layer thickness.

Упруго деформированное состояние и расклиняющее давление в тонком слое идеального диэлектрика

Ольга Грицина

Исходя из соотношений градиентного типа модели электромагнитной механики неферромагнитных диэлектрических сред с локальным смещением массы, изучено напряженное состояние бесконечного слоя идеального диэлектрика с заземленными границами. Благодаря учету в модельном описании локального смещения массы удается описать наличие расклиняющего давления в деформируемых тонких пленках. Получено аналитическую формулу, связывающую величину расклиняющего давления с толщиной пленки.

Представлено професором В. Чекуріним

Отримано 14.11.13