

## Приповерхнева неоднорідність в електропровідному неферромагнітному півпросторі

Тарас Нагірний<sup>1</sup>, Юлія Сенік<sup>2</sup>

<sup>1</sup> д. ф.-м. н., професор, Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дудаєва, 15, Львів, 79005; Zielona Góra University, 4 Prof. Shafran St., Poland, 65-516, e-mail: t.nahirnyj@gmail.com

<sup>2</sup> Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дудаєва, 15, Львів, 79005, e-mail: yuliya.senik@gmail.com

*У рамках моделі локально неоднорідного електропровідного твердого тіла вивчено закономірності приповерхневої неоднорідності у півпросторі. Причиною неоднорідності фізико-механічних полів є врахування структури матеріалу, джерел маси, що відповідають способу формування реальної поверхні тіла та сил кулонівської взаємодії. Показано, що у вільному від силового навантаження тілі значення поверхневих напружень, заряду, термодинамічного електричного потенціалу однозначно визначаються фізичними параметрами матеріалу та тіла, а подвійний електричний шар є наслідком приповерхневої неоднорідності енергії зв'язку та сил кулонівської взаємодії.*

**Ключові слова:** локально градієнтний підхід у термомеханіці, структурна неоднорідність матеріалу, геометрична неоднорідність реальної поверхні тіла, поверхневі явища, електропровідний неферромагнітний півпростір.

**Вступ.** Підвищення параметрів міцності, надійності та довговічності елементів конструкцій та приладів, які працюють в складних умовах взаємодії з зовнішнім середовищем, тісно пов'язані зі створенням і дослідженням нових математичних моделей. Такі моделі повинні достатньо повно враховувати властивості та структуру матеріалу, а також природу процесів. Врахування структурної неоднорідності матеріалу та геометричної неоднорідності реальної поверхні тіла є особливо важливим у зв'язку з широким використанням в інженерній практиці нанoeлементів [1-4].

У цій роботі в рамках локально градієнтного підходу в термомеханіці [5-8] вивчено закономірності приповерхневої неоднорідності в електропровідному неферромагнітному півпросторі. Така неоднорідність є спричинена врахуванням у моделі структури матеріалу та геометричної неоднорідності реальної поверхні тіла.

### 1. Формулювання задачі

Розглянемо деформівний електропровідний неферромагнітний пружний півпростір, що займає область  $x \geq 0$  у евклідовій системі координат  $\{x, y, z\}$ . Вважаємо, що поверхня тіла  $x = 0$  вільна від силового навантаження і на ній задано постійні значення густини  $\rho_a$  та термодинамічного електричного потенціалу  $\phi_a$ .

За розглядуваної зовнішньої дії рівноважний стан півпростору залежить лише від координати  $x$  і описується системою рівнянь [9]

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma_{xx}}{dx} &= 0, \\ \frac{d^2\sigma_{yy}}{dx^2} &= \frac{d^2\sigma_{yy}}{dx^2} = a_0 \frac{d^2}{dx^2} (\rho - \rho_* + a_\omega^0 \phi), \\ \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{a_{\omega\omega}}{\varepsilon_0} \phi + \frac{a_{m\omega}}{\varepsilon_0} (\rho - \rho_*) &= 0, \\ \frac{d^2\rho}{dx^2} - \xi^2 (\rho - \rho_*) &= -\xi^2 d_{\sigma m},\end{aligned}\quad (1)$$

яку необхідно доповнити умовою електронейтральності тіла

$$\int_0^\infty \omega dx = 0, \quad (2)$$

а також умовою [9]

$$\int_0^\infty (\rho - \rho_*) dx = \int_0^\infty d_{\sigma m} dx, \quad (3)$$

що узгоджує відліковий та актуальний стан тіла. Тут  $\sigma_{\alpha\alpha}$  — компоненти тензора напружень  $\alpha = \{x, y, z\}$ ,  $\rho, \rho_*$  — густина в актуальному та відліковому станах,  $\phi$  — термодинамічний електричний потенціал,  $\omega$  — електричний заряд,  $d_{\sigma m}$  — інтенсивність джерел маси,  $\xi^{-1}$  — характерний розмір структурної неоднорідності матеріалу,  $a_0, a_\omega^0, a_{m\omega}, \varepsilon_0$  — сталі.

До даної системи рівнянь необхідно приєднати граничні умови й умови обмеженості розв'язку на безмежності в області тіла. Прийmemo їх у вигляді

$$\sigma_{xx}|_{x=0} = 0, \quad \rho|_{x=0} = \rho_a, \quad \phi|_{x=0} = \phi_a, \quad (4)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \sigma_{\alpha\alpha} = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \rho = \rho_*, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \phi = 0. \quad (5)$$

Обґрунтування другої граничної умови (4) та прив'язка її до геометричної неоднорідності реальної поверхні тіла подано у роботах [6, 10].

Далі для інтенсивності джерел маси прийmemo

$$d_{\sigma m} = C e^{-\zeta x}, \quad (6)$$

у якому параметр  $\zeta$  може бути пов'язаний із геометричною неоднорідністю реальної поверхні тіла.

## 2. Дослідження рівноважного стану півпростору

Розв'язком задачі (1)-(6) є

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_* + (\rho_a - \rho_*) \left( \frac{\zeta}{\zeta - \xi} e^{-\xi x} - \frac{\xi}{\zeta - \xi} e^{-\zeta x} \right), \\ \varphi &= \varphi_a \left\{ e^{-\chi x} + \frac{1}{K} \frac{\zeta}{\xi - \zeta} \left[ \frac{\xi}{\zeta} \frac{1}{\zeta^2 - \chi^2} (e^{-\chi x} - e^{-\zeta x}) - \frac{1}{\xi^2 - \chi^2} (e^{-\chi x} - e^{-\xi x}) \right] \right\}, \\ \sigma_{yy} &= \sigma_0 \left\{ \frac{\zeta}{\zeta - \xi} e^{-\xi x} - \frac{\xi}{\zeta - \xi} e^{-\zeta x} - a_0^{\omega} b \left[ K e^{-\chi x} - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\zeta}{\xi - \zeta} \left( \frac{1}{\xi^2 - \chi^2} (e^{-\chi x} - e^{-\xi x}) - \frac{\xi}{\zeta} \frac{1}{\zeta^2 - \chi^2} (e^{-\chi x} - e^{-\zeta x}) \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Тут

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{\chi} \left[ \frac{\xi + \zeta}{\xi \zeta} + \frac{\chi}{\xi - \zeta} \left( \frac{\zeta}{\xi} \frac{1}{\xi + \chi} - \frac{\xi}{\zeta} \frac{1}{\zeta + \chi} \right) \right], \quad \sigma_0 = a_0 (\rho_* - \rho_a), \\ \chi^2 &= \frac{a_{\omega\omega}}{\varepsilon_0}, \quad b = \chi^2 a, \quad a = \frac{a_{m\omega}}{a_{\omega\omega}}. \end{aligned}$$

Зазначимо, що  $\xi^{-1}, \zeta^{-1}, \chi^{-1}$  є характерні розміри структурної неоднорідності матеріалу, приповерхневої неоднорідності густини та кулонівської взаємодії.

У розв'язку (7) враховано, що значення термодинамічного електричного потенціалу, яке встановлюється на поверхні півпростору однозначно визначається поверхневим значенням густини та характеристиками матеріалу. Для нього справедлива формула

$$\chi \varphi_a + (\rho_a - \rho_*) b \left[ \frac{\zeta + \xi}{\zeta \xi} + \frac{\chi}{\xi - \zeta} \left( \frac{\zeta}{\xi} \frac{1}{\xi + \chi} - \frac{\xi}{\zeta} \frac{1}{\zeta + \chi} \right) \right] = 0, \quad (8)$$

що є наслідком умови електронейтральності тіла.

Зазначимо також, що для інтенсивності джерел маси справджується

$$d_{\sigma m} = (\rho_a - \rho_*) \frac{\xi + \zeta}{\xi} e^{-\zeta x}. \quad (9)$$

Аналіз розв'язку (7) показує, що у вільному від зовнішнього силового навантаження півпросторі існує ненульовий напружено-деформований стан. Він спричинений врахуванням у рамках моделі структурної неоднорідності матеріалу, сил кулонівської взаємодії, а також відмінністю поверхневого значення густини від густини тіла віднесення. Характерними розмірами приповерхневої неоднорідності є  $\xi^{-1}, \zeta^{-1}, \chi^{-1}$  т. т. характерні розміри структурної неоднорідності матеріалу, приповерхневої неоднорідності густини та кулонівської взаємодії.

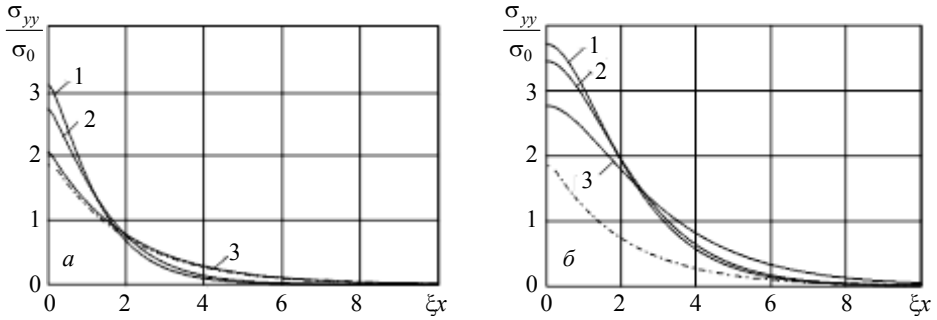


Рис. 1. Розподіл напружень у глибину півпростору

Значення ненульових напружень на поверхні тіла однозначно визначаються фізичними характеристиками матеріалу й описуються формулою

$$\sigma_{yy}(0) = \sigma_0 (1 - a_0^{\omega} b K).$$

При  $a_0^{\omega} b / a_0 < 0$  вони зменшуються, зі збільшенням параметрів  $\chi, \xi, \zeta$ , до відповідних усталених значень. Напруження на поверхні півпростору є розтягуючими, а при відході від поверхні у глибину тіла напруження монотонно зменшуються, прямуючи до нуля. Це й ілюструють графіки на рис. 1а, б, на яких показано розподіл напружень  $\sigma_{yy}/\sigma_0$  при  $\chi/\xi = 0,5; 1,2; 2$  (криві 1-3),  $\zeta/\xi = 20; 0,8$  (відповідно рис.1 а, б),  $a_0^{\omega} b = -3$ . Для порівняння штриховою лінією показано розподіл напружень, якщо не враховувати джерел маси.

Бачимо, що врахування джерел маси призводить до суттєвої якісної та кількісної відмінностей у розподілі напружень у приповерхневих областях тіла.

На рис. 2 показано розподіл термодинамічного електричного потенціалу  $\phi/\phi_a$  при  $\chi/\xi = 0,5; 1,2; 2$  (криві 1-3), для  $\zeta/\xi = 20; 0,8$  (криві 1-2) відповідно рис. 2 а, б. Як і раніше штрихова лінія відповідає розподілу потенціалу, якщо не враховувати джерел маси

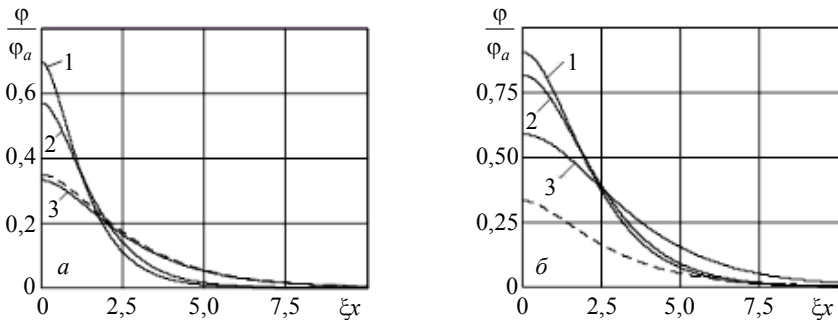


Рис. 2. Розподіл термодинамічного електричного потенціалу у глибину півпростору

Розподіл електричного заряду описується таким співвідношенням

$$\omega = a_{\omega\omega}\Phi_a \left\{ e^{-\chi x} + \frac{\chi^2}{K} \left[ \frac{\zeta}{(\xi - \zeta)(\xi^2 - \chi^2)} (e^{-\chi x} - e^{-\xi x}) + \frac{\xi}{(\xi - \zeta)(\zeta^2 - \chi^2)} (e^{-\zeta x} - e^{-\chi x}) \right] + a \left( \frac{\zeta}{\zeta - \xi} e^{-\xi x} - \frac{\xi}{\zeta - \xi} e^{-\zeta x} \right) \right\}.$$

У приповерхневій області тіла заряд утворює подвійний електричний шар, який є наслідком неоднорідності енергії зв'язку та врахування сил кулонівської взаємодії.

**Висновки.** У рамках моделі локально неоднорідного електропровідного неферомагнітного пружного тіла вивчено закономірності приповерхневої неоднорідності у півпросторі. Ненульовий напружено-деформований стан є зумовлений врахуванням у рамках моделі структурної неоднорідності матеріалу, джерел маси, а також сил кулонівської взаємодії.

Значення термодинамічного електричного потенціалу, що встановлюється на поверхні тіла однозначно визначається характеристиками матеріалу, у тому числі характерними розмірами структурної неоднорідності матеріалу, геометричної неоднорідності реальної поверхні тіла та сил кулонівської взаємодії.

Подвійний електричний шар однозначно визначається приповерхневими неоднорідностями густини та термодинамічного електричного потенціалу.

## Література

- [1] *Ненійко С. А.* Физические свойства малых металлических частиц. — Киев: Наук. думка, 1985. — 246 с.
- [2] *Cleland A. N.* Foundations of Nanomechanics from Solid-State Theory to Device Applications. — Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2003. — 436 p.
- [3] *Shaofan Li, Xin-Lin Gao.* Handbook of Micromechanics and Nanomechanics. — CRC Press, 2013. — 1256 p.
- [4] *Gubicza J.* Defect structure in nanomaterials. — Cambridge: Woodhead Publishing, 2012. — 358 p.
- [5] *Бурак Я. И., Нагирный Т. С.* Математическое моделирование локально-градиентных процессов в инерционных термомеханических системах // Прикл. механика. — 1992. — Т. 28, № 12. — С. 3-23.
- [6] *Нагирный Т. С., Червінка К. А.* Основи механіки локально неоднорідних пружних тіл. Основи наномеханіки II. — Львів: Растр-7, 2014. — 167 с.
- [7] *Burak J., Nahirnyj T., Tchervinka K.* Local gradient thermomechanics // Encyclopedia of thermal stresses / ed. R. B. Hetnarski. — Dordrecht: Springer Science+Business Media, 2014. — P. 2794-2801.
- [8] *Nahirnyj T., Tchervinka K.* Mathematical modeling of structural and near-surface non-homogeneities in thermoelastic thin films // International Journal of Engineering Science. — 2015. — Vol. 91. — С. 49-62.

- [9] Nahirnyj T. S., Senyk Y. A., Tchervinka K. A. Modeling local non-homogeneity in electroconductive non-ferromagnetic thermoelastic solid // *Mathematical Modeling and Computing*. — 2014. — Vol. 1, No 2. — С. 214-223.
- [10] Нагірний Т. С., Червінка К. А., Бойко З. В. До вибору крайових умов у задачах локально градієнтного підходу в термомеханіці // *Математичні методи та фізико-механічні поля*. — 2011. — Т. 54, № 3. — С. 199-206.

## Nearsurface heterogeneity in a nonferromagnetic electro-conductive half-space

Taras Nahirnyj, Yuliya Senyk

*In the frame of the local nonhomogeneous electroconductive solid model the regularities of near surface heterogeneity in half-space are studied. The heterogeneity of physical and mechanical fields is caused by the material structure, the mass sources, associated with method of real body surface forming, and the forces of Coulomb interaction. It is shown that in a free of force load body the values of surface stress, charge, thermodynamic electric potential are defined by physical parameters of the material and the body. Electric double layer is the result of near-surface binding energy heterogeneity and the forces of Coulomb interaction.*

## Приповерхностная неоднородность в электропроводном неферомагнитном полупространстве

Тарас Нагірний, Юлія Сенік

*В рамках модели локально неоднородного электропроводного твердого тела изучены закономерности приповерхностной неоднородности в полупространстве. Причиной неоднородности физико-механических полей является учет структуры материала, источников массы, соответствующих способу формирования реальной поверхности тела и сил кулоновского взаимодействия. Показано, что в свободном от силовой нагрузки теле значение поверхностных напряжений, заряда, термодинамического электрического потенциала однозначно определяются физическими параметрами материала и тела, а двойной электрический слой является следствием приповерхностной неоднородности энергии связи и сил кулоновского взаимодействия.*

Отримано 27.07.15