

Рівноважний стан електропровідної неферромагнітної тонкої плівки

Тарас Нагірний¹, Юлія Сенік²

¹ 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

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

У роботі представлено результати дослідження за локально градієнтного підходу у термомеханіці рівноважного стану електропровідного ферромагнітного шару. Показано, що у тілі вільному від зовнішнього силового навантаження існує ненульовий рівноважний стан. Характерні розміри приповерхневої неоднорідності пов'язані зі структурною неоднорідністю матеріалу, геометричною неоднорідністю реальної поверхні тіла та силами кулонівської взаємодії. Вказано, що поверхневим напруженням властивий розмірний ефект, а значення термодинамічного електричного потенціалу, що встановлюється на поверхні тіла однозначно визначається його фізичними та геометричними характеристиками.

Ключові слова: локально градієнтний підхід у термомеханіці, структурна неоднорідність матеріалу, геометрична неоднорідність реальної поверхні тіла, електропровідний ферромагнітний шар, розмірний ефект поверхневих напружень, приповерхнева неоднорідність, електропровідний шар.

Вступ. Підвищення параметрів міцності, надійності та довговічності елементів конструкцій та приладів, які працюють в складних умовах взаємодії зі зовнішнім середовищем, тісно пов'язані зі створенням та 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 наноелементів [1-4].

У даній роботі в рамках локально градієнтного підходу в термомеханіці [5-8] вивчено закономірності приповерхневої неоднорідності в електропровідному ферромагнітному шарі. Така неоднорідність є спричинена врахуванням в моделі структури матеріалу, геометричної неоднорідності реальної поверхні тіла та силами кулонівської взаємодії.

1. Формулювання задачі

Розглядаємо деформівний електропровідний ферромагнітний ізотропний твердий шар, що займає область $-l \leq x \leq l$ у прямокутній декартовій системі

координат $\{x, y, z\}$. Вважаємо, що шар вільний від зовнішнього силового навантаження і на його поверхнях $x=l$, $x=-l$ задано постійні значення термодинамічного електричного потенціалу ϕ_a та густини ρ_a , що відрізняється від відлікового значення ρ_* .

За розглядуваної зовнішньої дії рівноважний стан шару залежить лише від координати x і описується такою ключовою системою рівнянь для компонент тензора напружень $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$, густини ρ та термодинамічного електричного потенціалу ϕ [5]

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

Дану систему рівнянь необхідно доповнити умовою електронейтральності тіла

$$\int_{-l}^l \omega(x) dx = 0, \quad (2)$$

а також умовою [6]

$$\int_{-l}^l (\rho - \rho_*) dx = \int_{-l}^l d_{mm} dx, \quad (3)$$

що узгоджує відліковий та актуальний стани. Тут ω – електричний заряд, d_{sm} – інтенсивність джерел маси, $a_0, a_\omega^0, a_{\omega\omega}, a_{m\omega}, \varepsilon_0, \xi$ – сталі.

До даної системи рівнянь приєднуємо умови

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

на поверхнях $x=l$, $x=-l$ шару та умови рівності нулю головного вектора та головного моменту зусиль у довільних поперечних перерізах $y = const$, $z = const$

$$\int_{-l}^l \sigma_{yy} dx = 0, \quad \int_{-l}^l \sigma_{zz} dx = 0, \quad \int_{-l}^l x\sigma_{yy} dx = 0, \quad \int_{-l}^l x\sigma_{zz} dx = 0. \quad (5)$$

Далі для інтенсивності джерел маси приймемо подання

$$d_{\sigma m} = C \frac{\text{ch}(\zeta x)}{\text{ch}(\zeta l)}. \quad (6)$$

Такий розподіл $d_{\sigma m}$ узгоджується з розподілом густини у шарі, якщо не враховувати джерел, а параметр ζ може бути пов'язаний з геометричною неоднорідністю реальної поверхні тіла [6]. Дана формула вказує також на ідентичність поверхонь $x = l$, $x = -l$ шару тобто на однакові умови їх формування.

2. Дослідження розв'язку

Розв'язком задачі (1) - (6) є:

$$\begin{aligned} \rho(x) &= \rho_* + \frac{\rho_a - \rho_*}{1 - D} \left(\frac{\text{ch}(\xi x)}{\text{ch}(\xi l)} - D \frac{\text{ch}(\zeta x)}{\text{ch}(\zeta l)} \right), \\ \phi(x) &= \phi_a \left\{ \frac{\text{ch}(\chi x)}{\text{ch}(\chi l)} - \frac{1}{M} \left[\frac{1}{\xi^2 - \chi^2} \left(\frac{\text{ch}(\chi x)}{\text{ch}(\chi l)} - \frac{\text{ch}(\xi x)}{\text{ch}(\xi l)} \right) - \frac{D}{\zeta^2 - \chi^2} \left(\frac{\text{ch}(\chi x)}{\text{ch}(\chi l)} - \frac{\text{ch}(\zeta x)}{\text{ch}(\zeta l)} \right) \right] \right\}, \\ \sigma_{zz}(x) = \sigma_{yy}(x) &= a_0 \frac{(\rho_a - \rho_*)}{1 - D} \left\{ \frac{\text{ch}(\xi x)}{\text{ch}(\xi l)} - D \frac{\text{ch}(\zeta x)}{\text{ch}(\zeta l)} - \left(1 - \frac{a_0^{\text{об}} b}{\chi^2} \right) \left(\frac{\text{th}(\xi l)}{\xi l} - D \frac{\text{th}(\zeta l)}{\zeta l} \right) - \right. \\ &\quad \left. - a_0^{\text{об}} b \left[M \frac{\text{ch}(\chi x)}{\text{ch}(\chi l)} - \frac{1}{\xi^2 - \chi^2} \left(\frac{\text{ch}(\chi x)}{\text{ch}(\chi l)} - \frac{\text{ch}(\xi x)}{\text{ch}(\xi l)} \right) + \frac{D}{\zeta^2 - \chi^2} \left(\frac{\text{ch}(\chi x)}{\text{ch}(\chi l)} - \frac{\text{ch}(\zeta x)}{\text{ch}(\zeta l)} \right) \right] \right\}, \\ \sigma_{xx}(x) &= 0, \end{aligned} \quad (7)$$

де

$$\begin{aligned} \chi^2 &= \frac{a_{\text{об}} \omega}{\varepsilon_0}, \quad b = \chi^2 \frac{a_{m\text{об}}}{a_{\text{об}}}, \quad D = \frac{\xi \text{th}(\xi l)}{\zeta \text{th}(\zeta l)}, \\ M &= \frac{1}{\xi^2 - \chi^2} \left(1 - \frac{\xi \text{th}(\xi l)}{\chi \text{th}(\chi l)} \right) - \frac{D}{\zeta^2 - \chi^2} \left(1 - \frac{\zeta \text{th}(\zeta l)}{\chi \text{th}(\chi l)} \right). \end{aligned}$$

Значення термодинамічного електричного потенціалу, що встановлюється на поверхнях шару однозначно визначається значенням густини на цих поверхнях, а також фізичними характеристиками матеріалу і геометричними характеристиками тіла. Для нього отримано формула

$$\begin{aligned} \phi_a &= a\chi^2 \frac{(\rho_a - \rho_*)}{1 - D} \left\{ \frac{1}{\xi^2 - \chi^2} \left(1 - \frac{\chi \text{th}(\xi l)}{\xi \text{th}(\chi l)} \right) - \frac{D}{\zeta^2 - \chi^2} \left(1 - \frac{\chi \text{th}(\zeta l)}{\zeta \text{th}(\chi l)} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{1 \text{th}(\xi l)}{\chi \xi \text{th}(\chi l)} - \frac{D \text{th}(\zeta l)}{\chi \zeta \text{th}(\chi l)} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (8)$$

де $a = a_{m\text{об}}/a_{\text{об}}$.

Значення ϕ_a залежить від товщини шару. Тому, йому властивий розмірний ефект. Це, зокрема, означає що величина потенціалу ϕ_a , який встановлюється на поверхні тонкої плівки відрізняється від відповідного його значення у товстому шарі. Оскільки $\text{th}(2) \approx 0.96$ для шарів товщини яких справджують нерівності $\xi l > 2$, $\zeta l > 2$ формула (8) суттєво спрощується. Співвідношення (8) враховано у другій та третій формулах розв'язку (7).

Для інтенсивності джерел маси справджується формула

$$d_{sm} = (\rho_a - \rho_*) \left(\frac{\zeta^2}{\xi^2} - 1 \right) \frac{D \operatorname{ch}(\zeta x)}{1 - D \operatorname{ch}(\zeta l)}. \quad (9)$$

У шарі вільному від зовнішнього силового навантаження існує ненульовий напружено-деформований стан. Характерними розмірами неоднорідності є величини $\xi^{-1}, \zeta^{-1}, \chi^{-1}$ пов'язані відповідно зі структурною неоднорідністю матеріалу, геометричною неоднорідністю реальної поверхні тіла та силами кулонівської взаємодії. У товстих шарах, як у тонких плівках товщини яких співвимірні з характерними розмірами нерівності $\xi l \gg 1$, $\zeta l \gg 1$, $\chi l \gg 1$, неоднорідність властива вузьким приповерхневим областям шару. У тонких плівках, товщина яких співвимірні з характерними розмірами $\xi^{-1}, \zeta^{-1}, \chi^{-1}$ неоднорідність у розподілі полів властива усій області шару.

На рис.1 а,б показано розподіл напружень σ_{yy}/σ_0 по товщині шару при $\zeta/\xi = 0.5; 2$ (рис. а, б), $\chi/\xi = 15$, $\zeta l = 2, 6, 20$ (відповідно криві 1-3), $a_0^0 b = -3$, $\sigma_0 = a_0(\rho_* - \rho_a)$. Для порівняння штриховою лінією показано розподіл напружень, якщо не враховувати джерел маси.

При відході від поверхонь шару $x = \pm l$ значення напружень $\sigma_{yy} = \sigma_{zz}$ монотонно зменшуються, досягаючи найменшого значення на серединній поверхні шару $x = 0$. Напруження σ_{yy} на зовнішніх поверхнях шару є розтягальні тоді як

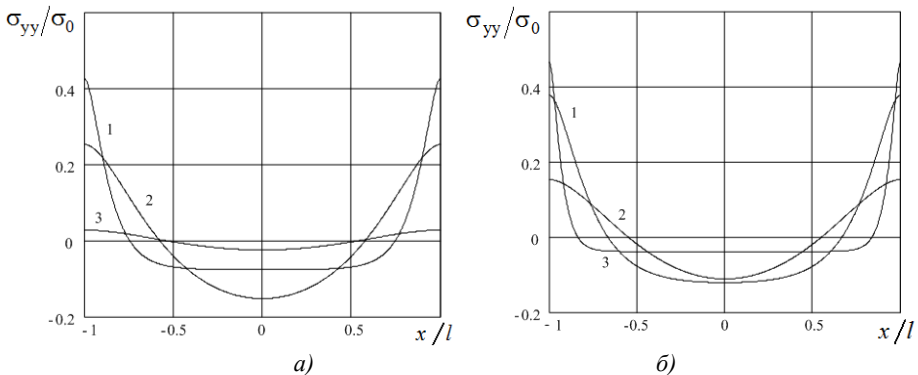


Рис. 1. Розподіл напружень у шарі

на серединній поверхні — стискаюльні. Величина напружень $\sigma_{yy}(\pm l) = \sigma_{zz}(\pm l)$ залежить від товщини шару, тобто їм властивий розмірний ефект. Зі збільшенням товщини шару напруження $\sigma_{yy}(\pm l) = \sigma_{zz}(\pm l)$ збільшуються, прямуючи до свого усталеного значення, що дорівнює значенню поверхневих напружень у півпросторі. Це й ілюструють графіки на рис. 2, на якому показано залежність $\sigma_{yy}(\pm l)/\sigma_0$ від товщини шару (параметра ξl) при $\chi/\xi = 60$ $\zeta/\xi = 0.5; 2; 8$, (відповідно криві 1-3)

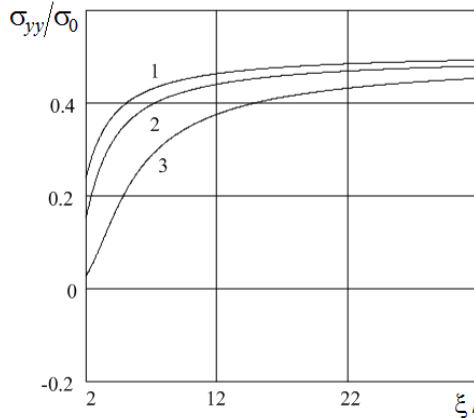


Рис.2. Розмірний ефект поверхневих напружень

На рис. 3 показано розподіл електричного заряду ϕ/ϕ_a по товщині шару для $\chi/\xi = 15$, $\xi l = 2, 6, 20$, $\zeta/\xi = 0, 5; 2; 8$ (відповідно криві 1-3). Для вибраних параметрів значення ϕ_a практично не залежить від товщини шару і є сталою величиною.

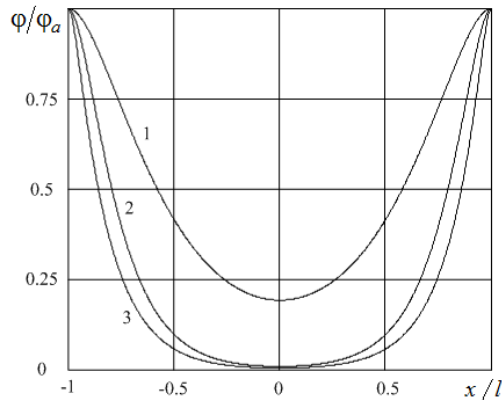


Рис.3. Розподіл термодинамічного електричного потенціалу.

Висновки: Розподілу полів у електропровідному неферромагнітному твердому шарі властиві три характерні розміри (за умови ідентичності його поверхонь), які пов'язані зі структурною неоднорідністю матеріалу, геометричною неоднорідністю реальної поверхні тіла та силами кулонівської взаємодії.

У тілі вільному від зовнішнього силового навантаження існує ненульовий напружено деформований стан, який необхідно враховувати при розрахунку експлуатаційних характеристик тіла.

Значення термодинамічного електричного потенціалу, що встановлюється на поверхні тіла однозначно визначається його фізичними та геометричними характеристиками.

Література

- [1] *Нетійко 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. Springer-Verlag Berlin Heidelberg 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. — Woodhead Publishing, Cambridge, 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.* Основы механики локально неоднородных пружных тел. Основы наномеханики 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.

Steady state of electroconductive nonferromagnetic thin film

Taras Nahirnyj, Yuliya Senyk

The results of investigation of the electroconductive non-ferromagnetic layer steady state are presented for local gradient approach in thermomechanics. It is shown that in the load-free body there exists a non-zero steady stressed state. The characteristics sizes of nearsurface non-homogeneity are associated with structural heterogeneity of the material, geometrical non-uniformity of the body real surface and Coulomb's interaction forces. It is indicated that a size effect is inherent to surface stresses and that the value of the thermodynamical electric potential that is established at the body surface is determined by its physical and geometrical properties.

Равновесное состояние электропроводной неферромагнитной тонкой пленки

Тарас Нагирный, Юлия Сенник

В работе представлены результаты исследования при локально градиентном подходе в термомеханике равновесного состояния электропроводного неферромагнитных слоя. Показано, что в теле, свободном от внешней силовой нагрузки существует ненулевое равновесное состояние. Характерные размеры приповерхностной неоднородности связаны со структурной неоднородностью материала, геометрической неоднородностью реальной поверхности тела и силами кулоновского взаимодействия. Показано, что поверхностным напряжениям присущий размерный эффект, а значение термодинамического электрического потенциала, возникающее на поверхности тела однозначно определяется его физическими и геометрическими характеристиками.

Отримано 30.09.16