

УДК 539.3

МОДЕЛЬ ТЕРМОУПРУГОГО СОСТОЯНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

© 2011 г.

В.С. Шоркин, Л.Ю. Фроленкова

Орловский государственный университет – учебно-научно-производственный комплекс

VShorkin@yandex.ru

Поступила в редакцию 15.06.2011

Предложена модель термоупругого состояния поверхностного слоя сплошного материала, позволяющая вычислять величину поверхностной энергии, энергии адгезии и сил когезии (предела прочности) твердых деформируемых материалов через известные классические характеристики их термодинамического состояния.

Ключевые слова: термоупругое состояние, поверхностный слой, поверхностная энергия, энергия адгезии, силы когезии.

Введение

В поверхностных слоях твердых тел, их частей происходят термодинамические процессы, результатом которых является формирование поверхностной энергии – при образовании свободной поверхности, энергии адгезии – при адгезионном контакте двух тел, сил когезии, удерживающих одну часть тела в единстве с другой. В настоящем исследовании, которое является развитием [1–4], предложен вариант модели термоупругого состояния материала, позволяющий описать названные процессы.

Модель термоупругой среды

Рассматриваемые тела B моделируются сплошными изотропными однородными упругими средами. Их свободная энергия равна сумме кинетической энергии фононного и электронного (для металлов) идеальных газов и потенциальной энергии нелокального притяжения ее элементарных частиц:

$$F = (F_p + F_k^f) + F_k^e,$$

$$F_p = \frac{1}{2!} \int_V dV_1 \int_V \Phi^{(2)}(\mathbf{L}_{12}, \mathbf{L}_{21}) dV_2 +$$

$$+ \frac{1}{3!} \int_V dV_1 \int_V dV_2 \int_V \Phi^{(3)}(\mathbf{L}_{12}, \mathbf{L}_{23}, \mathbf{L}_{31}) dV_3 + \dots,$$

$$F_k^f = \int_V \left[\frac{27\rho kT}{v_D^3} \int_0^{v_D} v^2 \ln(1 - e^{-hv/(kT)}) dv \right] dV,$$

$$F_k^e = \int_V \left[\frac{3\rho\mu_0}{5m} \left[1 - \frac{5}{12} \left(\frac{\pi kT}{\mu_0} \right)^2 \right] \right] dV,$$

где t – время; $\mathbf{L}_{jk} = \mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j = \mathbf{I}_{jk} + \Delta\mathbf{u}_{jk}(\mathbf{r}_j, \mathbf{I}_{jk})$, $\mathbf{I}_{jk} = \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j$ – радиус-векторы центра масс частицы $dB_k \subset B$ относительно центра масс частицы $dB_j \subset B$ в текущем и отсчетном состояниях тела B соответственно; $\Delta\mathbf{u}_{jk}(\mathbf{r}_j, \mathbf{I}_{jk}, t) = \mathbf{u}_k(\mathbf{r}_k, t) - \mathbf{u}_j(\mathbf{r}_j, t)$ – смещение частицы $dB_k \subset B$ относительно частицы $dB_j \subset B$ в процессе деформации тела B ; $\mathbf{u}_j(\mathbf{r}_j, t)$, $\mathbf{u}_k(\mathbf{r}_k, t)$ – перемещения этих частиц из положений \mathbf{r}_j , \mathbf{r}_k (в отсчетном состоянии) в положения $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_j(\mathbf{r}_j, t)$, $\mathbf{R}_k = \mathbf{R}_k(\mathbf{r}_k, t)$ (в текущем состоянии); V – объем области, занятой телом B в текущем состоянии; dV_1, dV_2, \dots – объемы частиц dB_1, dB_2, \dots соответственно; $T = T(\mathbf{r}, t)$ – абсолютная температура; $k, h, \mu_0, v, v_D, \rho, m$ – соответственно постоянная Больцмана, постоянная Планка, энергия Ферми, возможные значения частот колебаний частиц (атомов, ионов), частота обрезания непрерывного спектра возможных частот, плотность материала, масса атомов; $\Phi^{(2)}(\mathbf{L}_{12}, \mathbf{L}_{21}) dV_1 dV_2$, $\Phi^{(3)}(\mathbf{L}_{12}, \mathbf{L}_{23}, \mathbf{L}_{31}) dV_1 dV_2 dV_3, \dots$ – потенциалы парного, тройного и т. д. взаимодействий частиц тела B , коэффициенты (далее потенциалы) $\Phi^{(2)}(\mathbf{L}_{12}, \mathbf{L}_{21}) = \Phi^{(2)}(L_{12}, L_{21}, D^{(2)}, \beta)$, $\Phi^{(3)}(L_{12}, L_{23}, L_{31}, D^{(3)}, \beta)$ для изотропной среды считаются известными функциями расстояний $L_{jk} = L_{kj} = |\mathbf{L}_{jk}|$ между взаимодействующими частицами тела B и параметров $D^{(2)}, D^{(3)}, \beta$, характеризующих энергию соответствующего взаимодействия (параметры $D^{(2)}, D^{(3)}$) и скорость падения величины потенциала (параметр β).

Допускается, что относительные смещения $\Delta \mathbf{u}_{jk}$ разложимы в ряды по внешним степеням вектора \mathbf{I}_{jk} с коэффициентами, пропорциональными градиентам перемещения частицы $d\mathbf{B} \equiv d\mathbf{B}_1$ возрастающих порядков. Допускается также, что относительные смещения частиц среды и изменения ее температуры – малые величины, причем настолько, что изменение объемной плотности свободной энергии можно характеризовать полиномом второй степени относительно характеристик изменения термодинамического состояния: изменения температуры и элементов последовательности градиентов перемещений. Результатом является выражение коэффициентов этого полинома, которые в известных вариантах градиентных сред предлагается определять опытным путем через параметры $D^{(2)}, D^{(3)}, \beta$.

С учетом того, что одной из пар коэффициентов определяющего изменение свободной энергии полинома являются модуль Юнга E и модуль сдвига G , и возможности описания с помощью предложенной модели нелинейности дисперсионного закона для больших частот малых механических колебаний построены условия определения параметров $D^{(2)}, D^{(3)}, \beta$, выражающие их через E, G и среднее межатомное расстояние. Вместо использования описания дисперсионного закона можно использовать информацию о плазменной частоте – для металлов, и о диэлектрической проницаемости – для диэлектриков.

Модель является вариантом модели градиентной линейно упругой среды произвольного порядка с внутренним давлением, дополненной уравнениями состояния электронного и фононного газов, а также моделью нелокального потенциального парного, тройного и т.д. взаимодействия ее частиц.

Для полубесконечного тела, ограниченного плоскостью A , поверхностная энергия определена равенством:

$$W_p = \lim_{A \rightarrow \infty} \frac{F^{(k)} - F^{(0)}}{A}, \quad k = 1, 2,$$

где $F^{(0)}$ – свободная энергия до образования его свободной граничной поверхности A ; $F^{(1)}$ – свободная энергия того же тела B , вычисленная сразу же после мгновенного изотермического образования его свободной граничной поверхности A (в момент времени $t = 0 + 0$), когда деформации ионного остова и изменения плотности распределения электронов проводимости еще не произошло; $F^{(2)}$ – свободная энергия того же тела B

при $t \rightarrow +\infty$, когда оно перешло в конечное состояние, в котором развитие деформаций и перераспределение электронной плотности завершено. В силу адиабатичности процесса перехода из первого состояния (сразу после выделения) во второе (конечное) $F^{(1)} = F^{(2)}$.

Энергия адгезии определена формулой:

$$F_a = W_{p(1,2)} - (W_{p(1)} + W_{p(2)}).$$

Вычитаемое в правой части этого равенства – сумма поверхностных энергий свободных от контакта тел $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$; уменьшаемое – поверхностная энергия слипшейся системы. Для вычисления силы когезии использовано выражение

$$\sigma = -\lim_{A \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \left\{ \int_V dV \int_V \left[\nabla_1 \Phi^{(2)} + \int_V (\nabla_1 \Phi^{(3)} + \nabla_2 \Phi^{(3)}) dV_2 \right] \right\} dV_1.$$

Пример расчета

По предложенным формулам были произведены расчеты и сравнение результатов с известными. Например, для Cu расчетные значения: $W_p = 4.46 \text{ Дж/м}^2$, в то время как известное справочное значение [5] 4.72 Дж/м^2 ; $\sigma^* = |\delta| = 4.47 \cdot 10^{10} \text{ Па}$, в то время как, согласно [6], теоретический предел прочности Cu примерно равен $E/5 = 5.60 \cdot 10^{10} \text{ Па}$. Для пары Cu-Al расчетное значение энергии адгезии $F_a = 2.62 \text{ Дж/м}^2$, расчетное методами теоретической физики [7]: $F_a = 2.75 \text{ Дж/м}^2$.

Список литературы

1. Шоркин В.С. // Упругость и неупругость. М.: Ленанд, 2006. С. 271–282.
2. Витковский, И.В., Конев А.Н., Шоркин В.С. // ЖТФ. 2009. Т. 79. Вып. 2. С. 11–16.
3. Азаров А.С., Шоркин В.С. // Изв. ТулГУ. Сер. Естественные науки. Тула: Изд-во ТулГУ, 2009. Вып. 1. С. 28–40.
4. Фроленкова Л.Ю., Шоркин В.С. // Фундаментальные и прикладные проблемы техники и технологии. 2010. №2. С. 25–33.
5. Свойства элементов. Физические свойства: Справочник / Под ред. Е.Б. Самсонова. М.: Металлургия, 1976. 600 с.
6. Петч Н. // Разрушение / Под ред. Г. Либовица. М.: Мир, 1973. Т. 1. С. 376–420.
7. Вакилов А.Н., Мамонова М.В., Прудников В.В. // Физика твердого тела. 1997. Т. 39. №6. С. 964–967.

THE MODEL OF THERMOELASTIC STATE OF THE SURFACE LAYER OF A SOLID*V.S. Shorkin, L.Yu. Frolenkova*

The model of the thermoelastic state of solid material surface layer, which makes it possible to calculate size of surface energy and forces of cohesion (breaking point) of solid deformable materials through known classical characteristics of their thermodynamic state, is suggested.

Keywords: thermoelastic state, surface layer, surface energy, energy of adhesion, forces of cohesion.