

## ГРАДИЕНТНАЯ МОДЕЛЬ НЕСВЯЗНОЙ ТЕРМОУПРУГОСТИ

### 4.1. Общие сведения о модели Тупина

Приводимый ниже алгоритм позволяет построить градиентную модель термоупругости для градиентной модели типа Тупина любой сложности. Такого рода модели могут представлять практический интерес. Они позволяют получить инструмент для описания эффектов, которые известны из экспериментов, но необъяснимы с точки зрения классической термоупругости. Подобные эффекты могут быть связаны с двумя принципиальными моментами. Во-первых — это возможность учета высокоградиентных составляющих в распределении температуры по координатам, т.е. высокая градиентность поля температур. Во-вторых, существенным может оказаться совместный учет градиентности (через кривизны деформаций в потенциальной энергии) и более полный учет градиентности внешнего воздействия.

Указанные уточнения могут быть существенными при моделировании деформирования и разрушения различного рода неоднородных структур типа многослойных покрытий, работающих в критических условиях, керамических материалов, композитно-керамических структур в авиации и ракетостроении, многослойных структур в электронной промышленности и пр. Заметим, что в данной главе не будет рассматриваться проблема построения градиентной теплопроводности, которая также является одной из фундаментальных проблем физики, ибо с этой проблемой связана возможность адекватного моделирования теплопроводности структурированных сред (например, кристаллических структур).

Положим, что в качестве основной модели среды здесь рассматривается градиентная модель межфазного слоя (см. (2.35), (2.36)). Построим вариант градиентной несвязной термоупругости для такой среды. Для заданной температуры аргументами потенциальной

энергии являются полные деформации (для теории упругости) и производные деформации (для градиентной модели).

#### 4.2. Основные соотношения

Рассмотрим влияние температурного поля на деформирование тонких структур (нанопленок, нанопластин и т.д.). Пусть задано распределение температуры  $T(x, y, z)$ . Полная деформация  $\varepsilon$  есть сумма упругой  $\varepsilon_e$  и температурной  $\varepsilon_t$  составляющих:

$$\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_t,$$

откуда

$$\varepsilon_e = \varepsilon - \varepsilon_t, \quad (4.1)$$

где  $\varepsilon_t = \alpha_{mn} T$ ,  $\alpha_{mn}$  — компоненты тензора коэффициентов линейного температурного расширения для анизотропного тела.

Будем рассматривать линейные, обратимые процессы. Для заданной температуры аргументами потенциальной энергии  $U$  являются полные деформации. Определяющие соотношения имеют вид:

$$\sigma_{ik} = \left( \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_T; \quad (4.2)$$

$$\sigma_{ik} = C_{ikmn} \varepsilon_{mn}^e, \quad (4.3)$$

где  $\varepsilon_{mn}^e = \varepsilon_e$  — упругие деформации.

Согласно (4.1)  $\varepsilon_{mn}^e = \varepsilon_{mn} - \alpha_{mn} T$  ( $\varepsilon_{mn}$  — полные деформации). Учитывая (4.2), равенство (4.3) запишем в виде

$$\left( \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_T = C_{ikmn} (\varepsilon_{mn} - \alpha_{mn} T).$$

Следовательно, потенциальная энергия с точностью до постоянной определяется равенством

энергии являются полные деформации (для теории упругости) и производные деформации (для градиентной модели).

#### 4.2. Основные соотношения

Рассмотрим влияние температурного поля на деформирование тонких структур (нанопленок, нанопластин и т.д.). Пусть задано распределение температуры  $T(x, y, z)$ . Полная деформация  $\varepsilon$  есть сумма упругой  $\varepsilon_e$  и температурной  $\varepsilon_t$  составляющих:

$$\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_t,$$

откуда

$$\varepsilon_e = \varepsilon - \varepsilon_t, \quad (4.1)$$

где  $\varepsilon_t = \alpha_{mn} T$ ,  $\alpha_{mn}$  — компоненты тензора коэффициентов линейного температурного расширения для анизотропного тела.

Будем рассматривать линейные, обратимые процессы. Для заданной температуры аргументами потенциальной энергии  $U$  являются полные деформации. Определяющие соотношения имеют вид:

$$\sigma_{ik} = \left( \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_T; \quad (4.2)$$

$$\sigma_{ik} = C_{ikmn} \varepsilon_{mn}^e, \quad (4.3)$$

где  $\varepsilon_{mn}^e = \varepsilon_e$  — упругие деформации.

Согласно (4.1)  $\varepsilon_{mn}^e = \varepsilon_{mn} - \alpha_{mn} T$  ( $\varepsilon_{mn}$  — полные деформации). Учитывая (4.2), равенство (4.3) запишем в виде

$$\left( \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_T = C_{ikmn} (\varepsilon_{mn} - \alpha_{mn} T).$$

Следовательно, потенциальная энергия с точностью до постоянной определяется равенством



$$U = \frac{1}{2} C_{ikmn} (\varepsilon_{ik} \varepsilon_{mn} - 2\varepsilon_{ik} \alpha_{mn} T). \quad (4.4)$$

Полные деформации связаны с перемещениями соотношениями Коши. Для изотропного тела

$$\alpha_{ij} = 0, \quad i \neq j; \quad \alpha_{ii} = \alpha, \quad \alpha_{11} = \alpha_{22} = \alpha_{33} = \alpha.$$

Для построения варианта градиентной термоупругости примем в качестве основы градиентную модель межфазного слоя с одной дополнительной физической постоянной в объеме. Будем полагать, что с изменением температуры меняется шаровая часть деформации в соответствии с законом Дюамеля—Неймана:

$$\theta = \theta^e - \alpha T, \quad \theta_i = \theta_i^e - \alpha T_i.$$

Здесь  $\theta$  — полная объемная деформация. В дальнейшем при построении модели градиентной термоупругости будем использовать функционал Лагранжа градиентной модели, проведя в нем следующую замену:

$$\theta^2 \rightarrow (\theta^2 - 2\alpha\theta T + \alpha^2 T^2); \quad (4.5)$$

$$\theta_i^2 \rightarrow (\theta_i^2 - 2\alpha\theta_i T_i + \alpha^2 T_i^2), \quad (4.6)$$

где

$$\theta_i = \frac{\partial \theta}{\partial x_i}; \quad T_i = \frac{\partial T}{\partial x_i}.$$

Полагаем, что функционал градиентной модели имеет вид

$$L = A - \frac{1}{2} \iiint \left[ 2\mu \gamma_{ij} \gamma_{ij} + \left( \frac{2\mu}{3} + \lambda \right) \theta^2 + 8 \frac{\mu^2}{C} \xi_{ij} \xi_{ij} + \frac{(2\mu + \lambda)^2}{C} \theta_i \theta_i \right] dV - \frac{1}{2} \iint [D_{ij} \dot{R}_i \dot{R}_j] dF; \quad (4.7)$$

$$\theta_i = \frac{\partial \theta}{\partial x_i}, \quad \theta = \frac{\partial R_j}{\partial x_j}, \quad \xi_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial \omega_i}{\partial x_j} + \frac{1}{2} \frac{\partial \omega_j}{\partial x_i}.$$

В соответствии с предложенным алгоритмом заменим в записанном функционале выражения для  $\theta$  и  $\theta_i$  по формулам (4.5), (4.6):

$$L = A - \frac{1}{2} \iiint \left[ 2\mu \gamma_{ij} \gamma_{ij} + \left( \frac{2\mu}{3} + \lambda \right) (\theta^2 - 2\alpha \theta T + \alpha^2 T^2) + 8 \frac{\mu^2}{C} \xi_{ij} \xi_{ij} + \frac{(2\mu + \lambda)^2}{C} (\theta_i^2 - 2\alpha \theta_i T_i + \alpha^2 T_i^2) \right] dV - \frac{1}{2} \iint [D_{ij} \dot{R}_i \dot{R}_j] dF. \quad (4.8)$$

Математическая постановка предложенного варианта градиентной термоупругости полностью определяется функционалом Лагранжа (4.7). Здесь следует обратить внимание на то, что температура и градиент температуры — заданные функции, и их вариации равны нулю. Поэтому последние два слагаемых (линейных по деформации изменения объема и по градиенту деформации изменения объема) можно отнести к работе внешних сил, так как, по определению, работа внешних сил является линейной формой кинематических переменных. Для простоты в дальнейшем опустим слагаемые в (4.7), (4.8), соответствующие «поврежденной адгезии», т.е. положим  $D_{ij} = 0$ .

Обозначим эффективную работу внешних сил через  $A^*$ . Тогда

$$A^* = A + \iiint \left[ \left( \frac{2\mu}{3} + \lambda \right) \alpha T R_{i,i} + \frac{(2\mu + \lambda)^2}{C} \alpha T_{,j} R_{i,jj} \right] dV.$$

С учетом данного определения эффективной работы внешних сил лагранжиан градиентной модели межфазного слоя (2.36) приобретет вид (4.7), только вместо  $A$  будет  $A^*$ .

Такая форма записи лагранжиана дает возможность сводить температурные воздействия к обычным силовым воздействиям через

эквивалентные объемные и поверхностные нагрузки. Действительно, преобразуем эффективную работу так, чтобы она содержала только перемещения. Для этого возьмем температурные слагаемые по частям:

$$\begin{aligned}
 A^* &= A + \iiint \left[ \left( \frac{2\mu}{3} + \lambda \right) \alpha T R_{,i,i} + \frac{(2\mu + \lambda)^2}{C} \alpha T_{,j} R_{,i,ij} \right] dV = \\
 &= A + \iiint \left[ \left( \frac{2\mu}{3} + \lambda \right) \alpha T - \frac{(2\mu + \lambda)^2}{C} \alpha T_{,jj} \right] R_{,i,i} dV + \\
 &\quad + \iint \frac{(2\mu + \lambda)^2}{C} \alpha T_{,j} n_j R_{,i,i} dF = \\
 &= A + \iiint \left[ - \left( \frac{2\mu}{3} + \lambda \right) \alpha T_{,i,i} + \frac{(2\mu + \lambda)^2}{C} \alpha T_{,ijj} \right] R_i dV + \\
 &\quad + \iint \left[ \left( \frac{2\mu}{3} + \lambda \right) \alpha T - \frac{(2\mu + \lambda)^2}{C} \alpha T_{,jj} \right] n_i R_i dF + \\
 &\quad + \iint \frac{(2\mu + \lambda)^2}{C} \alpha T_{,j} n_j R_{,i,i} dF.
 \end{aligned}$$

Учтём то, что работа внешних силовых нагрузок имеет следующую структуру:

$$A = \iiint P_i^V R_i dV + \iint P_i^F R_i dF,$$

где  $P_i^V, P_i^F$  — соответственно внешние объемные и поверхностные нагрузки. Тогда эффективную работу можно структурировать таким же образом, вводя «объединенные» термомеханические нагрузки в объеме  $P_i^{V*}$  и на поверхности  $P_i^{F*}$ :

$$P_i^{V*} = P_i^V + \left[ - \left( \frac{2\mu}{3} + \lambda \right) \alpha T_{,i,i} + \frac{(2\mu + \lambda)^2}{C} \alpha T_{,ijj} \right]; \quad (4.9)$$



$$P_i^{F*} = P_i^F + \left[ \left( \frac{2\mu}{3} + \lambda \right) \alpha T - \frac{(2\mu + \lambda)^2}{C} \alpha T_{,jj} \right] n_i. \quad (4.10)$$

Тогда структура эффективной работы приобретет такой же вид:

$$A^* = \iiint P_i^{V*} R_i dV + \oint P_i^{F*} R_i dF + \oint \frac{(2\mu + \lambda)^2}{C} \alpha T_{,j} n_j R_{i,i} dF. \quad (4.11)$$

Последнее слагаемое свойственно только градиентной модели и не имеет аналогов в классической теории упругости, поэтому является специфическим для градиентной модели.

Заметим, что в то время как в разрешающее уравнение классической теории упругости входят градиенты температур (первые два слагаемых в (4.9)), в разрешающее уравнение обобщенной модели (4.8) с масштабными эффектами будут входить третьи производные температуры по координате (третье слагаемое в (4.9)). Краевые условия в обобщенной постановке зависят не только от амплитуд температурного поля, но также и от вторых производных температуры по координате (третье слагаемое в (4.10)). Учет градиентных эффектов и скорость изменения температурного поля может внести существенные поправки в деформированное состояние по сравнению с классической теорией упругости. Эти поправки носят весьма локальный характер в окрестности границ контакта фаз и поэтому могут представлять интерес при анализе структурированных сред.

### 4.3. О градиентных эффектах в тонких покрытиях

В качестве примера рассмотрим одномерную задачу о температурном нагружении полосы. То есть полагаем

$$R_1 = R_2 = \frac{\partial R_3}{\partial x} = \frac{\partial R_3}{\partial y} = 0$$

и считаем, что силовое нагружение полосы отсутствует. Тогда, в соответствии с уравнением (4.7), вариационная модель термоупругости будет иметь вид





$$r|_{z=0} = 0, \quad r'|_{z=0} = 0;$$

$$\frac{E^2}{C} (r'' - \alpha \Delta T') \Big|_{z=h} = 0;$$

$$Er' - \frac{E^2}{C} r''' + \alpha \left( \frac{E^2}{C} \Delta T'' - K \Delta T \right) \Big|_{z=h} = 0.$$

При  $C \rightarrow \infty$  имеет место переход к классической модели термоупругости:

$$Er'' - \alpha K \Delta T' = 0, \quad r|_{z=0} = 0, \quad Er' - K \alpha T \Big|_{z=h} = 0.$$

Рассмотрим покрытие со следующими характеристиками:

$$E = 200 \text{ ГПа}; \quad \nu = 0,25; \quad K = 133,3 \text{ ГПа}; \quad \alpha = 10^{-5} \text{ К}^{-1}; \quad h = 1 \text{ мкм}.$$

Градиентный параметр модели примем равным единице:  $C = 1000 \text{ Н/мкм}^4$ . Предположим, что поле температуры в поперечном к поверхности покрытия направлении изменяется по степенному закону:

$$T(x) = 500(1 - x/h)^r \text{ [}^\circ\text{C]},$$

где  $r$  — показатель изменяемости температурного поля.

В классической термоупругости перемещения и деформации в покрытии всегда остаются положительными при любом показателе изменяемости  $r$ , а напряжения остаются равными нулю (рис. 4.3).

Решение, найденное в рамках градиентной модели, существенно отличается от решения, полученного по классической модели. При воздействии переменных температурных полей в покрытии перемещения и деформации могут менять знак (рис. 4.4) и в значительной степени зависят от показателя изменяемости температурного поля.

Полные напряжения в покрытии, полученные в рамках градиентной модели, отличны от нуля. Распределение напряжений в покрытии представлено на рис. 4.5.

При удалении от границы контакта с основанием напряжения быстро изменяются, стремясь к нулю. На рис. 4.6 представлено распределение напряжений в покрытии толщиной 4 мкм.



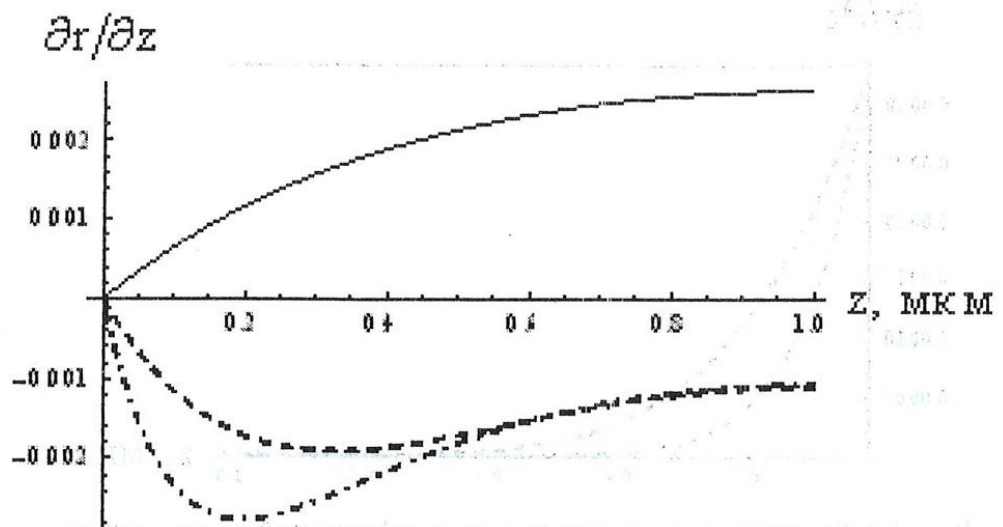
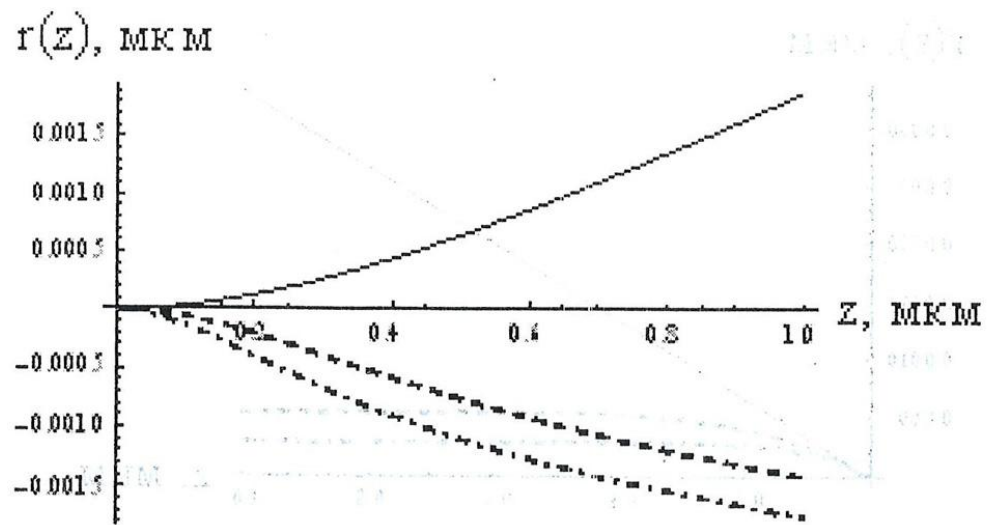


Рис. 4.4. Распределение перемещений и деформаций вдоль толщины покрытия в градиентной модели

2. В качестве второго примера рассмотрим в аналогичной постановке двухслойное покрытие, находящееся в условиях температурного воздействия. Слой толщиной  $h$  является внешним покрытием. Внутренний слой толщиной  $H$  является подложкой, которая жёстко закреплена при  $z = 0$  (рис. 4.7).

В данном случае проблема сводится к решению краевой задачи, удовлетворяющему системе уравнений:



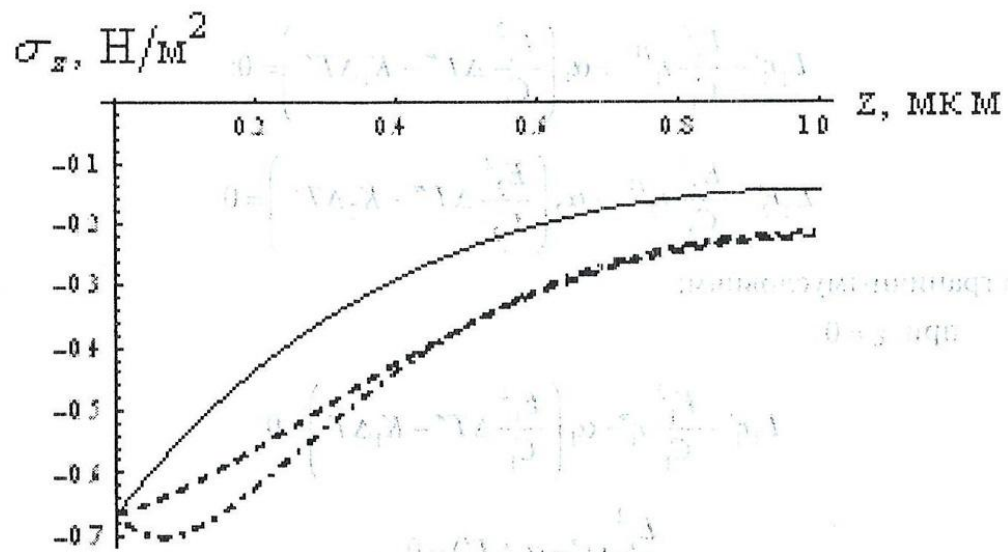


Рис. 4.5. Распределение напряжений  $\sigma_z$  вдоль толщины покрытия в градиентной модели

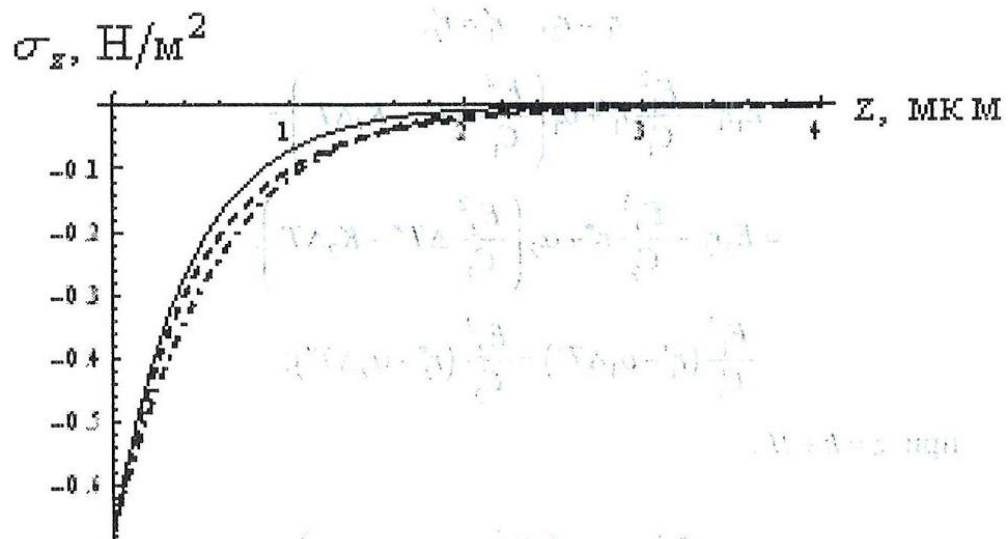


Рис. 4.6. Изменение напряжений  $\sigma_z$  в покрытии толщиной 4 мкм

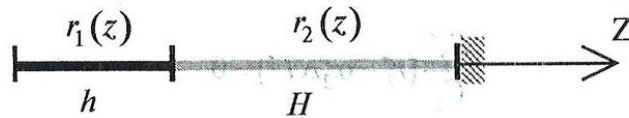


Рис. 4.7. Одномерная модель двухслойного покрытия

$$E_1 r_1'' - \frac{E_1^2}{C_1} r_1^{IV} + \alpha_1 \left( \frac{E_1^2}{C_1} \Delta T''' - K_1 \Delta T' \right) = 0;$$

$$E_2 r_2'' - \frac{E_2^2}{C_2} r_2^{IV} + \alpha_2 \left( \frac{E_2^2}{C_2} \Delta T''' - K_2 \Delta T' \right) = 0$$

и граничным условиям:

при  $z = 0$ :

$$E_1 r_1' - \frac{E_1^2}{C_1} r_1''' + \alpha_1 \left( \frac{E_1^2}{C_1} \Delta T'' - K_1 \Delta T \right) = 0,$$

$$\frac{E_1^2}{C_1} (r_1'' - \alpha_1 \Delta T') = 0;$$

при  $z = h$ :

$$r_1 = r_2, \quad r_1' = r_2',$$

$$E_1 r_1' - \frac{E_1^2}{C_1} r_1''' + \alpha_1 \left( \frac{E_1^2}{C_1} \Delta T'' - K_1 \Delta T \right) =$$

$$= E_2 r_2' - \frac{E_2^2}{C_2} r_2''' + \alpha_2 \left( \frac{E_2^2}{C_2} \Delta T'' - K_2 \Delta T \right),$$

$$\frac{E_1^2}{C_1} (r_1'' - \alpha_1 \Delta T') = \frac{E_2^2}{C_2} (r_2'' - \alpha_2 \Delta T');$$

при  $z = h + H$ :

$$E_2 r_2' - \frac{E_2^2}{C_2} r_2''' + \alpha_2 \left( \frac{E_2^2}{C_2} \Delta T'' - K_2 \Delta T \right) = 0,$$

$$\frac{E_2^2}{C_2} (r_2'' - \alpha_2 \Delta T') = 0.$$

Полагаем, как и прежде, что поле температуры по толщине покрытия изменяется по степенному закону:

$$T(x) = \begin{cases} 500, & 0 < x < h \\ 500(1 - (x - h)/H)^r, & h < x < h + H \end{cases} \text{ [}^\circ\text{C]},$$

где  $r$  — показатель изменяемости температурного поля.

Рассмотрим двухслойное покрытие со следующими характеристиками внутреннего керамического слоя из керамики на основе ZnO:

$$E_2 = 120 \text{ ГПа}, \nu_2 = 0,23, K_2 = 74 \text{ ГПа}, \alpha_2 = 4,8 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}.$$

Будем рассматривать два типа слоистых систем:

1) с металлическим покрытием (см. рис. 4.1):

$$E_1 = 200 \text{ ГПа}, \nu_1 = 0,23, K_1 = 123 \text{ ГПа}, \alpha_1 = 10^{-5} \text{ К}^{-1};$$

2) с керамическим покрытием (SiC) (см. рис. 4.2):

$$E_1 = 410 \text{ ГПа}, \nu_1 = 0,23, K_1 = 244 \text{ ГПа}, \alpha_1 = 3 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}.$$

Толщины слоёв принимаются равными:  $h = 1 \text{ мкм}$ ,  $H/h = 10$ .

Градиентный параметр модели:  $C = 1000 \text{ Н/мкм}^4$ . Показатель изменяемости температурного поля  $r = 3$ .

Кривые рис. 4.8 показывают распределение напряжений в окрестности границы контакта в двухслойном покрытии.

Локальный неклассический характер напряжений связан исключительно с градиентностью. Классическому решению соответствует напряжение, равное нулю. Видим, что если внешнее покрытие (в данном случае металлическое) обладает более высоким коэффициентом температурного расширения (КТР), то в керамической подложке будут возникать растягивающие напряжения, локализованные в области контактной границы.

В этом случае возможно развитие поверхностных микротрещин, перпендикулярных поверхности покрытия, из-за дополнительного локального градиентного нагружения растягивающими напряжениями в плоскости слоя, появляющимися вследствие эффекта Пуассона.



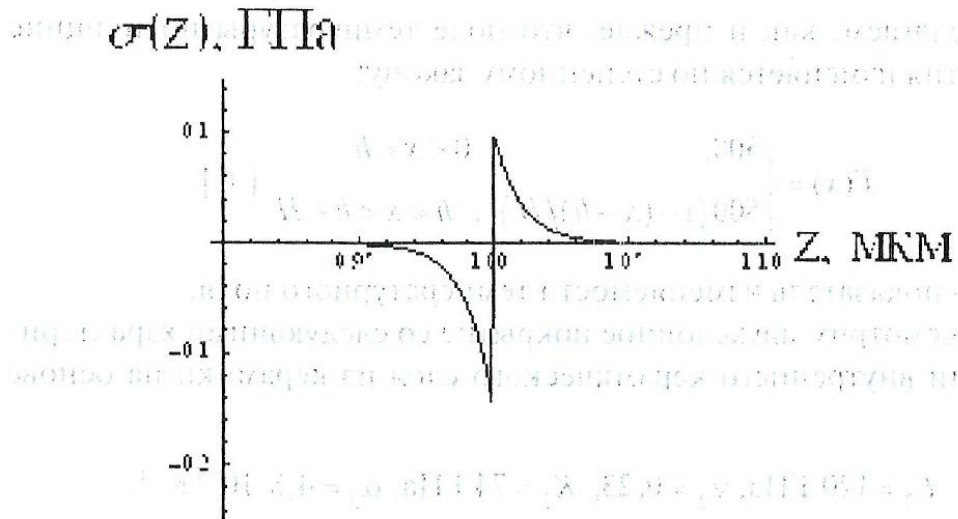


Рис. 4.8. Распределение напряжений в композите с металлическим покрытием

сона. Характер распределения напряжений, в том числе изменение знака (рис. 4.9), зависит от соотношения термомеханических характеристик слоистой системы.

Отметим, что учет градиентных эффектов открывает принципиальные возможности в моделировании разрушения покрытий, в проектировании оптимальных многослойных структур. Однако раз-

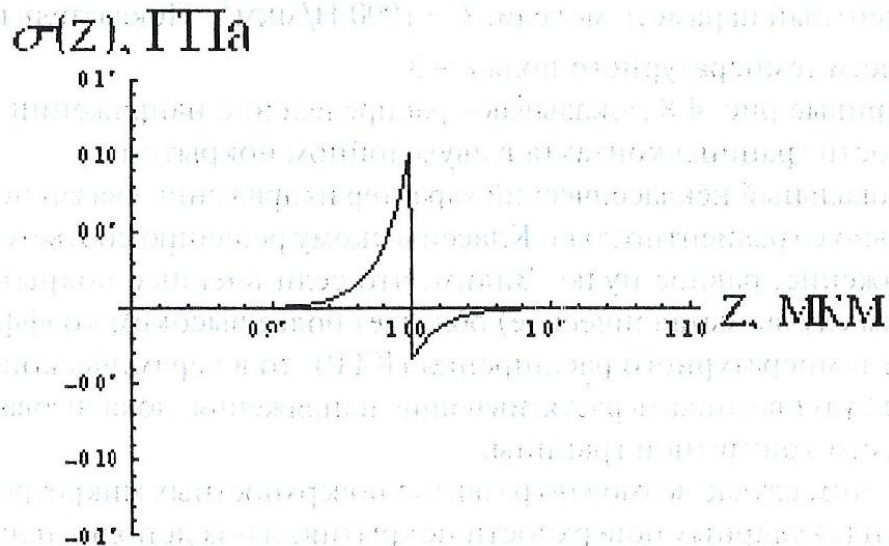


Рис. 4.9. Распределение напряжений в композите с керамическим покрытием

вите этих исследований требует проведения системы тонких экспериментальных исследований. Теоретические прогнозы показывают наличие значительной зависимости распределения температурного поля (знак напряжений, максимальная амплитуда напряжений,

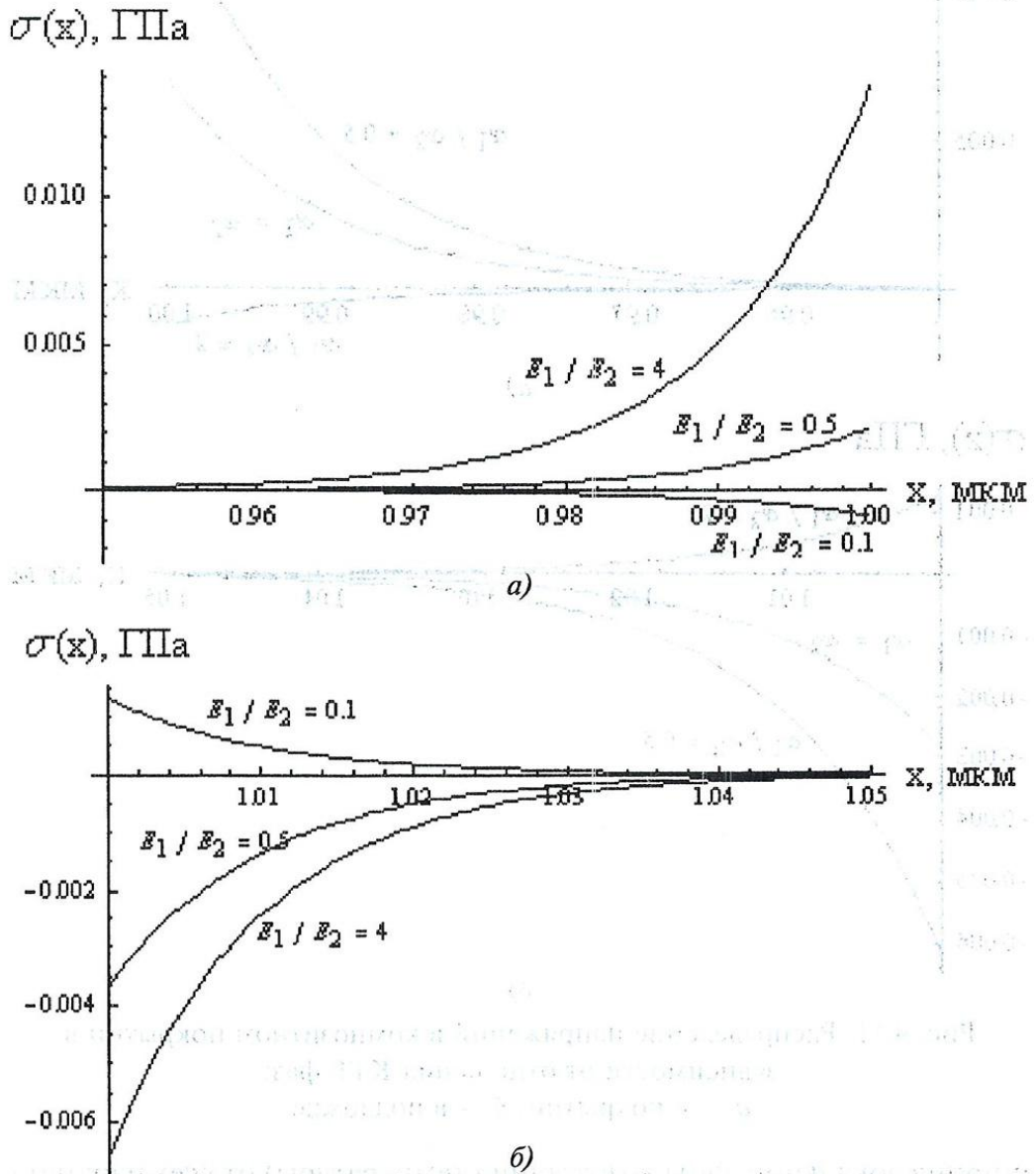


Рис. 4.10. Распределение напряжений в композитном покрытии в зависимости от отношения модулей Юнга фаз:  
*a* — в покрытии; *б* — в подложке

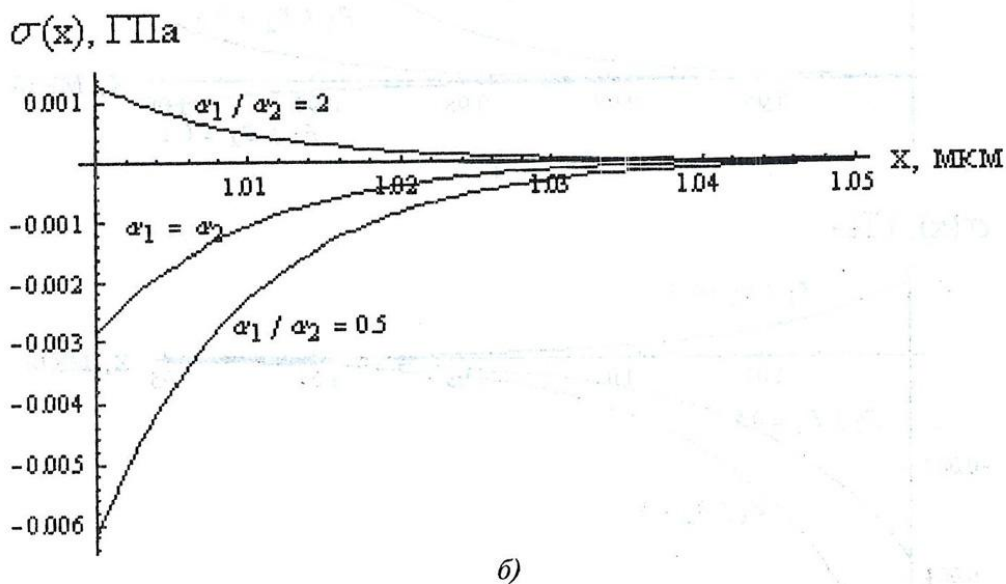
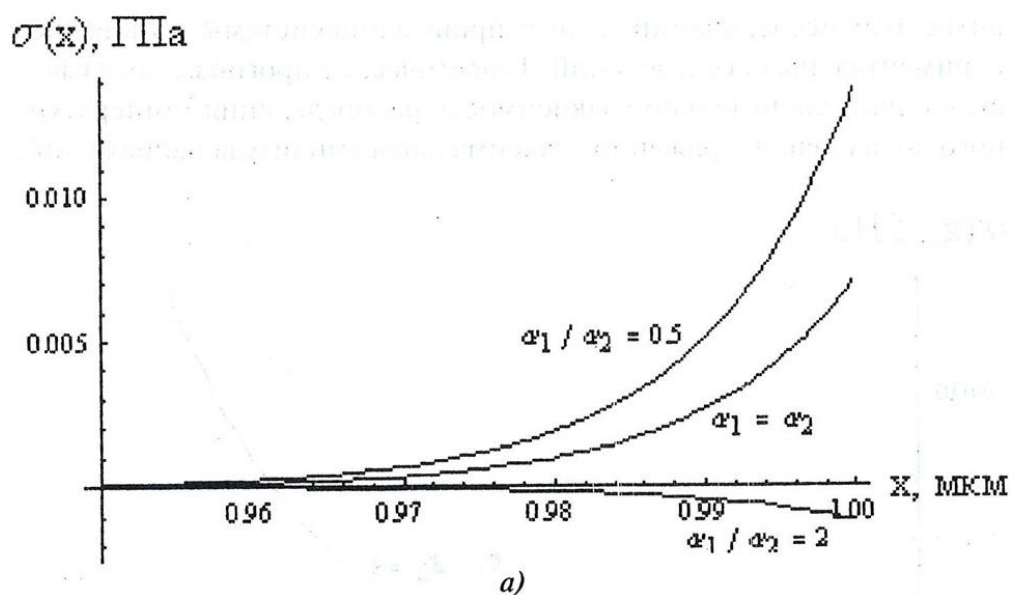


Рис. 4.11. Распределение напряжений в композитном покрытии в зависимости от отношения КТР фаз:  
*a* — в покрытии; *б* — в подложке

ширина локальной зоны возрастания температуры) от всех параметров модели.

Проведем краткий анализ влияния возможных соотношений модулей упругости и коэффициентов теплового расширения на



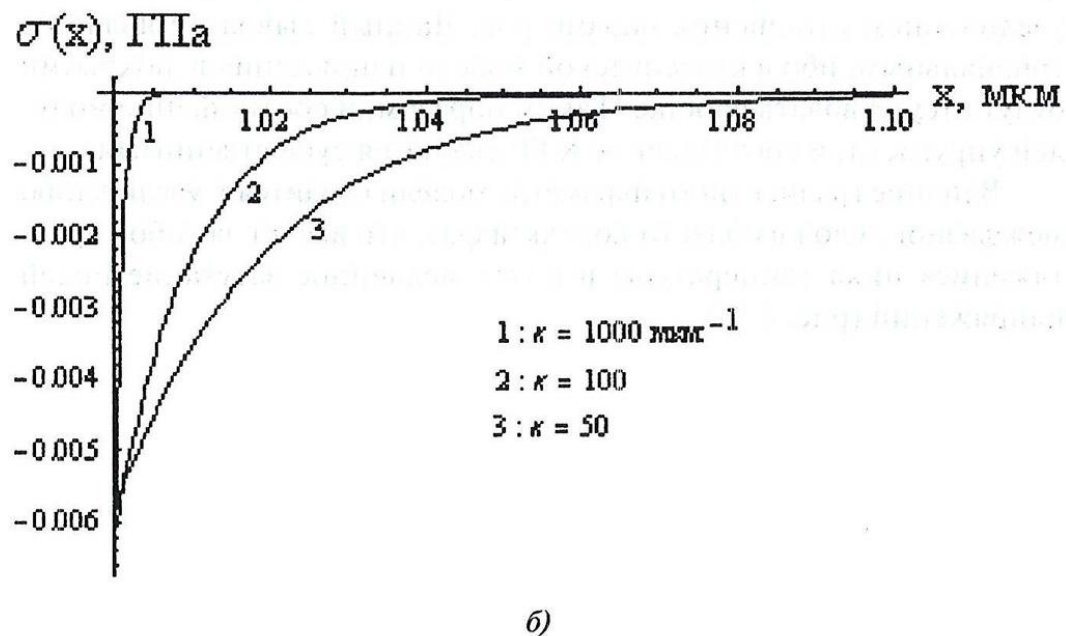
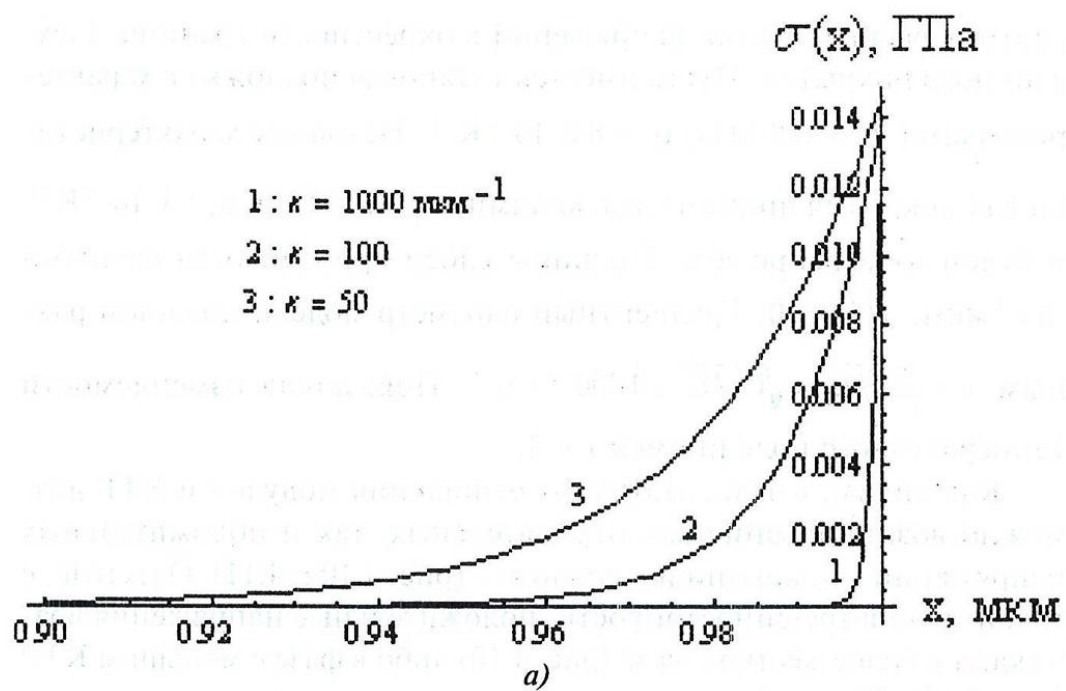


Рис. 4.12. Распределение напряжений в композитном покрытии в зависимости от градиентного параметра модели фаз:  
*a* — в покрытии; *б* — в подложке

картину распределения напряжений в окрестности границы двух-слойного покрытия. Пусть имеется титановая подложка с характеристиками  $E_2 = 110$  ГПа,  $\alpha_2 = 8,6 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$ . Исходные характеристики для покрытия примем следующими:  $E_1 = 200$  ГПа,  $\alpha_1 = 1 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$  и будем их варьировать. Толщины слоёв принимаются равными  $h = 1$  мкм,  $H/h = 10$ . Градиентный параметр модели полагаем равным  $k = \sqrt{C_1/E_1} = \sqrt{C_2/E_2} = 1000 \text{ мкм}^{-1}$ . Показатель изменяемости температурного поля примем  $r = 3$ .

Как видим, в зависимости от отношения модулей и КТР возможно возникновение как отрицательных, так и положительных напряжений в покрытии и в подложке (рис. 4.10 и 4.11). Опасные, с точки зрения трещиностойкости, положительные напряжения возникают в более жёсткой фазе (рис. 4.10) либо в фазе с меньшим КТР (рис. 4.11). Амплитуда напряжений увеличивается для материалов с увеличением отношения параметров. Данный вывод не является тривиальным, ибо в классической модели напряжения в покрытии будут отсутствовать вообще. Таким образом, и соотношение модулей упругости, и соотношение КТР являются существенными.

Влияние градиентного параметра модели сводится к увеличению межфазного слоя в области контакта фаз, что влечёт за собой «растяжение» пика температуры и более медленное затухание полей напряжений (рис. 4.12).