УДК 681.3:551.568.85:539.3

В.М. Юзевич, д.ф.-м.н., професор (Львівський державний університет безпеки життєдіяльності),
П.В. Луговий (Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України)

МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ ОПТИЧНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ З КЕРАМІКОЮ В УМОВАХ СПІКАННЯ ТА ВИКОРИСТАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДЛЯ ПРОТИПОЖЕЖНОГО ЗАХИСТУ

Із застосуванням методів теорії розсіяння електромагнітного випромінювання, термодинамічного підходу і методу розкладу параметрів за малим параметром запропоновано математичну модель для дослідження взаємодії оптичного випромінювання з поверхневими шарами системи довгих циліндричних стержнів, які є структурними елементами кераміки, яка перебуває в умовах спікання і використовується для протипожежного захисту.

Вступ. Кераміка використовується для протипожежного захисту ряду приладів в умовах високих температур в доменних печах [1]. При цьому слід врахувати явище спікання. Серед методик, які використовуються для аналізу властивостей кераміки у процесі спікання, важливе місце належить оптичним [2]. Для детального аналізу ситуації слід враховувати особливості поверхневих шарів та кінетику ущільнення. Відповідні існуючі методи оптики та фізики твердого тіла недостатньо конкретизовані, підходи квантової механіки і теорії атомних взаємодій громіздкі та не забезпечені повною інформацією [1,3–5].

Крім того теоретичні основи застосування оптичних пристроїв до зондування дрібнодисперсних матеріалів у стані, близькому до пожежонебезпечного, недостатньо розвинуті. Для опису фізичних процесів при відбиванні електромагнітного променя оптичного чи інфрачервоного діапазону від керамічної дрібнодисперсної поверхні використовуються макроскопічні підходи [5].

Розглядаємо керамічний порошковий матеріал, який представляє систему довгих паралельних циліндрів. Врахуємо дефекти структури і перерозподіл електронів провідності у поверхневих шарах.

В науковому та інформаційному планах для розрахунку змін оптичних, електричних і механічних характеристик поверхневих шарів порошкових матеріалів слід проаналізувати результати застосування методу розкладу параметрів локального стану в ряди за малим параметром та визначити особливості змін функцій стану міжфазової області.

Для розрахунку оптичних характеристик циліндричних структур застосовується метод матриці розсіяння [3]. Цей метод важливий тому, що дозволяє моделювати структури з дефектами .

Термодинамічний макроскопічний підхід для вивчення фізичних процесів на поверхні твердого тіла та в міжфазових шарах висвітлено у [5]. Застосування методу розкладу за малим параметром до проблеми оцінки параметрів механоелектричного поля в поверхневих шарах твердих тіл розвинуто у [6].

Слід відначити, що раніше розрахунок у взаємозв'язку параметрів електричного та механічного полів на границі розділу кераміка – повітря і оцінку їх впливу на відбивання оптичного випромінювання при температурах, близьких до пожежонебезпечних, не проводили. Тому метою даної роботи було моделювання впливу неоднорідностей поверхневих шарів на особливості взаємодії оптичного випромінювання із системою довгих циліндричних стержнів в умовах високих температур.

Розглянемо розсіяння оптичного випромінювання на системі паралельних густоупакованих циліндрів кругового перерізу, поміщених в газове середовище (зокрема, повітря). Показник заломлення повітря n_a = 1. Зондуюче оптичне випромінювання моделюємо плоскою хвилею.

Розсіяння оптичного випромінювання на одному циліндрі системи

Дослідження ґрунтуються на матриці розсіяння, яка представляє собою матрицю Мюллера для розсіяння окремою частинкою [2]. Матриця розсіяння для сукупності циліндрів є просто сумою матриць розсіяння окремих частинок. При цьому обмежуємось варіантом, що лінійні розміри системи частинок порошкового матеріалу (циліндрів) малі порівняно з відстанню, на якій знаходиться приймач випромінювання.

Нехай плоска хвиля E_p падає на систему паралельних циліндрів у від'ємному напрямку осі x декартової системи координат по нормалі до осей циліндрів, які розміщених в напрямку осі z. Нехай загальне число циліндричних елементів на одиничній площі – N. Показник заломлення матеріалу циліндрів n_c. Вважаємо, що положення частини кожного j-го циліндра характеризується радіус-вектором r_j. Розгляд розсіяння на системі паралельних циліндрів можна вважати двовимірним. Оскільки циліндри безмежні, то падаюче і розсіяне поля інваріантні відносно осі z. Електромагнітне поле, що попадає на поверхню j-го циліндра, складається з двох частин [3]:

$$E_i(j) = E_p(j) + \sum_{l \neq j}^{N} E_s(l, j) . \tag{1}$$

Падаюча плоска хвиля описується виразом [3]

$$E_p(j) = E_0 \exp(ik_p r) . \tag{2}$$

Тут E_0 – постійний вектор; i – уявна одиниця; k_p – хвильовий вектор; r – радіус-вектор.

Падаюча плоска хвиля може бути розкладена по векторних циліндричних гармоніках у зв'язаній з j-м циліндром системі координат. Циліндричні векторні хвильові функції (M_n, N_n) в площині $x0y$ подані таким чином [2]:

$$M_n = k(inJ_n(\rho)e_r / \rho - J_n^{/}(\rho)e_\varphi)\exp(in\varphi) , \ N_n = kJ_n(\rho)e_z \exp(in\varphi) , \tag{3}$$

де e_r, e_φ, e_z – одиничні орти в циліндричній системі координат; $n = 0, \pm1, \ldots$; $J_n(\rho)$, $J_n^{/}(\rho)$ – функції Бесселя; $\rho = r\sqrt{k^2 - h^2}$; параметри k, h входять у скалярне хвильове рівняння $\nabla^2\Psi_{opt} + k^2\Psi_{opt} = 0$ та його розв'язок $\Psi_{opt} = \Psi_n(r, \varphi, z) = Z_n(\rho)\exp(in\varphi)\exp(ihz)$ [3]; Ψ_{opt} – хвильова функція.

Розглянемо випадок, коли падаюча хвиля поляризована паралельно осі z. Тоді падаючу хвилю можна подати у вигляді:

$$E_p(j) = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} E_n N_n \exp(ik_p r_j) . \tag{4}$$

де $E_n = (-1)^n E_0/k_0$, $k_0 = 2\pi n_a/\lambda$ – хвильовий вектор в оточуючому циліндри середовищі.

Кожний циліндр характеризується своєю матрицею розсіяння, яка зв'язує падаючу і дифраговану хвилі. Поле розсіяння j-м циліндром даної системи для випадку нормального падіння зондуючого випромінювання подамо так:

$$E_s(j) = -\sum_{n=-\infty}^{n=\infty} E_n b_n^j N_n^3 , \tag{5}$$

де N_n^3 – циліндрична векторна хвильова функція, що містить циліндричну функцію Ханкеля $H_n(kr) = J_n(kr) + Y_n(kr)$; $Y_n(kr)$ – функції Бесселя дійсного аргументу; b_n^j – коефіцієнти розкладу розсіяного циліндром поля. Коефіцієнти b_n^j виражаються через коефіцієнти розсіяного циліндром поля p_n^j, використовуючи граничні умови на поверхні циліндра [3]:

$$b_n^j = b_n p_n^j , \quad b_n = \frac{J_n(mq)J_n^{/}(q) - mJ_n^{/}(mq)J_n(q)}{J_n(mq)H_n^{(1)/}(q) - mJ_n^{/}(mq)H_n^{(1)}(q)} , \tag{6}$$

де $q = ka$; $m = n_c/n_a$; a – радіус циліндра. В результаті обчислювального експерименту встановлено, що ітераційний метод вільний від обмеження розмірів системи, але збіжність ітераційної процедури є задовільною тільки у випадку, коли відносна величина багатократного розсіяння незначна. Тому ітераційний метод розрахунку параметрів застосовний в основному для невеликих систем паралельних циліндрів, які моделюють шорстку поверхню порошкового матеріалу.

Розсіяння оптичного випромінювання на системі циліндрів

Повне поле розсіяння від системи L циліндрів визначається сумою полів, розсіяних циліндрами:

$$E_L = \sum_{j=1}^{L} E_s(j) = \sum_{j=1}^{L} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} E_n b_n^j \exp(-ik_s r_j) N_n^3 . \tag{7}$$

Якщо реєструюча система знаходиться досить далеко від поверхні порошкового матеріалу, то циліндричні хвильові функції при $r \to \infty$ можна замінити виразами:

$$N_n^{(3)} \approx k \exp(in\varphi)\sqrt{\frac{2}{\pi kr}}(-1)^n \exp(ikr + i\pi/4) \tag{8}$$

При цьому в далекій зоні повне поле розсіяння приймає значення:

$$E_L = \sum_{j=1}^{L} E_s(j) = -E_0\sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \exp(ikr - i\pi/4) \sum_{j=1}^{L} \exp(-ik_s r_j) \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} b_n^j \exp(in\theta), \tag{9}$$

де θ – кут між k_p і k_s.

Інтенсивність розсіяння оптичного випромінювання від системи циліндрів запишемо так:

$$I_L(\theta) = |E_L|^2 = |E_0|^2 \frac{2}{\pi kr}\left|\sum_{j=1}^{L} \exp(-ik_s r_j) \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} b_n^j \exp(in\theta)\right|^2 . \tag{10}$$

Запропоновані співвідношення (1)–(10) дозволяють моделювати процеси поширення світла в структурах з різним просторовим розміщенням розсіювачів (циліндрів).

Термодинамічний опис поверхневих шарів в системі контактуючих циліндрів.

Циліндри радіуса R моделюємо не суцільними, а кусково однорідними, враховуючи однорідне осердя радіуса r_0 і поверхневу оболонку товщиною $h_s = R - r_0$, в якій знаходяться зв'язані електричні заряди, оскільки матеріал кераміки – діелектричний. Раніше при моделюванні взаємодії електромагнітних хвиль з матеріалом порошку подвійного електричного шару на поверхні неелектропровідних частинок не враховували і це приводило до суттєвих неточностей оцінки дисперсного складу. При розгляді та описі взаємодії випромінювання з частинками (диполями) подвійного шару на поверхні частинок враховуємо наявність механічних напружень [7].

Щоб оцінити компоненти тензора механічних напружень σ_r, σ_φ, σ_z (r, φ, z – циліндричні координати відповідно) і його кульової частини $\sigma_0 = (\sigma_r + \sigma_\varphi + \sigma_z)/3$, а також товщини поверхневої області h_s в неелектропровідному циліндрі застосуємо підхід і співвідношення, викладені у працях [5,6,8].

Для квазістаціонарного режиму рівняння зміни електричних і механічних параметрів стану в поверхневому шарі й сердечнику в циліндричних координатах (r, φ, z) (згідно з [5,6,8]) запишемо так:

$$\begin{gathered}\partial\sigma_r/\partial r - (\sigma_r - \sigma_\varphi)/r + \rho_m \omega E_r = 0,\ \ \partial\sigma_\varphi/\partial z = 0,\ \ d^2 w/dz^2 = 0;\\ \sigma_{ij} = ((K - 2\cdot G/3)\cdot\varepsilon - \beta\cdot K\cdot\varphi_m)\cdot\delta_{ij} + 2\cdot G\cdot\varepsilon_{ij},\ (i,j = r,\varphi,z),\ \ \omega = C_\varphi\cdot\varphi_m + \beta\cdot K\cdot\varepsilon,\\ \varepsilon = \varepsilon_r + \varepsilon_\varphi + \varepsilon_z;\ \ \varepsilon_{r\varphi} = \varepsilon_{rz} = \varepsilon_{\varphi z} = 0,\ \ \varepsilon_r = du/dr,\ \varepsilon_\varphi = u/r;\ \varepsilon_z = dw/dz.\end{gathered} \tag{11}$$

Тут K,G – пружні модулі (всестороннього стиску і зсуву); ε_r, ε_φ, ε_z – компоненти тензора деформацій; ; $u = u_r$, $w = w_z$, $u_\varphi = 0$ – компоненти вектора переміщення вздовж осей r, z, φ відповідно; φ_m – відхилення модифікованого хімічного потенціалу зв'язаних електричних зарядів Ф від рівноважного значення Φ_0 далеко від границі ($\varphi_m = \Phi - \Phi_0$); β – електрострикційний коефіцієнт об'ємного розширення; ω – густина зв'язаного об'ємного заряду; C_φ – питома електроємність матеріалу поверхневого шару; E_r – радіальна компонента напруженості електричного поля; δ_{ij} – символи Кронекера; ε – перший інваріант тензора деформацій; ρ_m – густина матеріалу.

Співвідношення термодинамічної моделі (11) доповнимо такими виразами [5,8]:

$$\sigma_h = \int_{r_0}^{R} \sigma_r \cdot dr, \tag{12}$$

$$\sigma_\varphi + p = 0 \text{ (для } r = r_0) \quad (p = 100 \text{ кПа – атмосферний тиск).} \tag{13}$$

$$\gamma_s = \gamma_1 + \xi\gamma_2, \qquad \frac{\partial\gamma}{\partial k} = \frac{\partial(\gamma_1 + \xi\gamma_2)}{\partial k} = 0. \tag{14}$$

Тут σ_h – поверхневий натяг; γ_s – поверхнева енергія, яка подана у вигляді суми електростатичної γ_1 та механічної $\xi\gamma_2$ складових; $\gamma_1 = \int_{r_0}^{R} w_1 \cdot dr$; $\gamma_2 = \int_{r_0}^{R} w_2 \cdot dr$; $w_1 = \frac{\varepsilon_0}{2}\left(\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)^2$; $w_2 = \frac{\sigma_r(\sigma_r - 4\nu\sigma_\varphi)}{2E} - \frac{(1-\nu)\sigma_\varphi^2}{E}$; ξ, $z_1 = \gamma_1/\gamma$ – фізичні характеристики матеріалу; Ψ – скалярний потенціал напруженості поля зв'язаних зарядів; E, ν – модуль Юнга та коефіцієнт Пуассона; $\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – електрична постійна; $k = \sqrt{\rho_m C_\varphi / \varepsilon_0}$; $E_r = \partial\Psi / \partial r$.

Граничні умови на поверхні циліндра такі [5,8]

$$\varphi_m = -\Phi_0, \quad \sigma_r = -\varepsilon_0 \cdot E_r^2 / 2, \quad (\text{для } r = R) \tag{15}$$

Співвідношення (11–15) складають систему рівнянь для визначення фізичних ξ, β, k і геометричної $h_s = R - r_0$ характеристик поверхневого шару.

Для визначення розподілу в поверхневій області параметрів стану для електричного і механічного полів слід задати числові значення поверхневих натягу σ_h та енергії γ_s [9,10]. Але не для всіх матеріалів величини σ_h та γ_s подані в довідниках і наукових статтях. Тому їх можна наближено розрахувати з використанням методу атомних взаємодій [11] з урахуванням радіально-симетричного потенціалу центральних сил $u_{\alpha\beta}$ за Борном-Майєром [12]:

$$u_{\alpha\beta} = q_e^2 / R_{\alpha\beta} - c_{\alpha\beta}/R_{\alpha\beta}^6 - d_{\alpha\beta}/R_{\alpha\beta}^8 + b_{\alpha\beta}\exp(-R_{\alpha\beta}/\rho_q), \tag{16}$$

Тут q_e – електричний заряд частинок; $R_{\alpha\beta}$ – відстань між частинками "α" і "β"; $c_{\alpha\beta}$, $d_{\alpha\beta}$, $b_{\alpha\beta}$ – постійні; ρ_q – параметр "жорсткості".

Напруження σ_{ij} в поверхневому шарі знаходимо, розкладаючи їх і деформації ε_{ij} в ряди за безрозмірним малим параметром $b_м = \beta\Phi_0$ аналогічно як у праці [6].

Для використання співвідношень моделі прийнято, що початок координат в центрі циліндра на осі $z = 0$.

Використовуючи значення фізичних постійних для неелектропровідних матеріалів [10] (які характерні для порошків більшості металів), встановлено, що товщина поверхневої області приблизно рівна $h_s \approx 20$ *нм*, а усереднене в поверхневій зоні напруження

$$\sigma_u = \int_{r_0}^{R} (\sigma_r + \sigma_\varphi + \sigma_z) \cdot dr, \tag{17}$$

приймає, зокрема, значення $\sigma_u \approx 2300$ *МПа* (розтяг).

Моделювання впливу характеристик поверхневого шару на показник заломлення матеріалу.

Експериментально визначено, що коефіцієнт заломлення електропровідних тіл $n_a = m_s - i \cdot x_s$ лінійно зростає при навантаженні зразка гідростатичним тиском p. Зокрема, для порошку неметалів (зокрема, кераміки) згідно з даними праці [13] при $p = 100$ *МПа*

$$\Delta m_s = 0{,}01;\ \Delta x_s = 0{,}003. \tag{18}$$

Використавши оцінку (18) і, прийнявши $p \approx \sigma_u$, отримаємо для поверхневого шару товщиною $h_s \approx 20$ *нм*: $\Delta m_s = 0{,}23;\ \Delta x_s = 0{,}069.$

Для прикладу обмежимось найбільш характерними для частинок електропровідних тіл значеннями показника заломлення [14] (якщо зондуюче випромінювання має довжину хвилі $\lambda_* = 1$ *мкм*)

$$n_a = m_s - i \cdot x_s = 1{,}95 - 1{,}02 \cdot i, \tag{19}$$

Тоді, провівши усереднення для шару, товщина якого $h_s \approx 20$ *нм*, отримаємо

$$m_{sc} - i \cdot x_{sc} = 1{,}2513 - 0{,}3319 \cdot i. \tag{20}$$

Тут індекс (c) відповідає фізичним величинам поверхневого шару.

З метою дослідження залежності показника заломлення від змін механічного навантаження та радіуса циліндрів використаємо співвідношення [3]

$$m_s = \sqrt{(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} + \alpha)/2}, \qquad x_s = \sqrt{(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} - \alpha)/2}, \tag{21}$$

де $\alpha = 1 + \omega_p^2 \cdot (\omega_0^2 - \omega^2)/((\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma^2 \cdot \omega^2)$; $\beta = \omega_p^2 \cdot \gamma \cdot \omega / ((\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \cdot \omega^2)$;

$\omega_p^2 = N_e \cdot q_0^2 / (m_e \cdot \varepsilon_0)$; ω_0 – резонансна частота; ω_p – плазмова частота; N_e – концентрація вільних електронів; $q_0 = 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ *Кл* – заряд електрона; $m_e = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ *кг* - ефективна маса електрона; ω – частота зондуючого випромінювання; $\epsilon = \alpha + \beta \cdot i$ – комплексна діелектична проникність матеріалу частинки (циліндра) порошкового елемента; γ – коефіцієнт заникання електромагнітних хвиль.

Використовуючи співвідношення (21), знаходимо, що для порошкового матеріалу, фізичні характеристики якого відповідають кераміці, при $\lambda_1 = 1$ *мкм* і $\lambda_2 = 0{,}436$ *мкм* ($m_{s1} = 1{,}95$; $x_{s2} = 1{,}02$; $m_{s2} = 1{,}3$; $x_{s2} = 0{,}68$ [13]).

$$\gamma = 3{,}5757 \cdot 10^{16}\ Гц;\ \ \omega_p = 1{,}637 \cdot 10^{16}\ Гц;\ \ \omega_0 = 5{,}778 \cdot 10^{15}\ Гц, \tag{22}$$

а в поверхневому шарі

$$\gamma_c = 3{,}133 \cdot 10^{16}\ Гц;\ \ \omega_p^c = 7{,}0348 \cdot 10^{18}\ Гц;\ \ \omega_0^c = 5{,}9652 \cdot 10^{15}\ Гц. \tag{23}$$

тут λ_1 і λ_2 довжини зондуючих електромагнітних хвиль.

З допомогою числових значень фізичних величин $\gamma, \gamma_c, \omega_p, \omega_p^c, \omega_0, \omega_0^c$, наведених в (22), (23), знаходимо для зондуючих електромагнітних хвиль ($\lambda_1 = 0{,}55$ *мкм*, $\lambda_2 = 0{,}95$ *мкм*):

$$\begin{aligned} &m_1 = 1{,}4102;\ x_1 = 0{,}7741;\ m_{c1} = 1{,}0723;\ x_{c1} = 0{,}2148; \\ &m_2 = 1{,}8895;\ x_2 = 0{,}9994;\ m_{c2} = 1{,}2294;\ x_{c2} = 0{,}3237. \end{aligned} \tag{24}$$

Коефіцієнти екстинкції Q^* для циліндрів з оболонками розраховуємо чисельно, використовуючи співвідношення теорії Мі [3] та відповідні числові методи (методику обчислювального експерименту), основи яких висвітлені у праці [6]. Екстинкція – це зумовлене розсіянням і поглинанням зменшення інтенсивності електромагнвтної хвилі при її проходженні через середовище з певним числом частинок.

Як показали результати обчислювального експерименту, при визначенні параметрів, що характеризують дисперсний склад покриття з порошку, слід використати інформацію про наявність в частинках тонкого поверхневого шару, в якому зосереджені електрони провідності. Для оцінки впливу підсистеми диполів на поверхневі взаємозвязані оптичні, електричні і механічні ефекти враховуємо залишкові механічні напруження (напруження, що характеризують поверхневу енергію), оскільки прямий зв'язок між характеристиками поверхневого подвійного електричного шару і функцією розподілу циліндричних частинок за розмірами в поверхневому шарі порошкового матеріалу експериментально встановити досить проблематично.

Термодинамічний опис міжфазних шарів в системі контактуючих циліндрів

Якщо порошкові матеріали формуються з кінцевого розміру металевих циліндричних елементів, діаметри яких мають розміри нанометрів, то в місці контактів циліндрів виникають міжфазові зони, розподіл напружень в яких дещо інший, ніж поблизу вільних поверхонь. Відповідно, в таких зонах показник заломлення має інше значення, ніж для вільної поверхні. Для оцінки протяжності таких зон і перерозподілу в них зв'язаних електричних зарядів та механічних напружень використовуємо ситему декартових координат x, y, z.

Відомо, що тверді ультрадисперсні структури є наноструктурними системами, в яких характерні розміри перехідних шарів (границь зерен, структурних елементів) відповідають діапазону 10^{-9}–10^{-7} м, тобто 1–100 нм. Виявилось, що наноструктурний стан може забезпечити принципово новий рівень властивостей і конструкційних, і функціональних матеріалів. Тому проблема генезису та еволюції наноструктурних неорганічних систем виявилась центральною з точки зору розуміння природи і можливості керувати технологічними процесами отримання наноструктурних матеріалів.

Взагалі в сучасному матеріалознавстві проблема прогнозування властивостей матеріалів і керування технологічними процесами їх отримання є центральною. Важлива роль для розв'язання відповідних питань належить оптичному методу зондування, зокрема, поверхневих шорстких шарів. Вирішення цієї проблеми можливе лише на основі певної методології, яка наповнюється конкретним змістом у кожному окремому випадку. Базуючись на понятті структури матеріалу, можна встановити функціональні зв'язки між хімічним складом та технологією і структурою, з одного боку, структурою і властивостями матеріалу – з другого боку. Технологія захисту пристрою від високих температур в цілому складається з послідовності окремих процесів, причому кожний з них істотно впливає на структуру системи. Важливим елементом технології може бути оптичний метод діагностики і контролю процесу формування матеріалу порошкової металургії, зокрема, в процесі спікання.

В місцях виходу границь зерен на поверхню дисперсного матеріалу міжфазові енергію γ_m та натяг σ_m визначимо аналогічно, як у праці [16]:

$$\gamma_m = \gamma_3 + \xi_m\gamma_4 \,; \quad \gamma_3 = \int_{-H}^{H} w_1 dx \,; \quad \gamma_4 = \int_{-H}^{H} w_2 dx \,; \quad \sigma_m = \int_{-H}^{H} \sigma_y dx \,. \tag{25}$$

Тут ξ_m , $z_e = \gamma_3/\gamma_m$ – фізичні характеристики міжфазового шару; $2H$ – ефективна товщина міжфазового шару.

Умову рівноваги міжфазового шару та наближені умови на границях (при $x = H$ та $x = -H$) запишемо так [5]:

$$\partial\gamma_m/\partial x = \partial(\gamma_3 + \xi_m\gamma_4)/\partial x = 0; \;\; \sigma_y^+ + p = 0 \;\; (x = +H)\,; \;\; \sigma_y^- + p = 0 \;\; (x = -H)\,. \tag{26}$$

Тут індекс (+) відповідає параметрам одного матеріалу, а (–) – параметрам другого.

Подамо граничні умови для межі розділу середовищ діелектрик – діелектрик [16]:

$$\varphi_{m+} + \Phi_{o+} = \varphi_{m-} + \Phi_{o-} \,; \;\; j_+ = j_- = 0; \;\; \sigma_{x+} = \sigma_{x-} , \; \sigma_{y+} = \sigma_{y-} \text{ при } (x = 0). \tag{27}$$

Тут j_+ , j_- – потоки електричних зарядів з одного середовища в інше (струми).

Співвідношення (25–27) створюють основу системи рівнянь для визначення фізичних характеристик ξ_m,

$\beta = (\beta_+, \beta_-)$, $k = (k_+, k_-)$ і товщини $2H$ поверхневого шару.

Як видно з умов на границі (27) задачі визначення розподілу зв'язаних електричних зарядів, а також механічних напружень – контактні. Таким чином, співвідношення (25)–(27) є основою контактної задачі.

Роботу адгезії σ_{ad} та енергію адгезійних зв'язків γ_{ad} системи метал (+) – метал (–) визначимо на основі співвідношень [16]:

$$\sigma_{ad} = \sigma_{h+} + \sigma_{h-} - \sigma_m , \qquad \gamma_{ad} = \gamma_+ + \gamma_- - \gamma_m . \tag{28}$$

Критерії міцності твердих тіл з урахуванням енергетичних характеристик поверхневих шарів

Розглядаємо тверді тіла при деформуванні (під впливом високої температури, зокрема, у процесі спікання). Враховуємо, що у пружній області може суттєво змінюватись поверхневий натяг. Для них при підході до границі текучості зі сторони пружної області можна користуватись критеріями [5]:

$$\Delta\sigma_h \le \Delta\sigma_h^* \ (\sigma_h = (\sigma_{11}^h + \sigma_{22}^h)/2), \ \Delta\gamma_s \le \Delta\gamma_s^*, \tag{29}$$

де σ_h – перший інваріант тензора поверхневого натягу $\hat{\sigma}_h$;

$\Delta\sigma_h$, $\Delta\gamma_s$ – зміни поверхневих натягів σ_s і енергій γ_s;

$\Delta\sigma_h^*$, $\Delta\gamma_s^*$ – граничні зміни σ_s і γ_s, що відповідають переходу поверхневого шару тіла в пластичний стан або стан, який характеризується втратою міцності (руйнуванням) під впливом високої температури.

Феноменологічний критерій міцності тіл, деформування (одновісний розтяг паралельно розміру l) яких характеризується розмірним ефектом міцності, для границь текучості $\sigma_{\rm T}$ $(\sigma_{\rm T} = \sigma^{\rm T})$ і міцності σ_p у випадку прямокутного зразка ($h \cdot b \cdot l$) запишемо у вигляді

$$\sigma_{\rm T} = \sigma_{\rm T0} + A_{\rm T}/V_3 + \delta_{\rm M}/h + \delta_\alpha \cdot (1/b + 1/l), \tag{1.30}$$

$$\sigma_p = A_p/V_3 + (2 \cdot E \cdot (k_p + 2 \cdot \psi_p \cdot (1/b + 1/h + 1/l) +$$

$$+ \gamma_p/l + 2 \cdot \varphi_p \cdot (1/b + 1/h)/l))^{0,5} = A_p/V_3 + \sqrt{M_p}. \tag{1.87}$$

Тут $V_3 = l \cdot b \cdot h$ – об'єм зразка; $\delta_{\rm M} = \gamma^* \cdot (1+v) - \gamma'$; $\delta_\alpha = 2 \cdot \gamma^* \cdot (1-v) - \gamma'$; $M_{\rm T} = \delta_{\rm M}/h + \delta_\alpha \cdot (1/b + 1/l)$; $A_{\rm T}/V_3 = B_{\rm T}/V_3 = B_{\rm P}/S_3$, якщо, наприклад, довжина досліджуваних циліндрів є постійною величиною, або зразки досить довгі; $S_3 = b \cdot h$ – площа поперечного перерізу зразка; $A_{\rm T}$, $B_{\rm T}$, $A_{\rm P}$, $B_{\rm P}$ – характеристики матеріалу для конкретного діапазону зміни розмірів.

Подані в даній статті співвідношення дозволяють прогнозувати хід технологічного процесу формування кераміки із заданою структурою і, відповідно, заданою граничною температурою, при якій вона може захищати вимірювальний пристрій (наприклад, вольфрамо-ренієву термопару) від пожежі в доменній печі.

Висновки.

1. В основу досліджень оптикоелектронномеханічних характеристик поверхневої взаємодії покладено співвідношення оптики, нерівноважної термодинаміки, фізики поверхні твердого тіла, а також відповідне інформаційне забезпечення.

2. На основі термодинамічного підходу до вивчення механоелектронних процесів у наношарах поблизу межі розділу діелектрик – діелектрик сформовано співвідношення контактної задачі і розроблено методику розрахунків для визначення розподілу зв'язаних електричних зарядів в діелектриках та відповідних механічних напружень. Методика

інформаційного забезпечення конкретних задач базується на використанні методу розкладу локальних параметрів стану в ряди за малим параметром.

3. На основі обчислювального експерименту для поверхневого шару порошкового матеріалу, фізичні характеристики якого відповідають кераміці, проведено розрахунок комплексного показника заломлення.

4. Для системи міжчастинкових контактів запропоновано використовувати механічні критерії міцності, які ґрунтуються на методиках оцінки поверхневого натягу та поверхневої енергії. Відповідні значення механічних напружень використано для оцінки комплексного показника заломлення міжфазової області.

5. На основі даних оптичного зондування і відповідної обробки результатів, отриманих з використанням приведених в даній статті співвідношень, розроблені комп'ютерні програми для контролю процесу спікання кераміки, зокрема за зміною розмірів циліндричних елементів. Це дозволяє отримати кераміку із заданими фізичними властивостями, зокрема із заданою граничною температурою, при якій вона може захищати вимірювальний пристрій (наприклад, вольфрамо-ренієву термопару) від пожежі в доменній печі.

ЛІТЕРАТУРА

1. *Скороход В.В. Реологические основы теории спекания.–К. Наук.думка,1972.–152.*
2. *Коузов П.А. Основы анализа дисперсного состава промышленных пылей и измельченных материалов. – Ленинград: Химия, 1987. – 364 с.*
3. *Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами: Пер. с англ. – Москва: Мир, 1986. – 660 с*
4. *Киттель Ч. Введение в физику твердого тела: Пер. с англ. – М.: Наука, 1978. – 792 с.*
5. *Юзевич В.М. Критерії міцності твердого тіла з урахуванням розмірного ефекту і впливу середовища//Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 1999. – № 2. – С. 80–85.*
6. *Юзевич В., Гук О., Сопрунюк П. Моделювання адгезійних зв'язків у твердих тілах з використанням методу розкладу за малим параметром // Комп'ютерна інженерія та інформаційні технології. Вісник Національного університету "Львівська політехніка". – Львів: Вид. нац. у-ту "Львівська політехніка", 2003. – № 481. – С. 58–66.*
7. *Топорец А. С. Оптика шероховатой поверхности. – Ленинград: Машиностроение, 1988. – 192 с.*
8. *Юзевич В.М. Зміна поверхневих характеристик опроміненого кварцу//Науковий вісник ЧДУ. Фізика. – Чернівці: ЧДУ, 1999. – Вип. 50. – С. 104-105.*
9. *Eustathopoulus N., Joud J.-C. Interfacial tension and adsorption of metallic systems // Current Topics in Material Science. – 1980. – Vol. 4. – P. 281–360.*
10. *Таблицы физических величин: Справочник. – М.: Атомиздат, 1976. – 1006 с.*
11. *C.W. Price, J.P. Hirth. Surface energie end surface stress tensor in an atomistic model // Surface science. – 1976. –* ***57****, № 2. —P. 509–522.*
12. *Макмиллан Н. Идеальная прочность твердых тел // Атомистика разрушения. Под ред. А.Ю. Ишлинского. – М.: Мир, 1987. – С. 35–103.*
13. *Waxler R.M., Weir C.E. Effect of hydrostatic pressure on the refractive indices of some solids // J. Res. Bur. Standards. – 1965. A69, No.4. – P. 325-333. 15. Gartney J.T., Ergun S. Optical properties of coals and graphite // Bull. Bur. Mines. – 1967. No. 641. – P. 1-49.*
14. *Halow Y.S., Zeek S.Y. Optical characteristics and Ringelman number of plumes with log-normal distributions// AIGHE Symp. Sor. – 1975. – Vol.71, No. 147. – P. 38-46.*
15. *Турчак Л. И. Основы численных методов. – Москва: Наука, 1987. – 320 с.*
16. *Юзевич В.М., Сопрунюк П.М., Коман Б. П., Луговий П. В. Енергія адгезійних зв'язків у системі мідь – тверде тіло // Український фізичний журнал. – Київ, 2005. – Т. 50, № 6. – С. 575 – 581.*