

ТЕОРИЯ ТЕРМОУПРУГОСТИ, ПОЗВОЛЯЮЩАЯ ВЫЧИСЛЯТЬ ПОВЕРХНОСТНУЮ ЭНЕРГИЮ И ЭНЕРГИЮ АДГЕЗИИ

Шоркин В. С., Фроленкова Л. Ю. Якушина С.И.

ФГОУ ВПО «Госунiversитет - учебно-научно-производственный комплекс»

302020 Орел, Россия

E-mail: VShorkin@yandex.ru, LaraFrolenkova@yandex.ru

Адгезия твердых тел

Физический энциклопедический словарь, М.: Советская энциклопедия, 1960.

«Адгезия (прилипание) – возникновение связи между поверхностными слоями двух разнородных (твердых или жидких) тел (фаз), приведенных в соприкосновение»

«С термодинамической стороны адгезия характеризуется свободной энергией адгезии F_a – убылью свободной энергии на 1 см^2 поверхности адгезионного шва в изотермическом обратимом процессе адгезии, и выражается через поверхностные натяжения $W_{p(1)}$, $W_{p(2)}$, $W_{p(1,2)}$ »

$$A = -F_a = W_{p(1,2)} - W_{p(1)} - W_{p(2)} \quad (1)$$

$A = -F_a$ – работа адгезионного отрыва.

Характеристика соединения покрытия и подложки, измеряется при нормальном отрыве или касательном сдвиге в единицах силы на единицу площади (МПа)

Е.М. Лифшиц. Теория молекулярных сил притяжения между твердыми телами, ЖЭТФ, 29, 94, 1955

«Наличие сил притяжения между нейтральными атомами приводит, естественно, к появлению аналогичных сил и между двумя макроскопическими телами, поверхности которых сближены до очень малых расстояний. Вычисление этих сил, исходя из известного взаимодействия отдельных атомов, было бы возможно, однако, лишь для достаточно разреженных тел, т.е. газов (ГАМАКЕР) – случая, который фактически, разумеется, не может быть осуществлен. К этому вопросу можно, однако, подойти и чисто макроскопическим образом (поскольку расстояние между телами предполагается большим по сравнению с междуатомными расстояниями). При этом взаимодействие тел рассматривается как осуществляющееся через посредство флуктуационного электромагнитного поля, которое всегда присутствует внутри всякой поглощающей среды и выходит также и за ее пределы – частично в виде излучаемых телом бегущих волн, частично в виде стоячих волн, экспоненциально затухающих с удалением от поверхности тела.

Основанный на таком рассмотрении метод вычисления сил взаимодействия обладает полной общностью.»

«Этот метод основан на введении в уравнения Максвелла стороннего «случайного» поля. ... Сила F взаимного притяжения, действующего на единицу поверхности каждого из тел мы вычисляем как xx – компоненту максвелловского тензора напряжений.

МАКСВЕЛЛА ТЕНЗОР НАПРЯЖЕНИЙ -:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{4\pi} \left[E_{\alpha} E_{\beta} + H_{\alpha} H_{\beta} - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} (E^2 + H^2) \right], \quad (1)$$

где E_{α} , E_{β} и H_{α} , H_{β} - компоненты электр. \mathbf{E} и магн. \mathbf{H} полей в вакууме, $\delta_{\alpha\beta}$ - символ Кронекера, $\alpha, \beta = 1, 2, 3$.

Смысл понятия «поверхностная энергия»

Л.И. Седов Механика сплошной среды, т. 2.

«В классической термоэластике полная внутренняя энергия термоупругого тела представляется в виде

$$U_T = \int_V U(\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}, s) \rho dV + U_0 = U_1 + U_0, \quad (2)$$

где $U(\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}, s)$ – некоторая определенная функция, зависящая от удельной энтропии s и компонент тензора деформации $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$, U_0 – аддитивная постоянная. В задачах «чистой» теории упругости аддитивная постоянная несущественна...

При рассмотрении развивающихся трещин – ... необходимо учитывать ... виды энергии, связанные с поверхностными эффектами, проявляющимися при нарушении целостности тела. Простейший способ учета таких эффектов можно осуществить с помощью аддитивной постоянной U_0 .»

«В дальнейшем будем трактовать U_0 как внутреннюю энергию, которая связана с понятием поверхностной энергии, *но всё же не сводится просто к этому понятию за счет более глубокого изменения структуры частиц материала в тонком поверхностном слое.*»

«Опыт и некоторые общие физические соображения позволяют сделать допущение, что

$$dU_0 = \sum_{i=1}^n \gamma_i d\Sigma_i, \quad (3.5)$$

где $d\Sigma_i$ – приращения площадей поверхностей трещин в различных частях внутри тела, а γ_i – соответствующие функции, определенные в местах образования площадок разрыва $d\Sigma_i$ (поверхностная плотность энергии на разрыв). Для тел, разрушающихся хрупким образом, во многих случаях можно считать, что γ есть просто плотность поверхностной энергии, подобная плотности энергии поверхностного натяжения для жидкостей»

«Иногда γ нельзя отождествлять с плотностью поверхностной энергии твердого тела. опыты показывают, что плотность энергии на разрыв

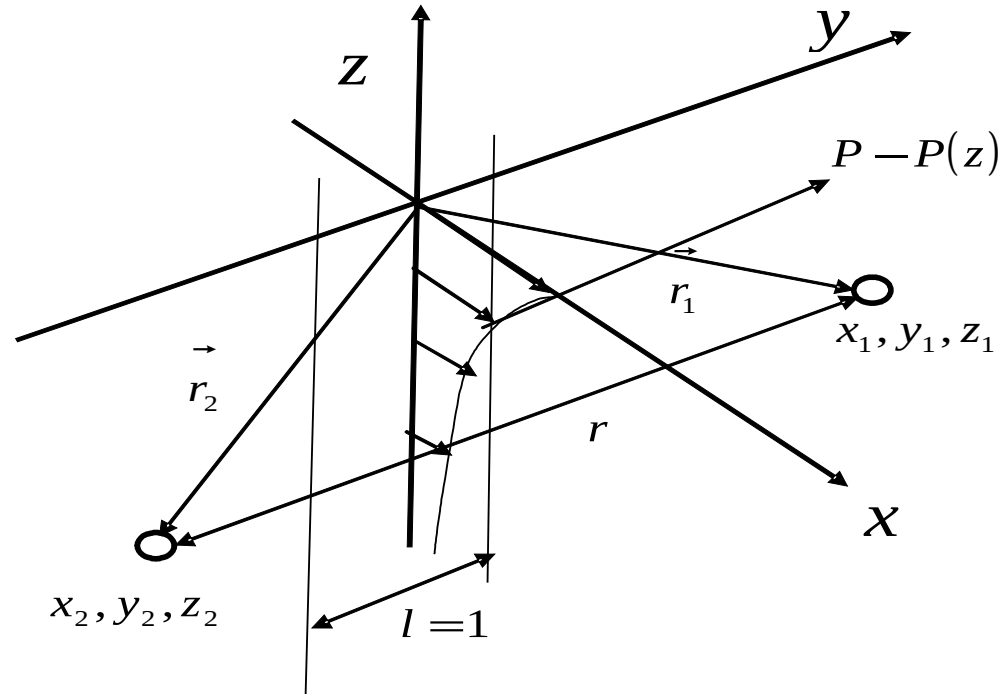
$$\gamma_{эф} = \lim_{\Delta\Sigma \rightarrow 0} \frac{\Delta U_0}{\Delta\Sigma}.$$

Во многих случаях значительно превышает плотность поверхностной энергии (например, за счет затраты дополнительной энергии на образование пластических деформаций в окрестности трещин)»

«При изучении проблем прочности экспериментальное и, может быть, теоретическое исследование величины γ должно составлять главную задачу»

2. Крокстон К. Физика жидкого состояния. Статистическое введение. М.: Мир, 1978. 400 с.

"Следуя Кирквуду и Баффу, рассмотрим гетерогенную систему, состоящую из двух фаз, и введем прямоугольную систему координат так, чтобы поверхность раздела Гиббса лежала в плоскости $x y$. При этом ось z нормальна к поверхности жидкости и направлена из жидкой фазы в газовую.



$$P = \rho k T - \frac{2\pi\rho^2}{3} \int_0^\infty \nabla_1 \Phi(r) g_{(2)}(r) r^3 dr - \text{давление в однородной фазе, } \nabla_1 \equiv \frac{d}{dr};$$

$P(z_1) = kT \rho_{(1)}(z_1) - \frac{1}{2} \int \frac{x_2^2}{r} \nabla_1 \Phi(r) \rho_{(2)}(z_1, r) d^3 r_2$ – текущее давление;

$\gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} [P - P(z)] dz$ – поверхностное натяжение.

«Фаулер ... Кирквуд и Бафф ... сузили переходную область до математической поверхности разрыва плотности, совпадающей с поверхностью раздела Гиббса. ... Для поверхностного натяжения ... Кирквуд и Бафф получают следующее выражение

$$\gamma = \frac{\pi \rho_L^2}{8} \int_0^{\infty} \nabla_1 \Phi(r) g_{(2)}^L(r) dr,$$

а для добавочной поверхностной энергии – выражение

$$u_S = -\frac{\pi \rho_L^2}{2} \int_0^{\infty} g_{(2)}^L(r) \Phi(r) r^3(r) dr \quad \gg$$

Кроме того, имеется связь

$$\frac{d(\gamma/T)}{dT} = -\frac{u_S}{T^2}, \quad \gamma(T) = \gamma_0 (1 - T/T_c)^\mu, \quad \mu = 1,24 \gg$$

Для КБ- модели всегда $\gamma_{(скачк)} > \gamma_{(эксн)}$, $u_{S(скачк)} > u_{S(эксн)}$.

[Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. т.V. Статистическая физика. Часть. I. , М.: Наука, 1976. 584 с.](#)

«Работа, затрачиваемая при обратимом изменении площади Σ на величину $d\Sigma$, может быть написана в виде

$$dR = \alpha d\Sigma \quad (154.1)$$

... α ... называется *коэффициентом поверхностного натяжения*.

Формула в точности соответствует формуле $dR = -pdV$ для работы при обратимом изменении объема тела.

Можно сказать, что α играет для поверхности такую же роль, как давление для объема»

«Рассматривается система двух изотропных фаз жидкость-пар одного и того же вещества.

Без учета поверхностных эффектов дифференциал энергии системы из двух фаз... при заданном объеме V всей системы имеет вид $dE = TdS + \mu dN$ (в равновесии температуры T и химические потенциалы μ обеих фаз одинаковы...). При учете же наличия поверхностных эффектов к правой стороне этого равенства надо, очевидно, прибавить еще выражение (154.1):

$$dE = T dS + \mu dN + \alpha d\Sigma. \quad (154.2)»$$

Все характеристики термодинамического состояния делятся на объемные и поверхностные. Но при этом возникает неопределенность из-за неопределенности толщины поверхностного слоя и количества попавших в него частиц.

«Мы сделаем разделение однозначным, подчинив его следующему естественному условию: объемы V_1 и V_2 обеих фаз определяются так, чтобы наряду с равенством $V_1 + V_2 = V$ имело место также и

равенство $n_1V_1 + n_2V_2 = N$. Эти два равенства фиксируют ... объемные значения всех ... термодинамических величин».

Методы вычисления поверхностной энергии

Магомедов М.Н. О зависимости поверхностной энергии от размера и формы нанокристалла. ФТТ, 2004, т. 46, № 5, С. 924 – 937.

«Рассмотрим систему из N одинаковых атомов при температуре T и давлении P . Изменение свободной энергии такой системы при варьировании температуры, объема V , числа атомов и площади поверхности Σ равно

$$dF(T, V, N, \Sigma) = -SdT - PdV + \mu dN + \sigma d\Sigma. \quad (1)$$

Здесь S , μ и σ – энтропия, химический потенциал удельная (на единицу площади) свободная поверхностная энергия. ... Согласно (1), функция $\sigma(T, V, N)$ определяется выражением

$$\sigma(T, V, N) = (dF / d\Sigma)_{T, V, N}. \quad (2)$$

Основная проблема всех теоретических подходов заключалась в нахождении производной $(dF / d\Sigma)$ именно при постоянных значениях объема и числа атомов в системе» ... Автор получает выражение свободной энергии нанокристалла, позволяющее вычислить производную (2).

Партенский М.Б. Самосогласованная теория металлической поверхности. УФН, 1979, т. 128, в. 1, С. 69 – 106.

«Поверхностная энергия есть работа по разделению кристалла на две части вдоль некоторой плоскости приходящаяся на единицу площади вновь образуемой поверхности. Если исходный кристалл макроскопичен и образуемые фрагменты эквивалентны, то

$$\sigma = (2\Sigma)^{-1} \{ 2(G[n] + E_{es}[n]) - (G[n^*] + E_{es}[n^*]) \}, \quad (4.4)$$

n и n^* – электронные плотности соответственно во фрагментах и в исходном кристалле, E_{es} – полная классическая кулоновская энергия положительных и отрицательных зарядов,

$$G[n] = \langle \Psi | T + V | \Psi \rangle - \frac{1}{2} \iint \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}^*)}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} (d\vec{r})(d\vec{r}^*)$$

– функционал плотности, T , V описывают кинетическую энергию и кулоновское взаимодействие электронов, $|\Psi\rangle$ – вектор основного состояния системы»

[Векилов Ю.Х., Вернер В.Д., Самсонова М.Б. Электронная структура поверхностей переходных металлов. УФН, 1987, т. 151, в. 2, С. 341-376.](#)

«В последнее время при исследовании свойств поверхностей металлов всё большее внимание уделяется изучению геометрии расположения ионов вблизи поверхностного слоя, которая может значительно отличаться от объемной и изменять физические свойства поверхности» ...

«Исправить недостатки модели парных потенциалов можно введением многочастичного взаимодействия: показано, что уже при учете трехчастичного взаимодействия ионов получается

значение Δ_{12} (расстояние между первым и вторым атомными слоями), соответствующее эксперименту»

Выводы

- 1. Возможность вычисления энергии и силы адгезии, а также свободной энергии твердого тела имеется.**
- 2. В начальном и конечном состояниях, поверхностную энергию, энергию адгезии предлагается вычислять как разность ее значений, отнесенную к единице площади образовавшейся свободной поверхности, или как производную по величине ее площади.**
- 3. Температуры элементов тела до разделения и после него, или в глубине тела и вблизи поверхности и на ней, считаются одними и теми же.**
- 4. Отмечена необходимость многочастичного взаимодействия в поверхностном слое.**
- 5. Обращено внимание на сложность учета объемных эффектов в поверхностном слое и удобство гипотезы о нулевой толщине поверхностного слоя распределения поверхностной энергии**

Сделано следующее

1. Допускается, что материал, для которого определяется поверхностная энергия является сплошным, однородным, изотропным, термоупругим.
2. Считается, что любое тело B получается путем мгновенного изотермического выделения из бесконечно протяженной среды (тела) Ω . Отсчетным для него является то термодинамическое состояние, которым оно обладало бы, находясь в составе тела Ω , отсчетной конфигурацией – конфигурация внутри Ω . При этом внешние воздействия отсутствуют, температура T равна T_0 . Свойства тела Ω являются известными. Тело B занимает в отсчетном состоянии ($t = 0$) область V (объем), а в текущем – $V_t = V(t)$ ($t > 0$, t – момент времени, в который тело B находится в текущем состоянии). Границами этих областей являются гладкие поверхности (площади) A и $A_t = A(t)$.
3. Предполагается, что процесс выделения B из Ω происходит мгновенно, изотермически. После этого часть $C = \Omega \setminus B$, дополняющая B в Ω , мгновенно удаляется от B на бесконечность.
4. При вычислении поверхностной энергии σ возможны варианты.
- 4.1. Для полубесконечного тела B , ограниченного плоскостью A , поверхностная энергия σ при $t = 0 + 0$:

$$\sigma = \lim_{A \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \left[\int_V (F_p^* - F_p^0) dV \right]. \quad (1)$$

Здесь $F_p^* = F_p^*(\mathbf{r})$, $F_p^0 = F_p^0(\mathbf{r})$ – объемные плотности распределения потенциальной энергии в теле B сразу после его выделения ($t = 0 + 0$) и непосредственно перед ним ($t = 0 - 0$). Положения частиц до выделения \mathbf{r} и после него \mathbf{R} , совпадают: $\mathbf{R} = \mathbf{r}$.

4.2. В случае криволинейной поверхности A :

$$\int_A \sigma dA = \int_V w_p dV, \quad \text{где } w_p = F_p^* - F_p^0. \quad (2)$$

Тогда:

$$\begin{aligned} \exists a = a(r): \quad \sigma &= n \cdot a, \\ \int_A \sigma dA &= \int_A n \cdot a dA \rightarrow \sigma = n \cdot a \quad \text{и} \quad \text{div } a = w_p \\ \exists \Psi = \Psi(r): \quad a &= \text{grad } \Psi \end{aligned} \quad (3)$$

После этого поверхностная энергия определяется как решение задачи:

$$\text{grad div } \Psi = w_p, \quad (4)$$

Поскольку важна только нормальная составляющая вектора a считается:

$$r = r_A \rightarrow \Psi = \text{const} = 0, \quad (5)$$

После этого:

$$\sigma = n \cdot \text{grad } \Psi. \quad (6)$$

При $t > 0$ тело V деформируется, в нем меняется распределение температуры.

4.3. Допускается, что при $t \rightarrow \infty$ динамический процесс затухает, если он проходит адиабатически, то

$$\forall t > 0: \quad \sigma = \lim_{A \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \left[\int_V (F - F^0) dV \right], \quad F = F(R(t)). \quad (7)$$

5. Объемная плотность свободной энергии равна

$$F = F_p + F_f + F_e. \quad (8)$$

Для неметаллов $F_e = 0$.

$$F_f = \sum_{j=1}^{3n} \frac{1}{2} h \nu_j + \frac{27 n k T}{\nu_D^3} \int_0^{\nu_D} \nu^2 \ln(1 - e^{-h\nu/kT}) d\nu, \quad F_e = \frac{3}{5} n_e \mu_0 \left[1 - \frac{5}{12} \left(\frac{\pi k T}{\mu_0} \right)^2 \right] \quad (9)$$

n – среднее число атомов и n_e – число свободных электронов в единице объема; h и k соответственно постоянные Планка и Больцмана; ν – возможное значение частоты колебаний атомов, заключенное в пределах от нуля до частоты обрезания Дебая ν_D ; ν_j – частота моды с номером j , число которых в единице объема равно $3n$; μ_0 – энергия Ферми.

6. Величина $F_p = F_p(\mathbf{R}(t))$ в любой момент времени определяется формулой

$$F_p(\mathbf{R}) = \int_{V_t} \left[\frac{1}{2!} \Phi^{(2)}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) + \frac{1}{3!} \int_{V_t} \Phi^{(3)}(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3) dV_{t3} \right] dV_{t2}, \quad (10)$$

где $\Phi^{(2)}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) dV_{t1} dV_{t2}$, $\Phi^{(3)}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) dV_{t1} dV_{t2} dV_{t3}$ – потенциалы парного и тройного взаимодействия.

$$F_p^* = F_p^*(r) = F_p(\mathbf{R}(t=0+0)) = F_p(r), \quad (11)$$

$$\text{когда } \Phi^{(2)}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \Phi^{(2)}(r_1, r_2), \quad \Phi^{(3)}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) = \Phi^{(3)}(r_1, r_2, r_3), \quad V_t = V. \quad (12)$$

$$F_p^0 = F_p^0(r) = F_p(\mathbf{R}(t=0-0)) = F_p(r), \quad (13)$$

$$\text{когда } \Phi^{(2)}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \Phi^{(2)}(r_1, r_2), \quad \Phi^{(3)}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) = \Phi^{(3)}(r_1, r_2, r_3), \quad V_t = \Omega. \quad (14)$$

7. Выражения для потенциалов $\Phi^{(k)}$, $k = 2, 3$, постулируются. Для изотропной однородной среды принято

$$\Phi^{(2)}(R_1, R_2) = \Phi^{(2)}(L_{12}), \quad \Phi^{(3)}(R_1, R_2, R_3) = \Phi^{(3)}(L_{12}, L_{13}). \quad (15)$$

Вид функций при деформировании не меняется.

7.1. По аналогии с учетом ванн-дер-ваальсова взаимодействия частиц радиуса $r_0 = 0,5 l_0$ с объемом $dV_k \approx \Delta V_k = (4/3)\pi r_0^3$ дискретной среды принято:

$$\Phi^{(2)} = \frac{H^{(2)}}{(l_{ij} + l_0)^6}, \quad \Phi^{(3)} = \frac{H^{(3)}(3 \cos \vartheta_i \cos \vartheta_j \cos \vartheta_k + 1)}{(l_{ij} + l_0)^9}. \quad (16)$$

Здесь i, j, k – номера взаимодействующих частиц, $i, j, k = 1, 2, 3$; $l_0 = \sqrt[3]{n} = L_0|_{R=r}$, ϑ_i – угол между векторами l_{ij} и l_{ik} ; $H^{(2)}$, $H^{(3)}$ – константы.

$$\left(\frac{4\pi r_0^3}{3}\right)^2 H^{(2)} = \frac{3}{\pi} \int_0^\infty \alpha^2(i\omega) d\omega, \quad (17)$$

$$\left(\frac{4\pi r_0^3}{3}\right)^3 H^{(3)} = \frac{3}{\pi} \int_0^\infty \alpha^3(i\omega) d\omega$$

Зависимость поляризуемости материала $\alpha(\omega)$ от частоты ω флуктуационных колебаний внутреннего электрического поля известны.

7.2. Потенциалы $\Phi^{(2)}$ и $\Phi^{(3)}$ определяются формулами:

$$\Phi^{(2)} = D^{(2)} \left(e^{-2\xi l_1} - 2e^{-\xi l_1} \right), \quad \Phi^{(3)} = D^{(3)} \left(e^{-2\xi l_1} - 2e^{-\xi l_1} \right) \left(e^{-2\xi l_2} - 2e^{-\xi l_2} \right). \quad (18)$$

Параметры $D^{(2)}$, $D^{(3)}$, ξ определены, опираясь на данные механических экспериментов.

За время $t \rightarrow 0$ после момента $t = 0 + 0$ тело B испытывает изменение температуры $\Theta(\mathbf{r}, t) = T(\mathbf{r}, t) - T_0$ и относительное смещение частиц

$$\Delta \vec{u} = \vec{u}_2 - \vec{u}_1 = \vec{u}(\vec{r} + \vec{l}) - \vec{u}(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left(\nabla^n \vec{u} \right)_{l=0}^{\vec{n} \text{ раз } \rightarrow} \cdot \dots \cdot \vec{l}^n, \quad (19)$$

$l \equiv l_{12} \equiv l_2 = r_2 - r_1$, $r_1 \equiv r$ – радиус-вектор центра инерции произвольной частицы dB_2 относительно частицы $dB_1 \equiv dB$.

Получаем, что $F = F\left(T, \left\{ \nabla^n \vec{u} \right\}\right)$. Полагая эту функцию полиномом второй степени от $\Theta = T - T_0$, и $\left\{ \nabla^n \vec{u} \right\}$, можно получить, что объемная плотность приращения свободной энергии при переходе из промежуточного состояния в текущее определяется выражением

$$w = w\left(\Theta, \left\{ \nabla^n \vec{u} \right\}\right) = S_0 \Theta + \sum_{n=1}^{\infty} P^{0(n)} \cdot \dots \cdot \left(\nabla^n \vec{u} \right)^T + \frac{1}{2} \sum_{m,n=1}^{\infty} \left(\nabla^m \vec{u} \right)^{m \text{ раз}} \cdot \dots \cdot C^{(n,m)} \cdot \dots \cdot \left(\nabla^n \vec{u} \right)^T + \frac{1}{2} \frac{c_\varepsilon}{T_0} \Theta^2 + \\ + \frac{1}{2} \left[\sum_{m,n=1}^{\infty} \Theta B^{(n)} \cdot \dots \cdot \left(\nabla^n \vec{u} \right)^T + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\nabla^m \vec{u} \right)^{m \text{ раз}} \cdot \dots \cdot B^{(n)T} \Theta \right]. \quad (20)$$

При этом тензоры напряжений $\mathbf{P}^{(n)}$ и энтропия S (в отсчетном состоянии считается равной нулю) определяются формулами

$$\mathbf{P}^{(n)} = \frac{\partial F}{\partial (\nabla^n \mathbf{u})}, \quad \mathbf{P}^{(n)} = \mathbf{P}^{0(n)} - \mathbf{B}^{(n)} \Theta + \sum_{m=1}^{\infty} (\nabla^m \vec{\mathbf{u}})^{m \text{ раз}} \dots \mathbf{C}^{(m,n)}, \quad (21)$$

$$S = \sum_{m=1}^{\infty} (\nabla^m \vec{\mathbf{u}}) \dots \mathbf{B}^{(m)} + c_\varepsilon \frac{\Theta}{T}. \quad (22)$$

При этом уравнения притока тепла и равновесия принимают вид:

$$\lambda \cdot (\nabla^2 \Theta) - c_\varepsilon \frac{d\Theta}{dt} - T_0 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{d(\nabla^m \vec{\mathbf{u}})^{m \text{ раз}}}{dt} \dots \mathbf{B}^{(m)} = -\vartheta; \quad (23)$$

$$\nabla \cdot \left\{ \mathbf{P}^{(1)} - \nabla \cdot \left[\mathbf{P}^{(2)} \cdot \nabla \left(\mathbf{P}^{(3)} - \dots \right) \right] \right\} + \vec{\mathbf{f}} = \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt}; \quad \mathbf{r} \in V, \quad (24)$$

$$\vec{\mathbf{n}} \cdot \left[\mathbf{P}^{(1)} - \nabla \cdot \left(\mathbf{P}^{(2)} - \dots \right) \right] - \nabla_A \cdot \left[\vec{\mathbf{n}} \cdot \left(\mathbf{P}^{(2)} - \dots \right) \right] = \Pi^{(0)} \equiv \vec{\boldsymbol{\sigma}}; \quad \mathbf{r} \in A, \quad (25)$$

$$\vec{\mathbf{n}} \cdot \left[\mathbf{P}^{(2)} - \nabla \cdot \left(\mathbf{P}^{(3)} - \dots \right) \right] - \nabla_A \cdot \left[\vec{\mathbf{n}} \cdot \left(\mathbf{P}^{(3)} - \dots \right) \right] = \Pi^{(1)} \equiv \mathbf{N}; \quad \mathbf{r} \in A. \quad (26)$$

Изменение плотности ρ учитываются законом сохранения массы (Седов Л. И. Механика сплошной среды. – СПб.: Издательство "Лань", 2004. – Т. 1. – 528 с.)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{\mathbf{v}}) = 0, \quad \rho = \text{const}. \quad (27)$$

Для выполнения закона сохранения момента импульса необходима симметрия тензора

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^{(1)} - \nabla \cdot \left(\mathbf{P}^{(2)} - \nabla \cdot \left(\mathbf{P}^{(3)} - \dots \right) \right).$$

(28)

Для функций $\Phi^{(2)}$, $\Phi^{(3)}$ допускаются представление рядами Тейлора, в которых сохранены лишь слагаемые со степенью $(\Delta u_{1k})^n$ не выше второй. В результате:

$$w_p = \frac{1}{2!} \int_V \left[(\nabla_2 \Phi^{(2)}) \circ \Delta \vec{u}_{12}^T + \frac{1}{2!} \Delta \vec{u}_{12} \circ (\nabla_2^2 \Phi^{(2)}) \circ \Delta \vec{u}_{12}^T \right] dV_2 + \frac{1}{3!} \int_V \left\{ \left[\sum_{p=2}^3 (\nabla_p \Phi^{(3)}) \circ \Delta \vec{u}_{1p}^T + \frac{1}{2!} \sum_{i,j=2}^3 \Delta \vec{u}_{1i} \circ (\nabla_i \nabla_j \Phi^{(3)}) \circ \Delta \vec{u}_{1j}^T \right] dV_3 \right\} dV_2, \quad (29)$$

$$\nabla_n = \frac{d}{d l_{1n}} = (-1)^{n+1} \frac{d}{d r}, \quad n = 2, 3.$$

С учетом этого:

$$B^{(n)} = - \left. \frac{\partial P^{0(n)}}{\partial T} \right|_{T=T_0}, \quad P^{0(n)} = P_p^{0(n)} + P_e^{0(n)} + P_f^{0(n)}, \quad C^{(n,m)} = C_p^{(n,m)}, \quad (30)$$

$$P^{r0(n)} = \frac{1}{2!} \int_V \frac{1}{n!} (\nabla_2 \Phi^{(2)}) \vec{l}_{12}^n dV_2 + \frac{1}{3!} \sum_{p=2}^3 \int_V \left[\int_V \frac{1}{n!} (\nabla_p \Phi^{(3)}) \vec{l}_{1p}^n dV_3 \right] dV_2, \quad (31)$$

$$P_e = \frac{2n_e \mu_0}{5} \left[1 + \frac{5}{12} \left(\frac{\pi k T}{\mu_0} \right)^2 \right], \quad P_f = \frac{9nk \theta_D \gamma}{x_D} \int_0^{x_D} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad (32)$$

$$C_p^{(n,m)} = \frac{1}{2!} \int_V \frac{1}{m!n!} \vec{l}_1^n (\nabla_1^2 \Phi^{(2)}) \vec{l}_1^m dV_1 + \frac{1}{3!} \sum_{p,q=1}^2 \int_V \left[\int_V \frac{1}{m!n!} \vec{l}_p^n (\nabla_p \nabla_q \Phi^{(3)}) \vec{l}_q^m dV_1 \right] dV_2. \quad (33)$$

Классический тензор упругих постоянных $C_{cl} = (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k \mathbf{e}_m) [C_{cl}]_{ijrm}$, $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ – ортонормированный базис, $i, j, k, m = 1, 2, 3$, тензору $C^{(1,1)} = (\vec{\mathbf{e}}_i \vec{\mathbf{e}}_j \vec{\mathbf{e}}_k \vec{\mathbf{e}}_m) [C^{(1,1)}]_{ijklm}$, должен совпадать с тензором (33).

Матрицы этих тензоров $[C_{cl}]_{ijrm}$ и $[C^{(1,1)}]_{ijklm}$ имеют вид:

$$[C_{k\lambda}^{(1,1)}]_{ijklm} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix}, \quad (34)$$

$$[C^{(1,1)}]_{ijklm} = \begin{bmatrix} \eta + \chi + \varepsilon & (\eta + \chi)/3 + \varepsilon & (\eta + \chi)/3 + \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ (\eta + \chi)/3 + \varepsilon & \eta + \chi + \varepsilon & (\eta + \chi)/3 + \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ (\eta + \chi)/3 + \varepsilon & (\eta + \chi)/3 + \varepsilon & \eta + \chi + \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (\eta + \chi)/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (\eta + \chi)/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (\eta + \chi)/3 \end{bmatrix}. \quad (35)$$

Здесь: λ, μ – коэффициенты Ламе.

$$\eta = \frac{2\pi}{5} J, \quad \chi = \frac{16\pi}{15} J_{11}, \quad \varepsilon = \frac{16\pi^2}{27} J_{12}, \quad J = -\int_0^\infty l_{12}^4 \frac{d^2 \Phi^{(2)}(l_{12})}{d l_{12}^2} d l_{12}, \quad (36)$$

$$J_{11} = -\int_0^\infty \left(\int_0^\infty l_{12}^4 \frac{\partial^2 \Phi^{(2)}(l_{12})}{\partial l_{12}^2} d l_{12} \right) l_{13}^2 d l_{13}, \quad J_{12} = -\int_0^\infty \left(\int_0^\infty l_{12}^3 \frac{\partial^2 \Phi^{(2)}(l_{12})}{\partial l_{12} \partial l_{12}} d l_{12} \right) l_{13}^3 d l_{13}, \quad (37)$$

$$\frac{2\pi}{15} J + \frac{16\pi^2}{45} J_{11} + \frac{16\pi^2}{27} J_{12} = \lambda, \quad \frac{2\pi}{15} J + \frac{16\pi^2}{45} J_{11} = \mu. \quad (38)$$

Параметр ξ определен на основании описания нелинейного дисперсионного закона для плоских продольных упругих волн высокой частоты с точки зрения предложенной модели и с точки зрения физики твердого тела.

$$\beta \approx \frac{45\sqrt{3}}{2l_0}. \quad (39)$$

8. При вычислении энергии адгезии используются потенциалы, описывающие взаимодействие частиц разных материалов (α) и (β) (аналогия с Бараш Ю. С. Силы Ван-дер-Ваальса. – М.: Наука, 1988. – 344 с.):

$$\Phi_{(\alpha\beta)}^{(2)} = \frac{H_{(\alpha\beta)}^{(2)}}{\left(l_{(\alpha)ij} + l_{0(\alpha)} \right)^3 \left(l_{(\beta)ji} + l_{0(\beta)} \right)^3}, \quad (40)$$

$$\Phi_{(\alpha\beta\gamma)}^{(3)} = \frac{H_{(\alpha\beta\gamma)}^{(3)} \left(3 \cos \vartheta_i \cos \vartheta_j \cos \vartheta_k + 1 \right)}{\left(l_{(\alpha)ij} + l_{0(\alpha)} \right)^3 \left(l_{(\beta)jk} + l_{0(\beta)} \right)^3 \left(l_{(\gamma)kj} + l_{0(\gamma)} \right)^3}. \quad (41)$$

$$\left(\frac{4\pi r_{0(\alpha,\beta)}^3}{3}\right)^2 H_{(\alpha\beta)}^{(2)} = \frac{3}{\pi} \int_0^\infty \alpha_{(\alpha)}(i\omega) \alpha_{(\beta)}(i\omega) d\omega, \quad (42)$$

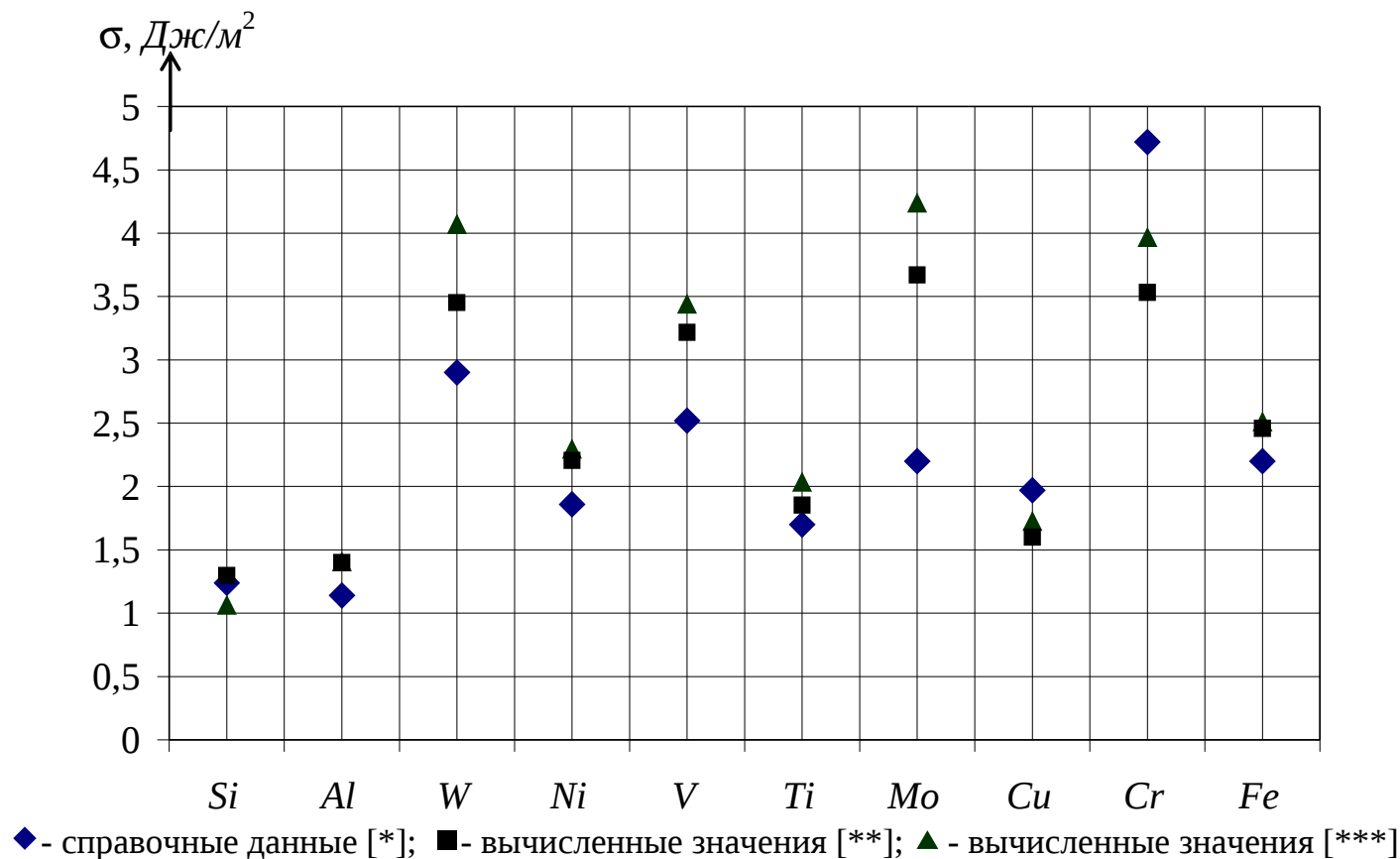
$$\left(\frac{4\pi r_{0(\alpha,\beta)}^3}{3}\right)^3 H_{(\alpha\beta\gamma)}^{(3)} = \frac{3}{\pi} \int_0^\infty \alpha_{(\alpha)}(i\omega) \alpha_{(\beta)}(i\omega) \alpha_{(\gamma)}(i\omega) d\omega. \quad (43)$$

Здесь $\alpha, \beta, \gamma = 1, 2$ – номер материала.

Допускается также, что вступающие в адгезионный контакт тела $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ образовались одновременно в момент времени $t = 0$, а в момент $t = 0 + 0$, непосредственно следующий за моментом $t = 0$, образовалось тело $B_{(1)} \sqcup B_{(2)}$. При этом деформации и изменения температуры отсутствуют. Каждая частица $dB_{(\alpha)} \subset B_{(\alpha)}$, $\alpha = 1, 2$, мгновенно, наряду с взаимодействием с другими частицами $dB_{(\alpha)1} \subset B_{(\alpha)}$ и парами частиц $dB_{(\alpha)1}, dB_{(\alpha)2} \subset B_{(\alpha)}$, начинает взаимодействовать с частицами $dB_{(\beta)1} \subset B_{(\beta)}$, $\beta = 1, 2$, $\beta \neq \alpha$, и парами частиц $dB_{(\alpha)1} \subset B_{(\alpha)}$, $dB_{(\beta)2} \subset B_{(\beta)}$, а также $dB_{(\beta)1} \subset B_{(\beta)}$, $dB_{(\alpha)2} \subset B_{(\alpha)}$ и $dB_{(\beta)1}, dB_{(\beta)2} \subset B_{(\beta)}$. Изменение их свободной энергии, происходящее в этом процессе, определяется выражением:

$$\begin{aligned} \Delta F_{(1,2)} = \int_{A_a} F_a dA = & \frac{1}{2!} \sum_{\alpha,\beta=1}^2 \int_{V_{(\alpha)}} \int_{V_{(\beta)}} \Phi_{(\alpha\beta)}^{(2)} dV_{(\alpha)} dV_{(\beta)1} + \frac{1}{3!} \int_{V_{(\alpha)}} \int_{V_{(\beta)}} \int_{V_{(\gamma)}} \Phi_{(\alpha,\beta,\gamma)}^{(3)} dV_{(\alpha)} dV_{(\beta)1} dV_{(\gamma)2} - \\ & - \sum_{\alpha=1}^2 \left[\int_{V_{(\alpha)}} dV_{(\alpha)} \left(\int_{V_{(\alpha)}} \Phi_{(\alpha,\alpha)}^{(2)} dV_{(\alpha)1} + \int_{V_{(\alpha)}} dV_{(\alpha)2} \int_{V_{(\alpha)}} \Phi_{(\alpha,\alpha,\alpha)}^{(3)} dV_{(\alpha)1} \right) \right]. \end{aligned} \quad (44)$$

В случае, когда тела $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ полубесконечны, а поверхность A_a адгезионного контакта – плоскость, распределение величины F_a вдоль нее можно считать равномерным.



*Свойства элементов. Физические свойства: Справочник. / Е. Б. Самсонов.– М.: Металлургия, 1976. – 600 с.

** Магомедов М. Н.

*** Фроленкова Л. Ю., Шоркин В. С.

Таблица 1 – Результаты расчета энергии адгезии для некоторых пар материалов

Состав системы	Энергия адгезии F_a	
	по литературным данным [*]	рассчитанная
<i>Cu-Al</i>	3,10	2,978
<i>Fe-Cu</i>	4,00	3,763
<i>Cr-Fe</i>	5,00	5,286

*Вакилов А. Н., Мамонова М. В., Прудников В.В. Адгезия металлов и полупроводников в рамках диэлектрического формализма // Физика твердого тела. – 1997. – т. 39. – № 6. – С. 964 – 967.

Спасибо за внимание

