

УДК 539.3

Л.Ю. Фроленкова, В.С. Шоркин

Государственный университет – учебно-научно-производственный комплекс, Орел, Россия

**МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИИ
И ЭНЕРГИИ АДГЕЗИИ УПРУГИХ ТЕЛ**

Существует ряд задач, для успешного решения которых необходимо знать поверхностную энергию, энергию и силы адгезии и когезии. Примером является задача о расслоении композитов. В выражение энергетического критерия прочности входит суммарная поверхностная энергия контактирующих элементов или энергия адгезии. Эти величины определить методами классической теории упругости невозможно. Силовые критерии прочности используют значения предельных напряжений – сил адгезии и когезии. Обычно их определяют экспериментально, что не всегда возможно или экономически невыгодно.

В работе предложен метод расчета поверхностной энергии и энергии адгезии упругих тел, находящихся в состоянии адгезии. Учтено следующее. Распределенная по границе тела суммарная поверхностная энергия равна распределенному по его объему изменению свободной энергии, произошедшему при образовании границы. При адгезии двух тел вдоль поверхности контакта формируется переходный слой. В нем физические и термодинамические свойства одного тела непрерывно переходят в свойства другого тела. Метод базируется на варианте градиентной модели сплошной упругой среды. В ее основе лежит предположение о многочастичном потенциальном нелокальном взаимодействии бесконечно малых частиц, составляющих среду. Дополнительные к классическим характеристики упругого состояния вычисляются с помощью дифференцирования известного выражения объемной плотности распределения свободной энергии. Оно строится на основании дополнительных гипотез о составе среды: упругая часть, фононный и электронный (для металлов) газы.

Ключевые слова: адгезия, термоупругость, нелокальное многочастичное взаимодействие, градиентная среда, поверхностная энергия, энергия адгезии, переходный слой.

L. Yu. Frolenkova, V. S. ShorkinState University-Education-Science-Production Complex,
Orel, Russian Federation**METHOD OF CALCULATING THE SURFACE
AND ADHESION ENERGIES OF ELASTIC BODIES**

There are a number of problems for successful solutions to be aware of the surface energy, the energy and the force of adhesion and cohesion. An example is that of the bundle composites. The expression of the energy strength criterion is the total surface energy of the contacting elements or energy of adhesion. These values are determined by methods of the classical theory of elasticity is impossible. Power strength criteria using the limit values of powers – forces of adhesion and cohesion. They are usually determined experimentally, it is not always possible or economically unprofitable.

The authors proposed a method for calculating the surface and adhesion energies of elastic bodies in a state of adhesion. It was considered by the authors as follows. Distributed over the boundary of the total surface energy is distributed over its volume free energy change occurring during the formation of the border. The adhesion of the two bodies along the contact surface is formed by a transition layer. In its physical and thermodynamic properties of one body continuously into the properties of another body. The method is based on a variant of the gradient model of continuous elastic medium. It is based on the assumption of many-potential nonlocal interaction infinitely small particles that make up the environment. More to the classic characteristics of the elastic state is calculated by differentiating the known expression bulk density of free energy. It is built on the basis of additional assumptions about the composition of the medium: the elastic part, the phonon and electron (for metals) gases.

Keywords: adhesion, thermoelasticity, nonlocal multiparticle interaction, gradient, surface energy, adhesion, transition layer.

Введение

Необходимость определения прочности адгезионных соединений элементов композиционных материалов, тонкопленочных покрытий и основы, деталей и элементов конструкций существует и актуальна в самых разных отраслях техники. Существует немало ситуаций, когда экспериментальное изучение явления адгезии экономически не выгодно или невозможно. Поэтому актуален теоретический расчет ее характеристик.

Явление адгезии изучается физикой твердого тела [1]. В случаях конструкционных материалов с их сложным химическим составом и структурой для описания явления адгезии удобен феноменологический подход, используемый термодинамикой сплошных сред. С этой точки зрения учет адгезии при контактном взаимодействии рассматривался в целом ряде работ (например, [2–8]).

Предлагаемый метод позволяет рассчитать поверхностную энергию и энергию адгезии на основе моделирования причин, порождающих адгезию, и дополнить результаты упомянутых выше работ возможностью количественной оценки величин поверхностной энергии и энергии адгезии.

1. Модель упругой среды

В данной работе используется следующее представление.

Пусть $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ – два твердых тела, вступивших в адгезионный контакт вдоль поверхности $A_{(1,2)}$; $P_{(k)} = \{p_{n(k)}\}$, $n=1, \dots, N$ – система параметров, характеризующих физические свойства тела с номером $k=1, 2$; $Q_{(k)} = \{q_{m(k)}\}$, $m=1, \dots, M$ – система термодинамических пара-

метров того же тела. До образования адгезионного контакта параметры $p_{n(k)}$ и $q_{m(k)}$ имеют вполне определенное стационарное, равновесное распределение внутри каждого из тел $B_{(k)}$. После вступления тел $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ в адгезионный контакт поверхность $A_{(1,2)}$, оказавшаяся в первый момент поверхностью разрыва распределений $p_{n(k)}$ и $q_{m(k)}$, с течением времени размывается. В окрестности ее первоначального положения возникает слой эффективной толщины h (так как четкой границы нет). Его физические и термодинамические параметры $P_{(1,2)} = \{p_{n(1,2)}\}$ и $Q_{(1,2)} = \{q_{m(1,2)}\}$ являются переходными от параметров тела $B_{(1)}$ к параметрам тела $B_{(2)}$. Если зависимости $p_{n(1,2)}(\mathbf{r})$ (\mathbf{r} – радиус-вектор точки в отсчетном состоянии) являются непрерывными, то можно говорить о полной адгезии. Если же часть из них при переходе через поверхность $A_{(1,2)}$ имеет конечный разрыв, то можно говорить о частичной адгезии. При этом зависимости $q_{m(1,2)}(\mathbf{r})$ в любом случае во всем переходном слое остаются непрерывными.

Адгезия твердых тел и сопровождающие ее термомеханические явления в предлагаемой работе описаны на основании модели термоупругой среды, представленной в работе [9].

Бесконечно малые частицы $dB_{(k)} \equiv dB_{0(k)}$ создают вокруг себя бесконечно протяженное поле, посредством которого они осуществляют парное, тройное и т.д. взаимодействия с частицами как своего, так и любого другого тела. Потенциалы $d^{(n+1)}\Psi_{(k,p)}^{(n+1)} = \Phi_{(k,p)}^{(n+1)} dV_{0(k)} dV_{1(k)} \dots dV_{m(k)} \times \dots \times dV_{m+1(p)} \dots dV_{n(p)}$ взаимодействия частицы $dB_{0(k)} \equiv dB_{(k)}$, занимающей объем $dV_{0(k)} \equiv dV_{(k)}$, с m частицами тела с номером $k=1,2$ и с $n-m$ частицами тела с номером $p=1,2$ предполагаются пропорциональными произведению объемов всех взаимодействующих частиц. Коэффициенты пропорциональности (далее потенциалы)

$$\Phi_{(k,p)}^{(n)} = \Phi_{(k,p)}^{(n)} (\mathbf{R}_{0(k)}, \mathbf{R}_{1(k)}, \dots, \mathbf{R}_{m(k)}, \mathbf{R}_{m+1(p)}, \dots, \mathbf{R}_{n(p)}) \quad (1.1)$$

зависят от положений этих частиц в текущей конфигурации взаимодействующих тел.

В однородной изотропной среде, рассматриваемой в [9] и данной работе, потенциалы $\Phi_{(k,p)}^{(n)}$ зависят лишь от расстояний $L_{q(p,k)} = |\mathbf{R}_{q(p)} - \mathbf{R}_{0(k)}|$ между центрами масс частиц $dB_{0(k)}$ и $dB_{q(p)}$ ($q=1, \dots, n$). При этом для изотропной среды потенциалы $\Phi_{(k,p)}^{(n)}$ обладают шаровой симметрией, что обеспечивается их зависимостью только от $L_{q(p)} = |\mathbf{R}_{q(p)} - \mathbf{R}_{0(k)}|$. Для однородной среды форма потенциала не зависит от положения $\mathbf{R}_{0(k)}$.

Индивидуализация зависимостей (1.1) для каждого материала ($k=p$) и любой пары разных материалов ($k \neq p$) осуществляются на основании данных экспериментов. Одним из возможных вариантов является постулирование вида зависимости с последующим подбором совокупности параметров $G_{(k,p)} = \{g_{i(k,p)}\}$, $i=1, \dots, I$, индивидуализирующих его [9, 10].

Относительные положения частиц в отсчетном состоянии $\mathbf{l}_{q(p,k)} = \mathbf{r}_{q(p)} - \mathbf{r}_{0(k)}$, $\mathbf{r}_{0(k)} \equiv \mathbf{r}_{(k)}$ известны. В текущем состоянии векторы

$$\mathbf{L}_{q(p,k)} = \mathbf{R}_{q(p)} - \mathbf{R}_{0(k)} = (\mathbf{r}_{q(p)} - \mathbf{r}_{0(k)}) + (\mathbf{u}_{q(p)} - \mathbf{u}_{0(k)}) = \mathbf{l}_{q(p,k)} + \Delta \mathbf{u}_{q(p,k)},$$

$$\mathbf{R}_{0(k)} \equiv \mathbf{R}_{(k)}, \quad \mathbf{u}_{0(k)} \equiv \mathbf{u}_{(k)}$$

выражаются через векторы относительных смещений $\Delta \mathbf{u}_{q(p,k)} = \mathbf{u}_{q(p)} - \mathbf{u}_{(k)}$. Предполагается, что перемещение $\mathbf{u}_{q(p)}(\mathbf{r}_{q(p)}) = \mathbf{u}_{q(p)}(\mathbf{r}_{(k)} + \mathbf{l}_{q(p,k)})$ разложимо в ряд Тейлора по внешним степеням вектора $\mathbf{l}_{q(p,k)}$. Так что относительное смещение $\Delta \mathbf{u}_{q(p,k)} = \mathbf{u}_{q(p)} - \mathbf{u}_{(k)}$ частиц $dB_{q(p)}$ и $dB_{(k)} \equiv dB_{0(k)}$ определяется равенством

$$\Delta \mathbf{u}_{q(p,k)} = \mathbf{u}_{q(p)} - \mathbf{u}_{(k)} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j!} (\nabla^j \mathbf{u}_{(k)}) \cdot \overbrace{\dots}^{j \text{ раз}} \cdot \mathbf{l}_{q(p,k)}^j,$$

где Δ – знак приращения; (\cdot) – знак свертки; $\overbrace{\dots}^{j \text{ раз}}$ – выполнение свертки j раз; \mathbf{l}^j и ∇^j – внешние j -е степени векторов \mathbf{l} и ∇ соответственно; $\nabla = d\dots/d\mathbf{r}$ – дифференциальный оператор Гамильтона, означающий

дифференцирование по векторному аргументу \mathbf{r} ; $(\nabla^j \mathbf{u})$ – j -й градиент вектора перемещений $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, определенный в точке $\mathbf{r} \in V$ при $\mathbf{l} = 0$.

Пусть $\|\nabla^j \mathbf{u}_{(k)}\| = \left[\sum_{i_1, \dots, i_j=1}^3 u_{(k)i_1 \dots i_j}^2 \right]^{1/2}$ – норма градиента $\nabla^j \mathbf{u}_{(k)}$ (i – номер компоненты вектора $\mathbf{u}_{(k)}$ в ортонормированном базисе $\mathbf{e}_i, i=1,2,3$); индексы после запятой i_1, \dots, i_j означают номера координат x_1, x_2 или x_3 , по которым производится дифференцирование ($i_1, \dots, i_j = 1, 2, 3$)).

Допускается, что для этого процесса выполняются неравенства

$$\|\nabla^j \mathbf{u}_{(k)}\| D^{j-1} \ll 1 \quad j=1, 2, \dots, \quad (1.2)$$

где D – характерный размер области, в которой происходит изучаемый процесс.

На основании (1.2) допускается, что потенциал (1.1), определенный в текущей конфигурации, отличается от того же потенциала, определенного в отсчетной конфигурации ($\mathbf{R}_{q(p)} = \mathbf{r}_{q(p)}$, $\mathbf{R}_{0(k)} = \mathbf{r}_{0(k)} \equiv \mathbf{r}_{(k)}$), на величину $\Delta \Phi_{(k,p)}^{(n)}$, являющуюся полиномом второй степени по отношению к $\Delta \mathbf{u}_{q(p,k)}$ – начальной частью разложения изменения потенциала по внешним степеням относительных смещений взаимодействующих частиц.

$$\Delta \Phi_{(k,p)}^{(n)} = \sum_{q=1}^n (\nabla_{\mathbf{l}_q} \Phi_{(k,p)}^{(n)}) (\Delta \mathbf{u}_{q(p,k)}) + \frac{1}{2!} \sum_{q,r=1}^n (\Delta \mathbf{u}_{q(p,k)}) (\nabla_{\mathbf{l}_q \mathbf{l}_r}^2 \Phi_{(k,p)}^{(n)}) (\Delta \mathbf{u}_{r(p,k)}), \quad (1.3)$$

где $\nabla_{\mathbf{l}_q} = d \dots / d \mathbf{l}_q$, $\nabla_{\mathbf{l}_q \mathbf{l}_r}^2 = d^2 / d \mathbf{l}_q d \mathbf{l}_r$.

Процесс деформирования сопровождается теплопередачей и температурными изменениями от исходного значения $T_{0(k)}$ до текущего значения

$$T_{(k)} = T_{0(k)} + \Theta_{(k)}. \quad \text{При этом предполагается, что } \frac{\Theta_{(k)}}{T_{0(k)}} = \frac{T_{(k)} - T_{0(k)}}{T_{0(k)}} \ll 1.$$

В качестве отсчетной конфигурации и начального термодинамического состояния выбираются те конфигурация и состояние, которые имело бы изучаемое тело $B_{(k)}$ в составе гипотетической бесконечно

протяженной, однородной, изотропной, находящейся в равновесном термодинамическом состоянии среды $\Omega_{(k)}$. Считается, что тело $B_{(k)}$ выделено из среды $\Omega_{(k)}$ сначала мысленно, когда в его состоянии ничего не изменилось, а затем реально за счет совершения механической работы.

Система термодинамических параметров $Q_{(k)} = \{q_{m(k)}\}$, $m=1, \dots, M$ состоит из температуры $T_{(k)}$ и последовательности градиентов перемещений $\{\nabla^k \mathbf{u}_{(k)}\}$, образующих базисную систему независимых параметров, а также зависящих от них объемной плотности свободной энергии $F_{(k)} : F_{(k)} = F_{(k)}(T_{(k)}, \{\nabla^j \mathbf{u}_{(k)}\})$ и энтропии $S_{(k)} : S_{(k)} = S_{(k)}(T_{(k)}, \{\nabla^k \mathbf{u}_{(k)}\})$.

Уравнение движения в напряжениях имеет вид

$$\nabla \cdot \left(P_{(k)}^{(1)} - \nabla \cdot \left(P_{(k)}^{(2)} - \nabla \cdot \left(P_{(k)}^{(3)} - \dots \right) \right) \right) + \mathbf{f}_{(k)} = \rho_{(k)} \mathbf{a}_{(k)}, \quad (1.4)$$

где $P_{(k)}^{(m)}$, $m = 1, 2, 3, \dots$ – тензор внутренних напряжений; $\mathbf{f}_{(k)}$ – объемная плотность внешних сил; $\mathbf{a}_{(k)}$ – ускорение; $\rho_{(k)}$ – плотность. В момент времени $t = t_{0(k)}$ задаются начальные условия распределения перемещений и скоростей частиц тела $B_{(k)}$, занимающего область $V_{(k)}$:

$$\mathbf{u}_{(k)}(\mathbf{r}, t_{0(k)}) = \mathbf{u}_{0(k)}(\mathbf{r}), \quad \left. \frac{\partial \mathbf{u}_{(k)}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|_{t=t_{0(k)}} = \mathbf{v}_{0(k)}(\mathbf{r}). \quad (1.5)$$

В любой момент времени на свободной от контакта части поверхности $A_{(k)}$ каждого из тел $B_{(k)}$ (в отсутствие контакта $A_{(k)}$ – полная поверхность) задаются краевые условия

$$\mathbf{n}_{(k)} \cdot \left[P_{(k)}^{(1)} - \nabla \cdot \left(P_{(k)}^{(2)} - \dots \right) \right] - \nabla_A \cdot \left[\mathbf{n}_{(k)} \cdot \left(P_{(k)}^{(2)} - \dots \right) \right] = \Pi_{(k)}^{(0)} \equiv \boldsymbol{\tau}_{(k)} \quad \text{или} \quad \mathbf{u}_{(k)} = \mathbf{u}_{A(k)}; \quad (1.6)$$

$$\mathbf{n}_{(k)} \cdot \left[P_{(k)}^{(2)} - \nabla \cdot \left(P_{(k)}^{(3)} - \dots \right) \right] - \nabla_A \cdot \left[\mathbf{n}_{(k)} \cdot \left(P_{(k)}^{(3)} - \dots \right) \right] = \Pi_{(k)}^{(1)} \quad \text{или} \quad \nabla_{\mathbf{n}} \mathbf{u}_{(k)} = \Gamma_{A(k)}; \quad (1.7)$$

.....,

где $\Pi_{(k)}^{(0)} \equiv \boldsymbol{\tau}_{(k)}$ – классические поверхностные силы; $\Pi_{(k)}^{(m)}$, $m=1, 2, \dots$ – тензоры, характеризующие высшие неклассические поверхностные

взаимодействия, способные совершать работу на определенных на граничной поверхности тензорных характеристиках неравномерности распределения перемещений в ее окрестности: $\nabla_{\mathbf{n}} \mathbf{u}_{(k)} = \Gamma_{A(k)}, \dots$

Система (1.4)–(1.7) дополняется условием инвариантности потенциальной энергии по отношению к жестким движениям тела B , которое выражается в условии симметрии тензора $P_{(k)} = P_{(k)}^{(1)} - \nabla \cdot (P_{(k)}^{(2)} - \nabla \cdot (P_{(k)}^{(3)} - \dots))$.

Замыкание системы (1.4)–(1.7) осуществляется путем использования соотношения

$$P^{(n)} = P^{0(n)} - B^{(n)} \Theta + \sum_{m=1}^{\infty} (\nabla^m \vec{u}) \overbrace{\dots}^{m \text{ раз}} C^{(m,n)}. \quad (1.8)$$

При получении этого соотношения, а также аналогичного соотношения для энтропии

$$S = S_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (\nabla^m \vec{u}) \overbrace{\dots}^{m \text{ раз}} B^{(m)} + c_\varepsilon \frac{\Theta}{T_0} \quad (1.9)$$

(c_ε – удельная теплоемкость материала при отсутствии деформаций) учтено, что дифференциал функции $F_{(k)} = F_{(k)}(T_{(k)}, \{\nabla^j \mathbf{u}_{(k)}\})$ является полным. При этом для ее приращения справедливо выражение, совпадающее по форме с (1.3). Так что коэффициенты разложений (1.8), (1.9) определяются равенствами

$$P^{0(n)} = \frac{\partial F}{\partial (\nabla^n \mathbf{u})}, \quad C^{(m,n)} = \frac{\partial^2 F}{\partial (\nabla^m \mathbf{u}) \partial (\nabla^n \mathbf{u})}, \quad (1.10)$$

$$B^{(n)} = - \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial (\nabla^n \mathbf{u})} = - \frac{\partial P^{(n)}}{\partial \Theta}. \quad (1.11)$$

Вычисления в (1.10) и (1.11) должны проводиться для случая, когда $T_{(k)} = T_{0(k)}$, $\nabla^n \mathbf{u}_{(k)} = 0$.

Используется также уравнение притока тепла

$$\lambda \cdot (\nabla^2 \Theta) - c_\varepsilon \frac{\partial \Theta}{\partial t} - T_0 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\partial (\nabla^m \mathbf{u})}{\partial t} \overbrace{\dots}^{m \text{ раз}} B^{(m)} = -\mathfrak{Q}. \quad (1.12)$$

Здесь ϑ – с объемной плотностью скорости возникновения тепла. Начальным условием для него является требование $\Theta=0$. В любой последующий момент на границах тела задаются значения температуры или нормальной составляющей теплового потока.

Как отмечено в [11], вычисления можно провести, если известна зависимость объемной плотности свободной энергии от температуры и конфигурации деформированного состояния. В работе [10] предложено считать

$$F = F^r + F^f + F^e . \quad (1.13)$$

Здесь второе и третье слагаемые – свободную энергию фононного и электронного газов соответственно – предложено вычислять по известным из физики выражениям [12]. Первое слагаемое в (1.13) – потенциальная энергия, определяется выражением

$$F_{(k)}^r = \sum_{j=1}^{n-1} \int_V \Phi_{(k,p)}^{(j+1)}(T_{0(k)}, L_{1(k,k)}, \dots, L_{n-1(k,p)}) \overbrace{dV_{1(k)} \dots dV_{j(p)}}^{j \text{ раз}}, \quad V = \begin{cases} V_{(k)} \cup V_{(p)}, & k \neq p, \\ V_{(k)}, & k = p. \end{cases}$$

Потенциал парного взаимодействия $\Phi_{(k,k)}^{(2)}$ можно выбрать, например, в форме, аналогичной форме потенциала Морзе [9, 13] в физике твердого тела,

$$\Phi_{(k,p)}^{(2)} = \Phi_{0(k,p)}^{(2)} \left(e^{-2\beta_{(k,p)} L_{1(p,k)}} - 2e^{-\beta_{(k,p)} L_{1(p,k)}} \right).$$

Для n – частичного взаимодействия предполагается [14]

$$\Phi_{(k,p)}^{(n)} = \Phi_{0(k,p)}^{(n)} \prod_{j=1}^{n-1} \left(e^{-2\beta_{(k,p)} L_{j(p,k)}} - 2e^{-\beta_{(k,p)} L_{j(p,k)}} \right).$$

Если $k=p$ (рассматривается взаимодействие частиц из одного материала), то параметр $\beta_{(k,k)}$ предложено определить методами физики твердого тела [9, 15] через характеристики потенциального взаимодействия атомов и среднее межатомное расстояние $l_{0(k,k)}$, определенное при температуре $T_{0(k,k)}$.

Параметры $\Phi_{0(k,k)}^{(2)}$ и $\Phi_{0(k,k)}^{(3)}$ можно выразить через модуль Юнга $E_{(k)}$ и коэффициент Пуассона $\nu_{(k)}$ [9].

При этом предполагается, что переходной группы физических параметров между $P_{(1)}$ и $P_{(2)}$ нет.

2. Поверхностная энергия

Поверхностная энергия W_p равна изменению свободной энергии рассматриваемого тела в изотермическом обратимом процессе образования единицы площади его свободной поверхности A [16]. Суммарное изменение свободной энергии H_p при образовании всей поверхности A (суммарная поверхностная энергия) определяется поверхностным интегралом

$$H_p = \int_A W_p dA.$$

С другой стороны [17–22], это изменение свободной энергии оказывается сосредоточенным в трехмерном поверхностном слое. Ввиду неопределенности его границ [16] это изменение свободной энергии можно считать распределенным по всему объему V изучаемого тела B . Если H – суммарная свободная энергия тела B , а ΔH – ее изменение, возникшее при образовании A и распределившееся по области V с объемной плотностью w ($w = w(\mathbf{R})$, $\mathbf{R} \in V$, \mathbf{R} – радиус-вектор точки области V в конечном состоянии тела B , $\Delta H = \int_V w dV$), то, приравняв ΔH и H_p , можно получить интегральное уравнение для определения W_p (при условии известности распределения w по области V):

$$\int_A W_p dA = \int_V w dV. \quad (2.1)$$

Обычно считается, что вдоль поверхности A величина W_p не меняется и является физической характеристикой материала (например, [23, 24]). В физических расчетах [1, 22] область V в прямоугольных декартовых координатах (x_1, x_2, x_3) задается в виде

$$V: 0 < x \equiv x_1 < +\infty, -\infty < x_2, x_3 < +\infty; A: x \equiv x_1 = 0. \quad (2.2)$$

В данной работе сформулируем задачу по расчету распределения W_p вдоль криволинейной поверхности A .

Функция $W_p = W_p(\mathbf{R})$ определена на двумерной гладкой замкнутой области A . Для этой функции всегда можно найти такую векторную функцию $\mathbf{a} = \mathbf{a}(\mathbf{R})$, которая определена на трехмерной области V , непрерывна и дифференцируема в каждой внутренней ее точке, а на границе A удовлетворяет условиям

$$W_p = \mathbf{n} \cdot \mathbf{a}, \quad \mathbf{a} - \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{a}) = \mathbf{0}. \quad (2.3)$$

Подставляя первое из равенств в левый интеграл равенства (2.1), можно получить

$$\int_A \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} \, dA = \int_V w \, dV, \quad \int_V \operatorname{div} \mathbf{a} \, dV = \int_V w \, dV. \quad (2.4)$$

Для векторного поля $\mathbf{a} = \mathbf{a}(\mathbf{R})$ всегда можно найти такое скалярное поле $\Psi = \Psi(\mathbf{R})$, $\mathbf{R} \in V$, [25], что

$$\mathbf{a} = \operatorname{grad} \Psi, \quad \Psi(\mathbf{R})_{\mathbf{R} \in A} = 0. \quad (2.5)$$

Равенство (2.1) считается справедливым для сплошных тел B произвольных размеров с произвольной формой гладкой границы A . Поэтому учет (2.5) для второго из интегралов (2.4) приводит к классической краевой задаче для функции $\Psi = \Psi(\mathbf{R})$:

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} \Psi = w, \quad \Psi(\mathbf{R})_{\mathbf{R} \in A} = 0. \quad (2.6)$$

Задача (2.6) имеет решение и притом единственное. Значит, существует и единственно решение задачи (2.3)–(2.6) по определению распределения поверхностной энергии вдоль свободной от внешних воздействий поверхности A .

В частном случае, когда область V определена выражением (2.2) (полубесконечное тело), а значение w зависит лишь от расстояния x до плоской границы A , решение задачи (2.3)–(2.6) имеет вид

$$W_p = \int_0^{\infty} w(x) \, dx. \quad (2.7)$$

Это выражение совпадает с тем, которое используется для расчета поверхностной энергии методами физики твердого тела [1, 22].

Вычисление поверхностной энергии путем решения задачи (2.3)–(2.6) или с помощью (2.7) можно осуществить, если известно распределение $w = w(\mathbf{R})$, $\mathbf{R} \in V$.

Сразу после мгновенного выделения $B_{(k)}$ из $\Omega_{(k)}$ взаимное расположение его частиц и температура остались теми, которыми они обладали в составе $\Omega_{(k)}$. Поэтому различие свободных энергий тела $B_{(k)}$ в состояниях перед реальным выделением и после него обусловлено только разницей потенциальных энергий, возникшей в теле $B_{(k)}$ за счет удаления частиц, принадлежащих дополнению $B_{(k)}$ в составе $\Omega_{(k)}$. С учетом этого

$$w_{(k)} = \sum_{j=1}^{n-1} \left[\int_{\Omega_{(k)}} \Phi_{(k,k)}^{(j+1)}(T_{0(k)}, L_{1(k,k)}, \dots, L_{n-1(k,k)}) dV_{1(k)} \dots dV_{n-1(k)} - \int_{V_{(k)}} \Phi_{(k,k)}^{(j+1)}(T_{0(k)}, L_{1(k,k)}, \dots, L_{n(k,k)}) dV_{1(k)} \dots dV_{n-1(k)} \right]. \quad (2.8)$$

Момент выделения $B_{(k)}$ из $\Omega_{(k)}$ служит началом переходных процессов. Эти процессы, а также распределение $w_{(k)}(\mathbf{r})$ в каждый момент времени можно рассчитать после решения начально-краевой задачи (1.4)–(1.12).

Предполагается, что решение системы (1.4)–(1.12) имеет предел при $t \rightarrow \infty$, совпадающий с решением системы, получаемой из (1.4)–(1.12) путем исключения из нее слагаемых, содержащих производные по времени.

Если обмена энергии у тела $B_{(k)}$ после его образования не было, то суммарная поверхностная энергия в любой момент времени является одной и той же.

3. Адгезия твердых тел

Процесс вступления в адгезионный контакт тел $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ можно условно разбить на этапы.

Первый этап – образование участков свободных поверхностей: $A_{(1,2)}$ у тела $B_{(1)}$ и $A_{(2,1)}$ у тела $B_{(2)}$, вдоль которых происходит адгезионный контакт. В процессе первого этапа у каждого из тел $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ формируются их поверхностные энергии $W_{p(1)}$ и $W_{p(2)}$.

Второй этап – «жизнь» тел $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ с «намеченными» участками контакта $A_{(1,2)}$ и $A_{(2,1)}$ без взаимодействия между собой. В процессе второго этапа тела могут подвергаться внешним воздействиям. Из-за этого могут меняться их термоупругое состояние, физические свойства, свободная энергия. А следовательно, и поверхностная энергия $W_{p(k)}$.

Третий этап начинается, когда реального контакта поверхностей еще не произошло, но тела $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ приблизились друг к другу бесконечно близко. Тела $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ начинают воздействовать друг на друга посредством силовых полей.

Четвертый этап заключается в формировании адгезионного контакта. Он начинается в момент касания поверхностей $A_{(1,2)}$ и $A_{(2,1)}$ и заканчивается формированием трехмерного переходного слоя $B_{(1,2)}$ между телами $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$, не имеющего четких границ. Далее предполагается следующее.

Считается, что поверхности $A_{(1,2)}$ и $A_{(2,1)}$ конгруэнтны. Случай неконгруэнтности анализируется в работах [2, 4, 5], далее не рассматривается.

Переходный слой является трехмерным, в специальную область с особыми термоупругими свойствами не выделяется. Случай, когда его толщина h фиксируется с постулированием распределения свойств материала по нему или когда $h=0$, а свойства материала при пересечении слоя меняются скачком, не рассматривается. Большое внимание рассмотрению таких слоев уделено в работах [7, 8, 26]. Не рассматривается также случай, когда одно из тел «выращивается» на поверхности другого [27].

Допускается, что тела $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ выделяются из бесконечных сред $\Omega_{(1)}$ и $\Omega_{(2)}$ одновременно в момент времени $t=0$. В момент $t=0+0$ они сначала мгновенно сблизилась на бесконечно близкое расстояние, а затем вступили в адгезионный контакт сразу вдоль обеих поверхностей $A_{(1,2)}$ и $A_{(2,1)}$.

Мгновенность выделения $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ из $\Omega_{(1)}$ и $\Omega_{(2)}$ с мгновенным их сближением и соединением обеспечивает адиабатичность процесса

бесконечно близкого сближения и последующего вступления в адгезионный контакт. Поэтому энергетические изменения, произошедшие в системе тел $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ за время от их мысленного выделения в бесконечных средах до вступления в адгезионный контакт, можно связывать исключительно с процессами отделения $B_{(k)}$ от $\Omega_{(k)}$ и образования из-за адгезии единого тела $B = B_{(1)} \cup B_{(2)}$.

У частиц тел $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ в этот момент вновь (после выделения) мгновенно меняется число окружающих их соседей, при этом деформации и изменения температуры отсутствуют. Каждая частица $dB_{(k)} \subset B_{(k)}$, $k=1,2$, мгновенно, наряду с взаимодействием с другими частицами $dB_{(k)1} \subset B_{(k)}$ и парами частиц $dB_{(k)1}$, $dB_{(k)2} \subset B_{(k)}$, начинает взаимодействовать с частицами $dB_{(p)1} \subset B_{(p)}$, $p=1,2$, $p \neq k$ и парами частиц $dB_{(k)1} \subset B_{(k)}$, $dB_{(p)2} \subset B_{(p)}$, а также $dB_{(p)1} \subset B_{(p)}$, $dB_{(k)2} \subset B_{(k)}$ и $dB_{(p)1}$, $dB_{(p)2} \subset B_{(p)}$. Потенциалы этих взаимодействий предполагаются известными.

Изменение их свободной энергии, происходящее в ходе этого процесса, определяется выражением, аналогичным выражению (2.8), но более общим, учитывающим взаимное влияние частиц разных тел:

$$\begin{aligned} \Delta F_{(1,2)} &= \int_{A(1,2)} F_a dA_{(1,2)} = \sum_{k=1}^2 \int_{V_{(k)}} w_{a(k)} dV_{(k)} = \\ &= \sum_{k=1}^2 \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\Omega_{(k)}} \Phi_{(k,k)}^{(j+1)}(T_{0(k)}, l_{1(k,k)}, \dots, l_{n-1(k,k)}) dV_{(k)} \cdot \dots \cdot dV_{n-1(k)} - \\ &- \sum_{k,p=1}^2 \sum_{j=1}^{n-1} \frac{1}{(j+1)!} \int_{V_{(k)}} \Phi_{(k,p)}^{(j+1)}(T_{0(k)}, L_{1(k,p)}, \dots, L_{n(k,p)}) dV_{1(k)} \cdot \dots \cdot dV_{n-1(p)}. \end{aligned}$$

После мгновенного присоединения тел $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$ друг к другу в следующий за этим момент времени при их адгезии начинает формироваться переходный слой $B_{(1,2)}$. При вступлении в состояние адгезии на поверхности контакта, по предположению, мгновенно начинают выполняться условия непрерывности термодинамических параметров.

Далее рассматривается объединенное тело $B = B_{(1)} \cup B_{(2)}$, занимающее в отсчетном состоянии область $V = V_{(1)} \cup V_{(2)}$, ограниченную со стороны $B_{(1)}$ поверхностью $A_{a(1)}$, а со стороны $B_{(2)}$ поверхностью $A_{a(2)}$. Тела граничат между собой вдоль поверхности $A_{a(1,2)}$.

Пусть $w_{a(k)} = F_{aV(k)} - F_{\Omega(k)}$ – объемная плотность изменения свободной энергии тела $B_{(k)}$ к моменту времени t , отсчитываемому от момента его выделения из $\Omega_{(k)}$, а $W_{ap(k)}$ – его поверхностная энергия (вдоль поверхности $A_{a(1,2)}$). Из-за соединения тел $B_{(k)}$ в единое целое $w_{a(k)} \neq w_{(k)}$ и $W_{ap(k)} \neq W_{p(k)}$ как на участках $A_{a(k)}$, так и, тем более, на участке $A_{a(1,2)}$. Несмотря на это, для каждой из частей $B_{(k)}$, $k=1,2$, объединенного тела $B = B_{(1)} \cup B_{(2)}$ справедливы соотношения (2.1)–(2.7) с той лишь разницей, что входящие в них величины относятся к состоянию адгезии. При этом выражение (2.7) относится только к части $A_{a(k)}$ поверхности тела $B_{(k)}$. На оставшейся его части $A_{(1,2)}$ должно выполняться условие сопряжения для полей $\Psi_{a(k)}(t, \mathbf{r})$. Если контакт есть, но адгезии нет, то сопряжения полей $\Psi_{a(k)}(t, \mathbf{r})$ нет. Таким образом, задача о распределении поверхностной энергии тел $B_{(k)}$ в случае, когда они находятся в состоянии адгезии, приобретает вид (2.4), (2.5).

Условия сопряжения, накладываемые на распределения $\Psi_{a(k)}(t, \mathbf{r})$, предлагается принять в виде

$$\Psi_{a(1)}(t, \mathbf{r}) = \Psi_{a(2)}(t, \mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in A_{(1,2)}; \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial n} \Psi_{a(1)}(t, \mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial n} \Psi_{a(2)}(t, \mathbf{r}) \quad \mathbf{r} \in A_{(1,2)}. \quad (3.2)$$

Условие (3.1) соответствует условию непрерывности изменения характеристик материала и его термодинамического состояния при пересечении переходного слоя. Условие (3.2) соответствует равенству поверхностных энергий тел $B_{(k)}$ по обе стороны поверхности $A_{(1,2)}$. В соответствии с методом сжатия переходного слоя [28] это является

условием определения поверхности $A_{(1,2)}$ в объединенном теле $B = B_{(1)} \cup B_{(2)}$. В общем случае она не совпадает с исходным положением. В рассматриваемой ситуации это совпадение допускается.

Если сложить найденные величины $W_{ap(1)}$ и $W_{ap(2)}$ для точек поверхности $A_{(1,2)}$, то можно получить приходящееся на единицу ее площади изменение свободной энергии $W_{p(1,2)}$ системы $B = B_{(1)} \cup B_{(2)}$ по отношению к свободной энергии совокупности несоединенных тел $B_{(k)}$. При этом энергия адгезии $F_a = W_{p(1,2)} - W_{p(1)} - W_{p(2)}$.

Для проведения расчетов поверхностной энергии $W_{ap(k)}(t, \mathbf{r})$ необходимо произвести расчет распределения $w_{a(k)}(t, \mathbf{r})$. Для этого решается сопряженная задача следующего вида.

В каждой из областей $V_{(k)}$ выполняются балансовые соотношения для импульса (1.4) и энергии (1.12) с учетом выражений (1.8)–(1.11). В выражениях (1.8)–(1.11), в отличие от ситуации с одиночными телами $B_{(k)}$, необходимо учесть их взаимное влияние. Предполагается, что в любой момент времени после вступления тел в адгезионный контакт взаимное влияние осуществляется только за счет потенциальных полей, создаваемых частицами тел $B_{(k)}$. Таким образом, в выражениях (1.10), (1.11) необходимо учитывать, что

$$F_{(k)} = F^e + F^f + \sum_{p=1}^2 \sum_{j=1}^{n-1} \int_{V_{(k)}} \Phi_{(k,p)}^{(j+1)}(T_{0(k)}, L_{1(k,p)}, \dots, L_{n(k,p)}) dV_{1(k)} \dots dV_{n-1(p)}.$$

Здесь, как и ранее, величины F^e и F^f определяются из [12].

На свободных от взаимного контакта участках границ $A_{a(k)}$ выполняются краевые условия для внутренних напряжений (1.6), (1.7) или перемещений, а также условия, накладываемые на поле температур $T_{(k)} = T_{A(k)}$ или тепловых потоков $\lambda_{(k)} \frac{dT_{(k)}}{dn_{(k)}} = q_{A(k)}$ ($T_{A(k)}, q_{A(k)}$ должны быть заданы). На поверхности $A_{(1,2)}$ задаются условия сопряжения.

$$\Theta_{(1)} + T_{0(1)} = \Theta_{(2)} + T_{0(2)}; k_{(1)} \left(\frac{\partial \Theta_{(1)}}{\partial n} + \frac{\partial T_{0(1)}}{\partial n} \right) = k_{(2)} \left(\frac{\partial \Theta_{(2)}}{\partial n} + \frac{\partial T_{0(2)}}{\partial n} \right); \quad (3.3)$$

$$\mathbf{u}_{(1)}(\mathbf{r}) - \mathbf{u}_{(2)}(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\tau} u_{\tau_A}(\mathbf{r}) + \mathbf{n} u_{n_A}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in A_{(1,2)};$$

$$\mathbf{n} \cdot (P_{(1)}^{(1)} - \nabla \cdot P_{(1)}^{(2)}) - \nabla_A \cdot (\mathbf{n} \cdot P_{(1)}^{(2)}) = \mathbf{n} \cdot (P_{(2)}^{(1)} - \nabla \cdot P_{(2)}^{(2)}) - \nabla_A \cdot (\mathbf{n} \cdot P_{(2)}^{(2)}); \quad (3.4)$$

$$\nabla \mathbf{u}_{(1)}(\vec{r}) - \nabla \mathbf{u}_{(2)}(\mathbf{r}) = \tilde{C}(\mathbf{r}), \quad \tilde{C}(\mathbf{r}) = c(\mathbf{r})(\mathbf{n}\mathbf{n}) + \varepsilon(\mathbf{r})(\boldsymbol{\tau}\boldsymbol{\tau}); \quad \mathbf{n} \cdot P_{(1)}^{(2)} = \mathbf{n} \cdot P_{(2)}^{(2)}; \quad (3.5)$$

$$S_{(1)} = S_{(2)}; \quad F_{(1)} = F_{(2)}. \quad (3.6)$$

Варьируя функционал, определяющий свободную энергию объединенного тела $B = B_{(1)} \cup B_{(2)}$, а также его частей $B_{(1)}$ и $B_{(2)}$, можно получить выражение

$$\begin{aligned} & \left\{ (\mathbf{n}_{(1,2)} \cdot \mathbf{q}_{(1)}) \delta T_{(1)} + (\mathbf{n}_{(2,1)} \cdot \mathbf{q}_{(2)}) \delta T_{(2)} \right\} + \left\{ \left[\mathbf{n}_{(1,2)} \cdot (P_{(1)}^{(1)} - \nabla \cdot P_{(1)}^{(2)}) - \nabla_A \times \right. \right. \\ & \left. \left. \times (\mathbf{n}_{(1,2)} \cdot P_{(1)}^{(2)}) \right] \cdot \delta \mathbf{u}_{(1)} + \left[\mathbf{n}_{(2,1)} (P_{(2)}^{(1)} - \nabla \cdot P_{(2)}^{(2)}) - \nabla_A (\mathbf{n}_{(2,1)} \cdot P_{(2)}^{(2)}) \right] \delta \mathbf{u}_{(2)} \right\} + \\ & + \left\{ (\mathbf{n}_{(1,2)} \cdot P_{(1)}^{(2)}) \cdot \delta (\nabla_{\vec{n}} \mathbf{u}_{(1)}) + (\mathbf{n}_{(2,1)} \cdot P_{(2)}^{(2)}) \cdot \delta (\nabla_{\vec{n}} \mathbf{u}_{(2)}) \right\} + \dots = 0. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Допускается, что адгезионный контакт наступает мгновенно. При этом на границе контакта мгновенно начинают выполняться условия адгезии – непрерывность изменения характеристик термодинамического состояния при переходе через поверхность контакта. Это означает, что, во-первых, на поверхности контакта выполняются равенства (3.6). Во-вторых, что вариация свободной энергии равна нулю. В-третьих, что вариации параметров термодинамического состояния материала по обе стороны от поверхности контакта равны между собой как соответствующие одному и тому же состоянию элементарной частицы, разделенной поверхностью контакта. Равенство вариаций

$$\delta T_{(1)} = \delta T_{(2)}; \quad \delta \mathbf{u}_{(1)} = \delta \mathbf{u}_{(2)}; \quad \delta (\nabla_{\mathbf{n}} \mathbf{u}_{(1)}) = \delta (\nabla_{\mathbf{n}} \mathbf{u}_{(2)}) \quad (3.8)$$

означает, что варьируемые величины могут отличаться друг от друга на заранее известную функцию. Это приводит к появлению первых равенств в каждой из пар (3.3)–(3.5). Вместе с тем произвол каждой из вариаций в совмещении с равенствами (3.7) и (3.8) приводит к появлению вторых равенств в каждой из пар (3.3)–(3.5).

Условия (3.4), (3.5) содержат неизвестные функции: $\frac{\partial T_{0(1)}}{\partial n} - \frac{\partial T_{0(2)}}{\partial n}$,

$T_{0(1)} - T_{0(2)}$, $u_{\tau A}(\mathbf{r})$, $u_{nA}(\mathbf{r})$, $c(\mathbf{r})$, $\varepsilon(\mathbf{r})$. Первые две из этих функций определяются исходными распределениями температур в каждом из вступивших в контакт тел. При определении остальных четырех функций предлагается учесть соотношения (3.6) и равенство (3.2), свидетельствующее о том, что поверхностные энергии $W_{ap(k)}(\mathbf{r})$ вдоль $A_{(1,2)}$ равны между собой. Кроме того, предлагается использовать суммарную оценку полученной или отданной энергии к моменту расчета, в частности адиабатичность процесса.

4. Примеры расчета поверхностной энергии и энергии адгезии конкретных материалов. Сопоставление с известными значениями

Для иллюстрации изложенных выше теоретических рассуждений предлагаются примеры расчета в простейших ситуациях.

Делается несколько упрощающих ситуацию допущений. Рассматриваются не только парные, но и тройные взаимодействия частиц. Ограничение только парным взаимодействием приводит к одному и тому же для всех материалов значению коэффициента Пуассона, равному 0,25.

Напряженное состояние описывается при этом тензорами $P_{(k)}^{(1)}$ и $P_{(k)}^{(2)}$, являющимися обобщенными силами, работающими на выбранных первом и втором градиентах перемещений как на обобщенных перемещениях.

Выбрана специальная форма тела $B_{(k)}$: тело $B_{(k)}$ считается полубесконечным. Мысленно выделенное тело $B_{(k)}$ занимает область

$$V_{(k)}: 0 < x_{(k)1} < b_{(k)1}; -b_{(k)2,3} < x_{(k)2,3} < +b_{(k)2,3}.$$

Полубесконечность означает, что граница $x_{(k)1} = 0$ для него фиксирована, а границы $x_{(k)1} = b_{(k)1}$, $x_{(k)2,3} = \pm b_{(k)2,3}$ стремятся в бесконечность: какие бы большие значения числа $b_{(k)1,2,3}$ ни приняли, всегда найдется хотя бы одна частица $dB_{(k)} \subset B_{(k)}$, центр масс которой находится за пределами указанных границ.

Пока тело $B_{(k)}$ находится в составе $\Omega_{(k)}$, окруженное таким же материалом, из которого состоит само, его поверхностная энергия $W_{p(k)}$ на любом участке границы равна нулю. Допускается, что среда $\Omega_{(k)}$ плоскостью $x_{(k)1}=0$ разделяется на две части $\frac{1}{2}\Omega_{(k)}$, мгновенно удаляемые друг от друга. Тогда у тела $B_{(k)}$, как и у всей части $\frac{1}{2}\Omega_{(k)}$, один из участков границы становится свободным от внешних воздействий. Что соответствует выделению в среде $\frac{1}{2}\Omega_{(k)}$ и в $B_{(k)}$ преимущественного направления $x_{(k)1}$, вдоль которого могут меняться характеристики напряженно-деформированного и термодинамического состояний. Поэтому на других участках границы тела $B_{(k)}$ по-прежнему $W_{p(k)}=0$, так как в направлениях нормалей к ним ничего не изменилось по сравнению с состоянием до разделения $\Omega_{(k)}$ на две половины.

С учетом этого делаются допущения, уменьшающие влияние на результаты расчетов внешних факторов, а также их математическую сложность.

Моменты выделения тел $B_{(k)}$ совпадают между собой и с моментом вступления в адгезионный контакт.

Момент времени, в который производится расчет адгезионных характеристик, отстоит от момента контакта тел бесконечно далеко, а переходные процессы затухают.

Начальные температуры и энтропии совпадают и сохраняются постоянными.

Допускается также, что $u_{\tau A}(\mathbf{r})=0$, $\varepsilon(\mathbf{r})=0$. Эти допущения делают процесс описания адгезии полностью одномерным, когда для решения задач о поверхностной энергии и энергии адгезии достаточно полагать

$$\mathbf{u}_{(k)} = \mathbf{n}_{(k,m)} u_{(k)}, \quad k, m = 1, 2, \quad k \neq m.$$

Подобные допущения используются при решении аналогичной задачи в физике [1, 22]. Рассогласование значений свободной энергии рассматриваемых тел в начале указанных процессов и в конце их пренебрежимо мало.

С учетом изложенного легко получить расчетные соотношения задачи о вычислении поверхностной энергии и задачи о вычислении энергии адгезии.

Интеграл (2.1) преобразуется в выражение

$$W_{p^{(k)}} = \lim_{b_{(k)1,2,3} \rightarrow 0} \frac{1}{A_{(k)}} \int_{V_{(k)}} w_{(k)} dV_{(k)} = \int_0^{\infty} w_{(k)}(x_{(k)1}) dx_{(k)1}. \quad (4.1)$$

Оно исключает необходимость использования равенств (2.4)–(2.7).

Точно так же при расчете поверхностной энергии вдоль плоскости адгезионного контакта оказывается, что

$$W_{p^{(1,2)}} = \lim_{b_{(k)1,2,3} \rightarrow 0} \frac{1}{A_{(1,2)}} \sum_{k=1}^2 \int_{V_{(k)}} w_{(k)} dV_{(k)} = \sum_{k=1}^2 \int_0^{\infty} w_{(k)}(x_{(k)1}) dx_{(k)1}. \quad (4.2)$$

Энергия адгезии вдоль всей плоскости $A_{(1,2)}$ остается одной и той же и вычисляется, с учетом (5.1) и (5.2), по формуле [16]

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

При этом в использовании соотношений (2.5)–(3.2) нет необходимости.

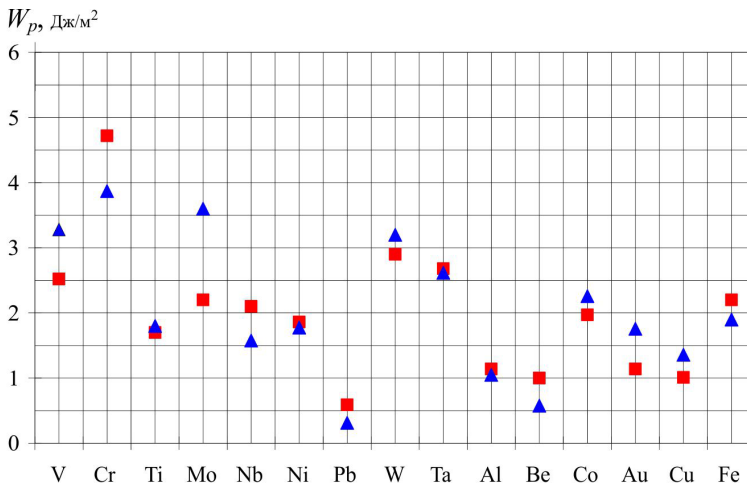


Рис. Результаты расчета поверхностной энергии и их сравнение с имеющимися в литературе данными: ■ – справочные данные W_p [23]; ▲ – значения W_p , вычисленные по предложенному в данной работе методу

Результаты расчета поверхностной энергии и энергии адгезии для ряда материалов, принадлежащих полубесконечным телам, а также известные из справочной и научной литературы данные тех же величин, позволяющие сопоставить их значения, представлены на рисунке и в таблице.

Энергия адгезии для некоторых пар материалов

Материалы $B_{(1)}-B_{(2)}$	$F_a, \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}$, расчетное	$F_a, \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}$
Cu-Al	2,78	2,75 [29]
Fe-Cu	3,46	4,00 [29]
Cr-Fe	5,06	4,85 [29]
Si-Cu	3,09	2,9 [30]
Si-Al	2,76	2,15 [30]
Ni-Al	2,82	2,67 [30]
Ni-Cr	4,80	4,14 [30]
Ni-Cu	3,72	4,26 [30]

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания № 2.479.2011.

Заключение

Представлен метод расчета поверхностной энергии и энергии адгезии твердых тел, поврежденности адгезионного шва. Он опирается на теорию термоупругости градиентных сред и представления Гиббса о переходном, хоть и очень тонком, но имеющем конечную толщину слое между контактирующими средами.

Метод позволяет провести вычисления поверхностной энергии и энергии адгезии, поврежденности адгезионного шва твердых тел конечных размеров, ограниченных криволинейной поверхностью.

Библиографический список

1. Партенский М.Б. Самосогласованная электронная теория металлической поверхности // Успехи физических наук. – 1979. – Т. 128. – Вып. 1. – С. 69–106.
2. Джонсон К. Механика контактного взаимодействия. – М.: Мир, 1989. – 510 с.
3. Кравчук А.С. К теории контактных задач с учетом трения на поверхности соприкосновения // Прикладная математика и механика. – 1980. – Т. 44. – Вып. 1. – С. 122–129.

4. Горячева И.Г. Механика фрикционного взаимодействия. – М.: Наука, 2001. – 478 с.
5. Горячева И.Г., Маховская Ю.Ю. Адгезионное взаимодействие упругих тел // Прикладная математика и механика. – 2001. – Т. 65. – Вып. 2. – С. 279–289.
6. Райзер Ю.П. Физические основы теории трещин хрупкого разрушения // Успехи физических наук. – 1970. – Т. 100. – Вып. 2. – С. 329–347.
7. Лурье С.А., Белов П.А., Соляев Ю.О. Адгезионные взаимодействия в механике сплошных сред // Математическое моделирование систем и процессов: сб. науч. тр. – 2008. – № 16. – С. 75–85.
8. Белов П.А., Лурье С.А. Теория идеальных адгезионных взаимодействий // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2007. – Т. 13, № 4. – С. 519–534.
9. Шоркин В.С. Нелинейные дисперсионные свойства высокочастотных волн в градиентной теории упругости // Механика твердого тела. – 2011. – № 6. – С. 104–121.
10. Шоркин В.С., Фроленкова Л.Ю., Азаров А.С. Учет влияния тройного взаимодействия частиц среды на поверхностные и адгезионные свойства твердых тел // Материаловедение. – 2011. – № 2. – С. 2–7.
11. Седов Л.И. Механика сплошной среды. – М.: Наука, 1970. – Т. 2. – 568 с.
12. Жирифалько Л. Статистическая физика твердого тела. – М.: Мир, 1975. – 384 с.
13. Кривцов А.М., Кривцова Н.В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журнал ДВО РАН. – 2002. – Т. 3. – № 2. – С. 254–276.
14. Азаров А.С., Шоркин В.С. Вариант учета тройного потенциального взаимодействия в системе многих частиц // Исследовано в России. – 2009. – № 8. – С. 65–71 [Электронный ресурс]. – URL: <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2009/008.pdf>.
15. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: Наука, 1978. – 792 с.
16. Физический энциклопедический словарь. – М.: Сов. энциклопедия, 1960. – Т. 1. – С. 19.
17. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. – М.: Наука, 1976. – Т. 5. Статистическая физика. Ч. I. – 584 с.

18. Кузнецов В.Д. Поверхностная энергия твердых тел. – М.: Гос. изд-во техн.-теор. лит., 1954. – 220 с.
19. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. – М.–Л.: Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1963. – 312 с.
20. Крокстон К. Физика жидкого состояния. Статистическое введение. – М.: Мир, 1978. – 400 с.
21. Гиббс Дж.В. Термодинамика. Статистическая механика. – М.: Наука, 1982. – 584 с.
22. Векилов Ю.Х., Вернер В.Д., Самсонова М.Б. Электронная структура поверхностей непереходных металлов // Успехи физических наук. – 1987. – Т. 151. – Вып. 2. – С. 341 – 376.
23. Самсонов Е.Б. Свойства элементов. Физические свойства: справочник. – М.: Металлургия, 1976. – 600 с.
24. Магомедов М.Н. О зависимости поверхностной энергии от размера и формы нанокристалла // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46. – Вып. 5. – С. 924–937.
25. Рудин У. Основы математического анализа. – М.: Мир, 1976. – 320 с.
26. Русанов А.И. Фазовые равновесия и поверхностные явления. – Л.: Химия. 1967. – С. 388.
27. Арутюнян Н.Х., Манжиров А.В., Наумов В.Э. Контактные задачи механики растущих тел. – М.: Наука, 1991. – 176 с.
28. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. – М.: Мир, 1979. – 568 с.
29. Вакилов А.Н. Адгезия металлов и полупроводников в рамках диэлектрического формализма // Физика твердого тела. – 1997. – Т. 39, № 6. – С. 964–967.
30. Коман Б.П. Внутренние механические напряжения, термодинамические и адгезионные параметры в системе металлический конденсат – монокристаллический кремний // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54. – Вып. 7. – С. 1335–1341.

References

1. Partenskij M.B. Samosoglasovannaja jelektronnaja teorija metallicheskoj poverhnosti [Self-consistent electron theory of a metallic surface]. *Uspehi fizicheskikh nauk*, 1979, vol. 128, no. 1. pp. 69-106.
2. Dzhonson K. Mexanika kontaktного vzaimodejstviya [Mechanics of contact interaction]. Moscow: Mir, 1989. 510 p.

3. Kravchuk A.S. K teorii kontaktnyx zadach s uchetom treniya na poverxnosti soprikosnoveniya [To the theory of contact tasks taking into account friction on a contact surface]. *Prikladnaya matematika i mekhanika*, 1980, vol. 44, no. 1, pp. 122-29.

4. Goryacheva I.G. Mexanika frikcionnogo vzaimodejstviya [Mechanics of frictional interaction]. Moscow: Nauka, 2001. 478 p.

5. Goryacheva I.G., Makhovskaya Yu.Yu. Adgezionnoe vzaimodejstvie uprugikh tel [Adhesive interaction of elastic bodies]. *Prikladnaya matematika i mekhanika*, 2001, vol. 65, no. 2, pp. 279-289.

6. Rajzer Ju.P. Fizicheskie osnovy teorii treshhin hrupkogo razrusheniya [Physical principles of the theory of brittle fracture cracks]. *Uspehi fizicheskikh nauk*, 1970, vol. 100, no. 2, pp. 329-347.

7. Lur'e S.A., Belov P.A., Solyaev Yu.O. Adgezionnye vzaimodejstviya v mexanike sploshnykh sred [Adhesive interaction in mechanics of continuous media]. *Sbornik nauchnyx trudov "Matematicheskoe modelirovanie sistem i processov"*. Moscow, 2008, no. 16, pp. 75-85.

8. Belov P.A., Lur'e S.A. Teoriya ideal'nyx adgezionnyx vzaimodejstvij [Theory of the ideal adhesive interactions]. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstrukcij*, 2007, vol. 13, no. 4, pp. 519-534.

9. Shorkin V.S. Nelinejnye dispersionnye svojstva vysokochastotnyh voln v gradientnoj teorii uprugosti [Nonlinear Dispersion Properties of High-Frequency Waves in the Gradient Theory of Elasticity]. *Mekhanika tverdogo tela*, 2011, no. 6, pp. 104-121.

10. Shorkin V.S., Frolenkova L.Yu., Azarov A.S. Uchet vliyaniya trojnogo vzaimodejstviya chastic sredy na poverxnostnye i adgezionnye svojstva tverdyx tel [Accounting the triple interaction influence of environment particles on superficial and adhesive properties of solids]. *Materialovedenie*, 2011, no. 2, pp. 2-7.

11. Sedov L.I. Mexanika sploshnoj sredy [Mechanics of continuum]. Moscow: Nauka, 1970, vol. 2, 568 p.

12. Zhirifal'ko L. Statisticheskaya fizika tverdogo tela [Statistical physics of solid body]. Moscow: Mir, 1975. 384 p.

13. Krivcov A.M., Krivcova N.V. Metod chastic i ego ispol'zovanie v mehanike deformiruемого tverdogo tela [Method of particles and its use in the mechanics of a deformable solid body]. *Dal'nevostochnyj matematicheskij zhurnal Dalnevostochnogo otdeleniya RAN*, 2002, vol. 3, no. 2, pp. 254-276.

14. Azarov A. S., Shorkin V.S. Variant ucheta trojnogo potencial'nogo vzaimodejstviya v sisteme mnogix chastic [The variant of triple potential interaction accounting in the many-particle system]. *Issledovano v Rossii*, 2009, no. 8, available at: <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2009/008.pdf>.

15. Kittel' Ch. Vvedenie v fiziku tverdogo tela [Introduction to solid-state physics]. Moscow: Nauka, 1978. 792 p.

16. Fizicheskij e'nciklopedicheskij slovar' [Physical encyclopedic dictionary]. Moscow: Sovetskaja e'nciklopediya, 1960, vol. 1, p. 19.

17. Landau L.D., Lifshic E.M. Teoreticheskaya fizika [Theoretical physics]. Moscow: Nauka, 1976, vol. 5, p. I, 584 p.

18. Kuznecov V.D. Poverxnostnaya e'nergiya tverdyx tel [The surface energy of solids]. Moscow: Gosudarstvennoe izdatel'stvo tehniko-teoreticheskoy literatury, 1954. 220 p.

19. Lejbfriid G. Mikroskopicheskaya teoriya mexanicheskix i teplovyx svojstv kristallov [A microscopic theory of the mechanical and thermal properties of crystals]. Moscow-Leningrad: Gosudarstvennoe izdatel'stvo fiziko-matematicheskoy literatury, 1963, 312 p.

20. Krokston K. Fizika zhidkogo sostoyaniya. Statisticheskoe vvedenie [Physics of a liquid state. Statistical introduction]. Moscow: Mir, 1978, 400 p.

21. Gibbs Dzh.V. Termodinamika. Statisticheskaya mexanika [Thermodynamics. Statistical mechanics]. Moscow: Nauka, 1982. 584 p.

22. Vekilov Ju.H., Verner V.D., Samsonova M. B. Jelektronnaja struktura poverhnostej neperehodnyh metallov [Electron structure of surfaces of nontransition metals]. *Uspehi fizicheskix nauk*, 1987, vol. 151, no. 2, pp. 341–376.

23. Samsonov E.B. Svojstva e'lementov. Fizicheskie svojstva: spravochnik [Properties of elements. Physical properties: a guide]. Moscow: Metallurgiya, 1976. 600 p.

24. Magomedov M.N. O zavisimosti poverxnostnoj e'nergii ot razmera i formy nanokristalla [On the dependence of the surface energy of the size and shape of the nanocrystal]. *Fizika tverdogo tela*, 2004, vol. 46, no. 5, pp. 924-937.

25. Rudin U. Osnovy matematicheskogo analiza [Fundamentals of mathematical analysis]. Moscow: Mir, 1976. 320 p.

26. Rusanov A.I. Fazovye ravnovesiya i poverxnostnye yavleniya [Phase Equilibria and Surface Phenomena]. Leningrad: Khimiya, 1967. 388 p.

27. Arutyunyan N.X., Manzhurov A.V., Naumov V.E. Kontaktnye zadachi mexaniki rastushhix tel [Contact Problems in Mechanics of growing bodies]. Moscow: Nauka, 1991. 176 p.

28. Adamson A. Fizicheskaya khimiya poverkhnostej [Physical Chemistry of Surfaces]. Moscow: Mir, 1979. 568 p.

29. Vakilov A.N. Adgeziya metallov i poluprovodnikov v ramkax dielektricheskogo formalizma [Adhesion of metals and semiconductors within a dielectric formalism]. *Fizika tverdogo tela*, 1997, vol. 39, no. 6, pp. 964-967.

30. Koman B.P. Vnutrennie mexanicheskie napryazheniya, termodinamicheskie i adgezionnyye parametry v sisteme metallicheskoj kondensat – monokristallicheskoj kremnij [Internal mechanical stresses, thermodynamic and adhesion parameters in the system metal condensate – monocrystalline silicon]. *Fizika tverdogo tela*, 2012, vol. 54, no. 7, pp. 1335-1341.

Об авторах

Фроленкова Лариса Юрьевна (Орел, Россия) – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Государственного университета – учебно-научно-производственного комплекса (302020, г. Орел, Россия, Наугорское шоссе, 29, e-mail: Larafrolenkova@yandex.ru).

Шоркин Владимир Сергеевич (Орел, Россия) – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики Государственного университета – учебно-научно-производственного комплекса (302020, г. Орел, Россия, Наугорское шоссе, 29, e-mail: VShorkin@yandex.ru).

About the authors

Frolenkova Larisa Jurievna (Orel, Russian Federation) – Ph. D. in Physics and Mathematics Sciences, Ass. Professor, Department of «Physics», State University-Education-Science-Production Complex (Naugorskoe shosse, 29, 302020, Orel, Russian Federation, e-mail: Larafrolenkova@yandex.ru).

Shorkin Vladimir Sergeevich (Orel, Russian Federation) – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Department of «Physics», State University-Education-Science-Production Complex (Naugorskoe shosse, 29, 302020, Orel, Russian Federation, e-mail: VShorkin@yandex.ru).

Получено 7.02.2013