

МОДЕЛЬ МЕЖИ МЕТАЛІВ І МЕТОД МАЛОГО ПАРАМЕТРА В ЗАДАЧАХ ТЕОРІЇ АДГЕЗІЇ

Inverse problem of determination of physical characteristics of interface layer in contacting environments is formulated and solved. A solution and numerical results for the system of two contacting metals for which the value of energy of adhesive bond is set and surface tension and energy of these metals at their contact with an inert gas environment are received.

Keywords: *mathematical modelling, method of small parameter, reverse task, adhesion.*

Сформульовано і з використанням методу малого параметра розв'язано обернену задачу визначення фізичних характеристик міжфазного шару контактуючих середовищ. Розв'язок і числові результати отримано для системи двох контактуючих металів, для яких задано значення енергії адгезійного зв'язку та поверхневі натяг і енергію цих металів за їх контакту з інертним газовим середовищем.

Ключові слова: *математичне моделювання, метод малого параметра, обернена задача, адгезія.*

Незважаючи на важливість явища адгезії, його енергетичні аспекти до цього часу мало вивчені, а пов'язані з ними практичні питання функціонування елементів конструкцій з покриттями в основному розв'язували емпірично [1].

Найважливіші характеристики адгезії в системі метал-покрив – адгезійна міцність (зчеплення) та енергія, сила адгезії залежать від рельєфу поверхні, повноти контакту, міжфазної енергії, змочування та інших поверхневих явищ [2].

Важливою проблемою в цій сфері є розроблення математичного апарату для визначення та прогнозування властивостей покриттів, удосконалення засобів їх нанесення та оптимізації.

Постава задачі. Мета роботи – формулювання математичної моделі для системи метал-металевий покрив, яка описує їх адгезійну взаємодію, та постановка оберненої задачі визначення характеристик міжфазного шару за енергією адгезійних зв'язків і розроблення алгоритму її розв'язування.

Предметом цього дослідження є макроскопічні співвідношення механіки деформівного твердого тіла, фізики твердого тіла з використанням числових результатів досліджень адгезії контактуючих середовищ, що базується на діелектричному формалізмі.

Аналіз останніх досліджень та публікацій. На основі макроскопічних співвідношень механіки деформівного твердого тіла та фізики поверхні у праці [3] розроблено математичну модель для визначення енергетичних характеристик міжфазних шарів на межі металу з іншим металом чи з напівпровідником з урахуванням внутрішніх механічних напружень, спричинених перерозподілом електронів провідності (чи зв'язаних зарядів у напівпровідниках).

Аналіз теорій адгезії контактуючих матеріалів з покриттями подано у працях [2, 4]. Порівняно з [3], дещо інший підхід щодо визначення енергії адгезії в контактуючих металах чи напівпровідниках з урахуванням чіткої межі між взаємодіючими середовищами та відповідна обчислювальна процедура, яка ґрунтується на використанні підходу діелектричного формалізму, наведена в [4]. Однак такий підхід громіздкий і вимагає додаткової інформації про фізичні характеристики міжфазних шарів, яку отримати досить важко. Тому доцільно для математичного моделювання міжфазних шарів металів і адгезійних покриттів використати систе-

му макроскопічних співвідношень [3, 5], оскільки підхід механіки деформівного твердого тіла дає змогу розробити простішу обчислювальну процедуру порівняно з алгоритмом, який базується на діелектричному формалізмі [4].

При поставі контактних задач руйнування з'єднань зазвичай передбачають, що поверхня контакту двох середовищ є деякою ідеально гладкою (чи кусково-гладкою) поверхнею [4, 6]. У реальних виробках це далеко не так – зазвичай поверхня є шорсткою. З часом відбувається дифузія, на межі середовищ формується міжфазний “debris-шар” з іншими властивостями, ніж у кожного з тіл зокрема [5, 7]. У науковій літературі нема чіткого математичного обґрунтування, як вказаний чинник впливає на міцність адгезійних з'єднань і їх кількісних оцінок, що дало би змогу переходити від характеристик середовищ до характеристик “debris-шару”.

Основна частина. Рівняння механоелектрики для приповерхневого шару металу в околі границі з інертним газовим середовищем записуємо згідно з основами електростатики і механіки деформівного твердого тіла [5]:

$$\varepsilon_0 \Delta \Psi = \varepsilon_0 \Delta \varphi = -\rho \omega = -\omega_V, \quad (1)$$

$$\text{Div } \hat{\sigma} + \rho \cdot \omega \cdot \vec{E} = 0, \quad (2)$$

$$\hat{e} = \text{Def } \vec{u}, \quad (3)$$

$$\sigma_{ij} = \left(\left(K - \frac{2}{3} G \right) e - \alpha_t K \cdot \Delta T - Kb\varphi \right) \delta_{ij} + 2G e_{ij}, \quad (4)$$

$$\omega_V = \rho \omega = \rho C_\varphi (\varphi - \gamma_t \cdot \Delta T) + bKe, \quad (5)$$

$$\varphi + \psi + \Phi_0 = \text{const}, \quad (6)$$

$$E_x = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}; \quad \Omega = -\varepsilon_0 E_x = \varepsilon_0 \frac{\partial \Psi}{\partial x}. \quad (7)$$

Тут ρ – питома густина матеріалу (металу); δ_{ij} – символи Кронекера; $\hat{\sigma}$, \hat{e} – тензори механічних напружень і деформацій відповідно; σ_{ij} , e_{ij} – компоненти тензорів напружень і деформацій ($i, j = 1, 2, 3$); $e = e_{ii}/3$ – перший інваріант тензора деформацій; $\varphi = \Phi - \Phi_0$, $\psi = \Psi - \Psi_0$ – відхилення модифікованого хімічного потенціалу Φ електронів провідності (МХПЕП) і електричного потенціалу Ψ від їх рівноважних значень Φ_0 , Ψ_0 в об'ємі тіла далеко від поверхні; $\Delta T = T - T_0$ – зміна температури (T_0 – значення температури в початковому рівноважному стані); K , G – коефіцієнти всестороннього стиску і зсуву відповідно; C_φ – питома електроємність; b – електрострикційний коефіцієнт об'ємного розширення; α_t – температурний коефіцієнт об'ємного розширення; γ_t – температурний коефіцієнт зміни МХПЕП; Ω – поверхневий заряд; E_x – напруженість електричного поля; $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – електрична стала.

Електропотенціал Ψ у середовищі задається рівнянням Пуассона (1), а тензор напружень входить у рівняння (2) рівноваги; \vec{u} – вектор переміщень, зв'язаний з тензором деформацій \hat{e} геометричними рівняннями (3) (обмежуємось розглядом задачі, для якої в декартових координатах $\vec{u} = (u_x, 0, 0)$); (4), (5) – рівняння стану локального елемента твердого тіла; (6) – впливає з умови квазірівноваги електрохімічного потенціалу для електронів провідності у контактуючих середовищах.

Співвідношення (7) з урахуванням (6) набувають такого вигляду:

$$E_x = -\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\partial \varphi}{\partial x}; \quad \Omega = \varepsilon_0 \frac{\partial \Psi}{\partial x} = -\varepsilon_0 \frac{\partial \varphi}{\partial x}. \quad (8)$$

Граничні умови на поверхні розділу електропровідне тіло – інертне газове середовище [5] (якщо $x = 0$):

$$\bar{\sigma}_n = \bar{p}_c + \frac{1}{2} \Omega (\vec{E} + \vec{E}_c); \quad \Omega = \varepsilon \varepsilon_0 (\vec{E}_{cn} - \vec{E}_n); \quad \Psi = \Psi_c; \quad \varphi = -\Phi_0, \quad (9)$$

де \bar{p}_c – тиск середовища по нормалі \vec{n} до поверхні металу; \vec{E}_{cn} , $\vec{E}_n = E_x \vec{n}$ – складники напруженості електричного поля середовища і металу по нормалі n ; Ψ , Ψ_c – потенціали напруженості електричного поля в металі і зовнішньому середовищі відповідно.

Перша умова із (9) з урахуванням (6), якщо $x = 0$, набуває такого вигляду:

$$\sigma_x \equiv \sigma_{xx} = -\frac{\varepsilon_0}{2} \cdot \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)^2 = \frac{\varepsilon_0}{2} \cdot \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2. \quad (10)$$

Визначення розподілів φ , σ_x , σ_y . Оскільки вираз (2) нелінійний, то систему рівнянь (1)–(2) з урахуванням (3)–(10) для визначення розподілів потенціалу φ і механічних напружень σ_x , σ_y ($\sigma_{yy} \equiv \sigma_y = \sigma_z$) в околі межі середовищ розв'язуємо аналітично в переміщеннях (u) з використанням методу малого параметра $b_* = b \cdot \Phi_0$ згідно з методикою розв'язування задач механіки деформівного твердого тіла [5]. Обмежимося чотирма наближеннями розкладу.

Компоненти u_x переміщень і φ подаємо у вигляді рядів за малим параметром b_* :

$$u_x = u_0 + b_* \cdot u_1 + (b_*)^2 \cdot u_2 + (b_*)^3 \cdot u_3 + (b_*)^4 \cdot u_4, \quad (11)$$

$$\varphi = \varphi_0 + b_* \cdot \varphi_1 + (b_*)^2 \cdot \varphi_2 + (b_*)^3 \cdot \varphi_3 + (b_*)^4 \cdot \varphi_4. \quad (12)$$

Розв'язавши (1)–(2), з урахуванням (3)–(12), для області металу отримуємо

$$\varphi(x, k, \Phi_0) = -\Phi_0 \cdot \exp(-kx);$$

$$\begin{aligned} \sigma_x(x, b, k, \Phi_0) \approx & -\frac{1}{2} \varepsilon_0 \cdot k^2 \cdot \Phi_0^2 \cdot e^{-2kx} - \frac{1}{2} b \cdot \Phi_0 \cdot K \cdot \Phi_* \cdot e^{-3kx} - \\ & -(b \cdot \Phi_0)^2 \cdot \frac{3K^2 e^{-2kx}}{2(3K + 4G)} \left(1 + \frac{\Phi_*}{4} e^{-2kx} \right) - (b \cdot \Phi_0)^3 \cdot \frac{9K^3 e^{-3kx}}{2(3K + 4G)^2} \left(\frac{1}{3} + \frac{\Phi_*}{20} e^{-2kx} \right) - \\ & -(b \cdot \Phi_0)^4 \cdot \frac{9K^4}{8(3K + 4G)^3} e^{-4kx} \left(1 + \frac{1}{10} \Phi_* e^{-2kx} \right) + C_x, \end{aligned} \quad (13)$$

$\sigma_y(x, b, k, \Phi_0)$ виражається аналогічно σ_x , де

$$\Phi_0 = \frac{q_0 W_e}{2 \varepsilon_0 k^2} \cdot (2 - \exp(-kZ_b)); \quad \Phi_* = \frac{\varepsilon_0 \cdot k^2 \cdot \Phi_0^2}{3K + 4G};$$

$$Z_b = \frac{3}{4k_F} \left(\frac{\pi}{2} + \left(\frac{5E_V}{3E_F} - 1 \right) \arcsin \sqrt{\frac{3E_F}{3E_F + 5E_V} - \sqrt{\frac{5E_V}{3E_F}}} \right);$$

$$\begin{aligned} C_x = & \frac{b}{2} K \cdot \Phi_0 \cdot \Phi_* + (b \cdot \Phi_0)^2 \frac{3K^2}{2(3K + 4G)} \left(1 + \frac{\Phi_*}{4} \right) + \\ & + (b \cdot \Phi_0)^3 \frac{9K^3}{2(3K + 4G)^2} \left(\frac{1}{3} + \frac{\Phi_*}{20} \right) + (b \cdot \Phi_0)^4 \cdot \frac{9K^4}{8(3K + 4G)^3} \left(1 + \frac{1}{10} \Phi_* \right); \end{aligned}$$

E_F і k_F – енергія і хвильовий вектор Фермі; E_V – робота виходу електрона з металу; W_e [1/м³] – об’ємна густина електронів провідності металу далеко від поверхні (орієнтовно на відстані, більшій 30 нм); $q_0 = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл – заряд електрона; $1/k$ – відстань, на якій МХПЕП зменшується в e разів (e – основа натуральних логарифмів); Z_b – зміщення подвійного електричного шару відносно границі тіла [5].

Визначення фізичних характеристик ξ , k , b , h металу. Пропонуємо метод визначення фізичних характеристик металу в рівняннях стану (4), (5), в основу якого покладемо співвідношення для поверхневого натягу σ_h , поверхневої енергії (ПЕ) γ , умову рівноваги поверхневого шару, умову для визначення ефективної товщини h поверхневого шару [3, 5]:

$$\int_0^h \sigma_y dx = \sigma_h, \quad \sigma_y = \sigma_z, \quad (14)$$

$$\gamma_e + \xi \gamma_m = \gamma, \quad (15)$$

$$\frac{\partial \gamma}{\partial k} = \frac{\partial (\gamma_e + \xi \gamma_m)}{\partial k} = 0, \quad k = \sqrt{\frac{\rho C_\Phi}{\epsilon_0}}, \quad (16)$$

$$\sigma_y + p = 0 \text{ (для } x = h) \text{ (} p = 100 \text{ кПа – атмосферний тиск)}. \quad (17)$$

Тут $\gamma_e = \int_0^h w_e dx$ – електрична складова поверхневої енергії (ПЕ); $\gamma_m = \int_0^h w_m dx$ –

механічна складова ПЕ; $w_e = \frac{\epsilon_0}{2} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)^2$ і $w_m = \frac{\sigma_x (\sigma_x - 4\nu \sigma_y)}{2E} + \frac{(1-\nu)\sigma_y^2}{E}$ – густини електричної та механічної складових ПЕ; h – ефективна товщина поверхневого шару; $\nu = \frac{3K - 2G}{2(3K + G)}$; $E = G \frac{3K + 4G}{3K + G}$; k – варіаційний параметр.

Співвідношення (14)–(17) використовували для визначення поверхневих натягу та енергії [3, 5]. У цій роботі використовуємо їх для визначення фізичних ξ , k , b , Φ_0 і геометричної h характеристик поверхневого шару.

Для розв’язання системи рівнянь (14)–(17) на першому етапі використовуємо наведений вище розв’язок (13) задачі (1)–(12).

На другому етапі вирази для ϕ , σ_x , σ_y підставляємо у співвідношення (14)–(17). Для системи (14)–(17) потрібно задати числові значення σ_h , γ , E , ν , ρ , E_V , які можна взяти з експериментів.

Отже, на другому етапі в результаті обчислень шляхом імітаційного моделювання – числовим розв’язанням системи рівнянь (14)–(17), отримуємо чотири важливі фізичні характеристики металу – ξ , k , b , h . На основі цих характеристик можна визначити і величину Φ_0 , за допомогою якої формулюємо граничну умову для модифікованого хімічного потенціалу ϕ електронів провідності (9) і граничну умову для σ_x (10), а також визначаємо електроємність і потенціал подвійного електричного шару на межі метал–середовище.

Визначення енергетичних характеристик міжфазного шару.

Міжфазні енергію γ_m і натяг σ_m на границі “метал–покриття” визначимо аналогічно, як у працях [3, 8]:

$$\gamma_m = \gamma_1 + \xi_m \gamma_2; \quad \gamma_1 = \int_{-H_1}^{H_2} w_e dx; \quad \gamma_2 = \int_{-H_1}^{H_2} w_m dx; \quad \sigma_m = \int_{-H_1}^{H_2} \sigma_y dx, \quad \sigma_y = \sigma_z. \quad (18)$$

Тут ξ_m – характеристика матеріалу міжфазного шару на границі металів; $H_1 + H_2$ – ефективна товщина міжфазного шару ($-H_1 < x < H_2$). Для визначення фізичних величин у (18) та їх змін використовуємо (1)–(17).

Умову рівноваги перехідного шару (тобто енергетичної характеристики γ_m і наближені співвідношення на уявних границях, що обмежують область міжфазного шару, аналогічно [3] запишемо так:

$$\frac{\partial \gamma_m}{\partial k} = \frac{\partial(\gamma_1 + \xi_m \gamma_2)}{\partial k}; \quad \sigma_y^+ + p = 0 \quad (x = +H_1); \quad \sigma_y^- + p = 0 \quad (x = -H_2). \quad (19)$$

Тут індекс “+” відповідає параметрам металу, а “-” – параметрам другого металу (покриття); $p = 100$ МПа.

Співвідношення для визначення роботи адгезії A_{ad} і енергії адгезійних зв’язків γ_{ad} згідно з [5] такі:

$$A_{ad} = \sigma_{h+} + \sigma_{h-} - \sigma_m, \quad \gamma_{ad} = \gamma_+ + \gamma_- - \gamma_m. \quad (20)$$

Тут σ_{h+} , σ_{h-} , γ_+ , γ_- – поверхневі натяги та поверхневі енергії контактуючих тіл відповідно.

Граничні співвідношення для контактної задачі. Запишемо граничні умови для межі розділу середовищ (для $x = 0$), які подані у [5, 8]

$$\begin{aligned} \varphi_+ = \varphi_-; \quad j_x^+ = j_x^-; \quad \sigma_y^+ = \sigma_y^-; \quad \sigma_x^+ = \sigma_x^-; \quad \bar{u}^+ = \bar{u}^-; \quad \tilde{\mu}_c^+ = \tilde{\mu}_c^-; \\ \tilde{\mu}_c^+ = \mu_c^+ + \zeta^+ q_0 \Psi^+; \quad \tilde{\mu}_c^- = \mu_c^- + \zeta^- q_0 \Psi^-; \quad E_\tau^+ = E_\tau^-, \end{aligned} \quad (21)$$

де σ_x^\pm , $\sigma_y^\pm = \sigma_z^\pm$ – нормальні та дотичні напруження відповідно; \bar{u}^\pm – переміщення; j_x^\pm – електричні струми; μ_c^\pm , $\tilde{\mu}_c^\pm$ – хімічні та електрохімічні потенціали дифузійних частинок; $\zeta^\pm = q_c^\pm / q_0$ – заряди частинок, які беруть участь у дифузійних процесах (безрозмірні відносні величини); E_τ^\pm – дотична складова напруженості електричного поля.

Алгоритм розв’язання оберненої задачі визначення модуля Юнга та енергетичних характеристик міжфазного шару за енергією адгезійних зв’язків.

1. На першому етапі знаходимо фізичні характеристики ξ , k , b , h для металів, якщо вони контактують з інертним газовим середовищем (повітрям), тобто – ξ_+ , k_+ , b_+ , h_+ (для системи метал–повітря), ξ_- , k_- , b_- , h_- (для системи металевий покрив–повітря). Заданими вважаємо поверхневі натяг та енергію і фізичні характеристики матеріалів у рівняннях стану (4) і (5). Використовуємо розв’язок (13) задачі (1)–(12) і системи співвідношень (14)–(17).

2. На другому етапі співвідношення розподілів потенціалів та механічних напружень φ , σ_x , σ_y типу (13) для кожного з металів підставляємо у контактні умови (21) і знаходимо аналітичні вирази розв’язку контактної задачі, тобто φ_+ , σ_{x+} , σ_{y+} , φ_- , σ_{x-} , σ_{y-} для системи метал–металевий покрив.

3. Підставляємо розв’язки контактної задачі у (18), (20) і визначаємо міжфазні фізичні величини γ_m , σ_m , A_{ad} , γ_{ad} для приповерхневого шару “метал–покрив”.

4. Фізичні величини γ_m , σ_m , A_{ad} , γ_{ad} (визначені на попередньому етапі 3) залежать від E_+ і E_- . Для обчислювальної оптимізаційної процедури, як початкове значення модуля Юнга, вибираємо середнє $E_0 = (E_+ + E_-)/2$.

5. Як тестові вибираємо числові значення енергії адгезійних зв’язків γ_{adV} , отримані у праці [4] на основі діелектричного формалізму і теорії поверхневих плазмонів (колективних збуджень електрон-іонної системи). Зіставляємо γ_{adV} з

аналогічним γ_{adY} , отриманим із розв'язку контактної задачі (етап 3), і визначаємо відносно непевність (нев'язку) за виразом

$$\delta_\gamma = \frac{|\gamma_{adY} - \gamma_{adV}|}{\gamma_{adC}}; \quad \gamma_{adC} = \frac{\gamma_{adV} + \gamma_{adY}}{2}. \quad (22)$$

6. У вираз (20) для γ_{adY} замість E_+ і E_- згідно з п. 3 і 4 алгоритму підставляємо E_0 , перевіряємо співвідношення (22). У випадку невиконання цього співвідношення послідовними наближеннями (змінюючи значення E_0 на величину ΔE) повторюємо обчислення, поки невіязка δ_γ не зменшиться до ε_γ (вибирали $\varepsilon_\gamma = 10^{-4}$):

$$\delta_\gamma = |\gamma_{adY} - \gamma_{adV}| / \gamma_{adC} < \varepsilon_\gamma \Rightarrow 0, \quad \gamma_{adY} \Rightarrow \gamma_{adV}. \quad (23)$$

При цьому $E_0 \Rightarrow E_*$, що характеризує міжфазний шар.

Розрахунки фізичних величин. Наведений алгоритм визначення характеристик матеріалу ξ, k, b, h застосовано для заліза, міді, алюмінію та хрому (бездомішкового металу в твердому стані при температурі 20°C і атмосферному тиску $p = 100$ кПа). Використовуємо результати теоретичних і експериментальних досліджень для $\sigma_h, \gamma, E, \nu, \rho, \omega$ [3, 9–13]:

$$\begin{aligned} E_+ &= 211 \text{ ГПа}; \quad \nu_+ = 0,29; \quad \rho_+ = 7874 \text{ кг/м}^3; \quad \omega_+ = 1,698 \cdot 10^{29} \text{ 1/м}^3; \\ \sigma_{h+} &= 2,913 \text{ Н/м}; \quad \gamma_+ = 2,680 \text{ Дж/м}^2 \text{ (Fe)}; \\ E_- &= 132 \text{ ГПа}; \quad \nu_- = 0,34; \quad \rho_- = 8920 \text{ кг/м}^3; \quad \omega_- = 8,45 \cdot 10^{28} \text{ 1/м}^3; \\ \sigma_{h-} &= 2,16 \text{ Н/м}; \quad \gamma_- = 1,992 \text{ Дж/м}^2 \text{ (Cu)}; \\ E_- &= 70 \text{ ГПа}; \quad \nu_- = 0,35; \quad \rho_- = 2700 \text{ кг/м}^3; \quad \omega_- = 18,6 \cdot 10^{28} \text{ 1/м}^3; \\ \sigma_{h-} &= 1,22 \text{ Н/м}; \quad \gamma_- = 1,043 \text{ Дж/м}^2 \text{ (Al)}; \\ E_- &= 279 \text{ ГПа}; \quad \nu_- = 0,21; \quad \rho_- = 7190 \text{ кг/м}^3; \quad \omega_- = 8,33 \cdot 10^{28} \text{ 1/м}^3; \\ \sigma_{h-} &= 2,51 \text{ Н/м}; \quad \gamma_- = 1,854 \text{ Дж/м}^2 \text{ (Cr)}. \end{aligned} \quad (24)$$

Тут ω_+, ω_- – концентрація вільних електронів.

Для розв'язування оберненої задачі визначення ефективного модуля Юнга E_* та енергетичних характеристик міжфазного шару використовуємо результати оцінювання енергії адгезійних зв'язків γ_{adV} із праці [4] і відповідні значення E_0 , отримані на основі (24):

$$\begin{aligned} \gamma_{adV}(\text{Cu, Al}) &= 3,1 \text{ Дж/м}^2, & E_0(\text{Cu, Al}) &= 94,5 \text{ МПа}; \\ \gamma_{adV}(\text{Fe, Cr}) &= 4,8 \text{ Дж/м}^2, & E_0(\text{Fe, Cr}) &= 245 \text{ МПа}; \\ \gamma_{adV}(\text{Fe, Cu}) &= 4,0 \text{ Дж/м}^2, & E_0(\text{Fe, Cu}) &= 165 \text{ МПа}. \end{aligned} \quad (25)$$

Фізичні характеристики ξ, k, b, h для металів за їх контакту з інертним газовим середовищем, отримані в результаті розрахунків, подані у табл. 1.

Таблиця 1. Характеристики ξ, k, b та ефективна товщина міжфазного шару h металів, які контактують з інертним газовим середовищем

Метали	ξ	$k, 1/\text{м}$	$b, 1/\text{В}$	$H, \text{нм}$
Al	1,253	$2,97 \cdot 10^{10}$	0,251	0,471
Cu	0,618	$1,59 \cdot 10^{10}$	0,195	0,822
Fe	0,838	$2,31 \cdot 10^{10}$	0,214	0,591
Cr	2,860	$1,48 \cdot 10^{10}$	0,085	0,878

З використанням даних табл. 1 розраховано ефективний модуль Юнга E_* та енергетичні характеристики міжфазного шару: роботу адгезії A_{ad} , міжфазний на-

тяг σ_m та міжфазну енергію γ_m для систем контактуючих металів. Результати розрахунків подано у табл. 2.

Таблиця 2. Модуль Юнга E_* та енергетичні характеристики міжфазного шару для систем контактуючих металів

Системи	E_* , МПа	A_{ads} , Н/м	σ_m , Н/м	γ_m , Дж/м ²
Cu–Al	$94,5 \cdot 1,2334 = 116,6$	3,367	0,183	0,168
Fe–Cr	$245 \cdot 0,95 = 232,8$	5,313	0,383	0,350
Fe–Cu	$165 \cdot 0,91 = 150,8$	4,343	0,730	0,672

Обговорення результатів. Для визначення фізичних характеристик міжфазного шару застосовуємо концепцію суцільності, що дає змогу перейти від гетерогенної системи контакту двох середовищ з ідеальною границею розділу, яку розглядали раніше [4, 5], до перехідного шару з ефективними характеристиками.

Як тестові використовуємо результати оцінювання енергії адгезійних зв'язків γ_{adv} , отримані на основі діелектричного формалізму з використанням уявлень про колективні збудження електрон-іонної системи (поверхневі плазмони), які достатньо коректні і близькі до результатів, отриманих на основі теорії функціоналу електронної густини [4].

Співвідношення (23) трактуємо як оптимізаційний критерій для обчислення ефективного значення модуля Юнга міжфазного шару, а також для уточнення значень його енергетичних характеристик – міжфазних натягу та енергії і роботи адгезії.

ВИСНОВКИ

На основі підходів механіки деформівного твердого тіла та фізики твердого тіла розвинуто математичну модель для визначення фізичних величин, які характеризують перерозподіл електронів провідності і відповідних їм механічних напружень у приповерхневому шарі системи метал–металевий покрив.

Розв'язано контактну задачу для границі розділу “метал–покрив”, проведено оцінювання енергетичних характеристик приповерхневого шару: міжфазних натягу та енергії, роботи адгезії, енергії адгезійних зв'язків. За цими характеристиками можна визначати адгезійну міцність (зчеплення).

Сформульовано обернену задачу визначення модуля Юнга за енергією адгезійних зв'язків, розроблено алгоритм її розв'язання і в результаті, як приклад, обчислено ефективні значення модуля Юнга та енергетичні характеристики міжфазного шару для трьох систем контактуючих металів: “Al, Cu”, “Fe, Cr”, “Fe, Cu”.

Сформульовано критерій оптимізації, в який входить, з одного боку, енергія адгезійних зв'язків, отримана в результаті застосування методу малого параметра до нелінійної задачі механіки деформівного твердого тіла, з іншого – енергія адгезійних зв'язків, яка є результатом теорії адгезії контактуючих середовищ, що базується на діелектричному формалізмі.

У результаті обчислень з використанням критерію оптимізації для контактуючих середовищ отримано, що в системі “Al–Cu” модуль Юнга $E_*(Al, Cu)$ більший порівняно із середнім значенням на 23,3%, $E_*(Fe, Cr)$ менший за середнє значення на 5%, а $E_*(Fe, Cu)$ менший за середнє значення на 9%.

Розроблену методику розв'язування оберненої задачі в теорії адгезійних ефектів і відповідний критерій оптимізації надалі можна використати для уточнення фізичних характеристик приповерхневих шарів інших контактуючих середовищ. Описані підхід та обчислювальну процедуру можна застосувати для визначення інших фізичних характеристик – питомої електроємності “debris-шару”, адгезійної міцності зчеплення контактуючих середовищ тощо.

1. Дерягин Б. В., Чураев Н. В., Муллер В. М. Поверхностные силы. – М.: Наука, 1985. – 398 с.
2. Костюк Г. И., Мелкозерова О. М. Оценка адгезионных характеристик контактирующих материалов с покрытиями // *Авиационно-космическая техника и технология*. – Харьков, 2011. – № 3 (80). – С. 16–22.
3. Коман Б. П., Юзевич В. Н. Внутренние механические напряжения, термодинамические и адгезионные параметры в системе металлический конденсат–монокристаллический кремний // *Физика твердого тела*. – 2012. – **54**, вып. 7. – С. 1335–1341.
4. Вакилов А. Н., Мамонова М. В., Прудников В. В. Адгезия металлов и полупроводников в рамках диэлектрического формализма // *Физика твердого тела*. – 1997. – **39**, № 6. – С. 964–967.
5. Сопрунюк П. М., Юзевич В. М. Діагностика матеріалів і середовищ. Енергетичні характеристики поверхневих шарів. – Львів: Сполом, 2005. – 292 с.
6. Фрейдин А. С., Турусов Р. А. Свойства и расчет адгезионных соединений. – М.: Химия, 1990. – 256 с.
7. Панин В. Е., Панин А. В. Эффект поверхностного слоя в деформируемом твердом теле // *Физическая мезомеханика*. – 2005. – **8**, № 5. – С. 7–15.
8. Юзевич В., Огірко І., Джала Р. Моделювання корозійних процесів у системі “метал–електроліт” з урахуванням дифузійного імпедансу // *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології*. – 2011. – Вип. № 13. – С. 173–181.
9. Магомедов М. Н. О барической фрагментации железа и природе геотермального тепла // *Int. Scie. J. for alternative energy and ecology*. – 2010. – № 6 (86). – С. 82–87.
10. Eustathopoulos N., Joud J.-C. Interfacial tension and adsorption of metallic systems // *Current Topics in Material Science*. – 1980. – **Vol. 4**. – P. 281–360.
11. Alden M., Mirbt S., Skriver H. L. Surface magnetism of iron, cobalt and nickel // *Phys. Rev. B*. – 1992. – **46**, № 10. – P. 6303–6312.
12. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела: Пер. с англ. – М.: Наука, 1978. – 792 с.
13. *Таблицы физических величин. Справ. / Под ред. И. К. Кикоина*. – М.: Атомиздат, 1976. – 1008 с.

*Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України, Львів;
Тернопільський національний технічний університет ім. Івана Пулюя*

*Одержано
19.05.2014*