

НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

УДК 691-404; 539.61

# Градиентная модель адгезии жидкости на поверхности строительного материала

**А.А. Игнатъев<sup>1,2</sup>, В.М. Готовцев<sup>3\*</sup>, П.Б. Разговоров<sup>3</sup>**

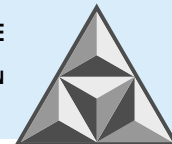
**Алексей Александрович Игнатъев**

<sup>1</sup>Российский дорожный научно-исследовательский институт, Москва, Российская Федерация

<sup>2</sup>Научно-исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Российская Федерация  
*ignatievaa@rosdornii.ru*

**Валерий Михайлович Готовцев, Павел Борисович Разговоров**

<sup>3</sup>Ярославский государственный технический университет, Ярославль, Российская Федерация  
*gotovtsev\_vm@mail.ru\**; *razgovorovpb@ystu.ru*

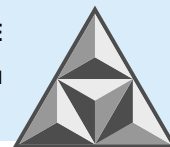


*Сформирован тензор напряжений в межфазном слое жидкость – твердый строительный материал, удовлетворяющий условиям равновесия и включающий шаровую и девиаторную компоненты. Шаровая часть тензора напряжений представлена внутренним давлением жидкости. Показано, что в рамках принятой модели в межфазном слое жидкость – твердое, в отличие от слоя жидкость – газ, не происходит накопления поверхностной энергии. Установлено, что напряжения, формирующие поверхностное натяжение межфазного слоя, являются компонентами девиатора напряжений, а распределение давления жидкости по толщине межфазного слоя нелинейно, что приводит к формированию мощных градиентов давления, определяющих специфику явлений на поверхности материала. Давления жидкой и твердой фаз в зоне их непосредственного контакта различаются, что обусловлено проявлением эффекта адгезии. Разработанный подход базируется на общих представлениях механики сплошных сред, что позволяет не учитывать специфику различных видов адгезионных взаимодействий жидкой фазы и твердой поверхности материала.*

**Ключевые слова:** жидкость – твердая поверхность материала, тензор напряжений, сидячая капля, поверхностная энергия, внутреннее давление, модель адгезии жидкости

**Для цитирования:**

Игнатьев А.А., Готовцев В.М., Разговоров П.Б. Градиентная модель адгезии жидкости на поверхности строительного материала // *Умные композиты в строительстве*. 2023. Т. 4, вып. 4. С. 30-49. URL: [http://comincon.ru/index.php/tor/issue/view/v4n4\\_2023](http://comincon.ru/index.php/tor/issue/view/v4n4_2023)



SCIENTIFIC ARTICLE

# Gradient model of liquid adhesion on the building material surface

**A.A. Ignatyev<sup>1,2</sup>, V.M. Gotovtsev<sup>3\*</sup>, P.B. Razgovorov<sup>3</sup>**

**Aleksey A. Ignatyev**

<sup>1</sup>Russian Road Research Institute, Moscow, Russia

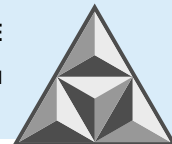
<sup>2</sup>Research University Higher School of Economics, Moscow, Russia

*ignatievaa@rosdornii.ru*

**Valeriy M. Gotovtsev, Pavel B. Razgovorov**

<sup>3</sup>Yaroslavl State Technical University, Yaroslavl, Russia

*gotovtsev\_vm@mail.ru\**; *razgovorovpb@ystu.ru*

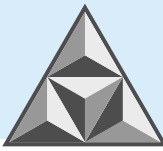


*Considerable energy resources are consumed in the production of building materials, during construction and installation works, for operation with current and major repairs, reconstruction, dismantling, utilisation and recycling. As a rule, these energy resources are non-renewable, therefore, for energy saving purposes, it is necessary to take into account the total energy consumption of capital construction facilities during their life cycle. The authors have proposed the structure of a relational database of building materials energy intensity to calculate energy costs. The proposed database contains a list of building materials and energy intensity values at all stages of the life cycle. The novelty of the database is the division of materials by building elements (replaceable, non-replaceable). The article presents fragments of energy intensity calculation of the apartment building life cycle in the Ivanovo city using the proposed database.*

**Key words:** liquid – solid material surface, stress tensor, sitting drop, surface energy, internal pressure, liquid adhesion model

**For citation:**

Ignatiev A.A., Gotovtsev V.M. & Razgovorov P.B. (2023) Gradient model of liquid adhesion on the building material surface, *Smart Composite in Construction*, 4(4), pp. 30-49 [online]. Available at: [http://comincon.ru/index.php/tor/issue/view/v4n4\\_2023](http://comincon.ru/index.php/tor/issue/view/v4n4_2023)



## ВВЕДЕНИЕ

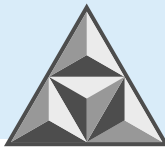
Большинство известных строительных материалов – композиты, включающие дисперсную фазу, состоящую, как правило, из минеральных частиц, и дисперсионную среду, работающую как связующее. К таким материалам традиционно относят кирпич, цементный раствор, бетон, асфальтобетон и т.п. Поверхностные явления лежат в основе нанотехнологий, позволяющих получать материалы с принципиально новыми или заранее обусловленными свойствами. В связи с этим исследования в этой области получили мощный толчок к развитию.

Процесс взаимодействий на поверхности строительного материала приводит к возникновению связей различного рода (силы Ван-дер-Ваальса, водородные связи, специфические донорно-акцепторные и химические взаимодействия). Различают несколько механизмов адгезии, в зависимости от природы взаимодействующих фаз и условий проведения процесса (механическая, диффузионная, адсорбционная и электростатическая адгезии). Однако в реальных системах чаще всего реализуется смешанный механизм, включающий каждый из обозначенных видов адгезии.

Как результат, в настоящее время в орбиту исследователей явлений на поверхности строительных материалов включен не один десяток поверхностных сил, отвечающих за межфазное взаимодействие. По мнению В.И. Ролдугина [1], мы сейчас сталкиваемся с ситуацией, подобной имевшей место в физике в начале XX века, когда для каждого явления вводились свои «собственные» силы. Моделирование силовых взаимодействий фаз для всех перечисленных механизмов адгезии производится в предположении формирования силовых полей с учетом специфики контактирующих сред. Набор возможных сочетаний свойств разнородных фаз чрезвычайно широк, что препятствует выработке единого подхода к моделированию адгезионных явлений в зоне контактов.

Несмотря на то что основы теории поверхностных явлений были заложены Лапласом и Юнгом более двухсот лет назад, многие положения к настоящему времени не получили должного обоснования. Так, в [2] отмечается, что капиллярное давление, определяемое формулой Лапласа традиционно трактуется как гидростатическое, в то время как Лаплас при выводе формулы оперировал молекулярным давлением. Однако значения этих видов давлений кардинально отличаются друг от друга. Там же указывается на отсутствие физического обоснования вертикальной составляющей поверхностного натяжения при рассмотрении равновесия линии трехфазного контакта для сидячей капли на твердой поверхности материала. В [3] ставится вопрос о механизме формирования тангенциальной ориентации силы поверхностного натяжения при условии нормальных к межфазной поверхности силовых воздействий.

Этот перечень можно было бы продолжить и далее, но отмеченное выше оказывается достаточным, чтобы сделать вывод о необходимости разработки нового подхода к моделированию поверхностных явлений. В монографии Б.В. Дерягина [4] указывается способ реализации такого подхода, состоящий «в замене кулоновских и молекулярных (дисперсионных) сил системой натяжений. Возможность такой замены не зависит от физического существа этих сил, так как базируется на формальной эквивалентности электромагнитных сил системе натяжений». В настоящей работе сделана попытка осуществления такого подхода в рамках модели несжимаемой жидкости с использованием аппарата механики сплошной среды для изучения равновесия межфазного слоя жидкость – твердая поверхность материала, который рассматривается как слой жидкости конечной толщины.



## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Основным показателем адгезионных процессов является работа адгезии, численно равная работе, затраченной на изотермический разрыв взаимодействующих поверхностей конденсированных фаз гетерогенной системы. Работа адгезии  $W_a$ , отнесенная к единице площади межфазной поверхности, определяется по уравнению:

$$W_a = \gamma_{sg} + \gamma_{lg} - \gamma_{ls}, \quad (1)$$

где  $\gamma_{sg}$  – поверхностное натяжение системы твердый материал – газ,  $\gamma_{lg}$  – жидкость – газ,  $\gamma_{ls}$  – жидкость – твердый материал. Приведенное выражение носит название уравнения Дюпре, которое по физическому смыслу отражает закон сохранения энергии в процессе изотермического разрыва межфазного контакта жидкость – твердое  $\gamma_{ls}$  с образованием двух новых межфазных поверхностей твердое – газ и жидкость – газ с поверхностными натяжениями  $\gamma_{sg}$  и  $\gamma_{lg}$ .

Основу уравнения составляют соображения общего плана, не дающие представления о механизме контактного взаимодействия фаз. Кроме того, в уравнении (1) присутствует поверхностное натяжение твердый материал – газ  $\gamma_{sg}$ , методов определения которого в настоящее время неизвестны, что ставит под сомнение сам факт его существования. Уравнение Дюпре было усовершенствовано с использованием соотношений при рассмотрении равновесия линии трехфазного контакта сидячей капли на твердой поверхности. В результате работа адгезии может быть определена уравнением:

$$W_a = \gamma_{lg}(1 + \cos \theta_0), \quad (2)$$

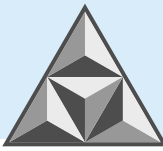
получившем название уравнения Дюпре-Юнга, где  $\theta_0$  – значение краевого угла смачивания сидячей капли.

В записанных уравнениях поверхностные натяжения рассматриваются как затраты энергии, необходимые для создания единицы межфазной поверхности. Увеличение энергии системы, вследствие образования области контакта разнородных фаз, определяется известным уравнением термодинамики:

$$P \cdot dV = \gamma \cdot dS, \quad (3)$$

в котором  $P$  – давление,  $dV$  – изменение объема,  $dS$  – изменение площади межфазной поверхности,  $\gamma$  – поверхностное натяжение. Это соотношение использовано Лапласом при выводе известного уравнения для определения капиллярного давления, создаваемого искривленной свободной поверхностью жидкости. При этом возникает вопрос об изменении объема  $dV$  в жидкой капле в процессе формирования межфазного слоя жидкость – газ с учетом практически несжимаемой жидкости.

В этом случае логичным будет предположение о том, что в качестве изменения объема системы следует принять объем жидкости в сформированном межфазном слое. Однако значение толщины межфазного слоя, по данным литературных источников, измеряется в ангстремах или нанометрах [5], то есть имеет порядок  $10^{-10}$  –  $10^{-9}$  м. В соответствии с этим изменение объема  $dV$  является малой величиной, откуда следует, что для создания капиллярного давления, по формуле Лапласа, требуется очень высокое давление  $P$ , существенно превышающее гидростатическое давление. Таким давлением может быть молекулярное или внутреннее давление жидкости, значение которого определяется



исследованием сжимаемости жидкости и, по данным различных литературных источников, составляет для воды от 10000 до 15000 атм. [6-9].

Термодинамическое представление поверхностного натяжения, использованное выше, не отражает характера межфазных взаимодействий, в связи с чем возникает необходимость представления межфазного слоя как отдельного объекта равновесия, обладающего свойствами, отличающимися от свойств объемных фаз, его формирующих. Воспользуемся известной формулой Баккера [10] для определения поверхностного натяжения межфазного слоя:

$$\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} [p - p_{\tau}(z)] dz, \quad (4)$$

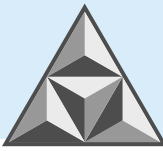
где  $p$  – давление среды в межфазном слое,  $p_{\tau}(z)$  – компонента тензора напряжений, действующая в плоскости межфазного слоя,  $z$  – координата, нормальная к поверхности слоя. Записанное уравнение широко используется при описании поверхностных явлений, но параметры, входящие в нее, требуют уточнения. В частности, в некоторых литературных источниках давление  $p$  трактуется как гидростатическое давление, в других – как внутреннее давление жидкости. Физическая сторона зависимости  $p_{\tau}(z)$  не раскрывается, а указывается лишь на сложный ее характер, обусловленный межмолекулярными взаимодействиями [11].

Присутствующие в уравнении параметры определяют силовые поля, обусловленные действием молекулярных сил. В объемной фазе жидкости межмолекулярное взаимодействие осуществляется дальнедействующими силами притяжения, которые уравниваются силами молекулярного отталкивания с формированием уравновешенного изотропного поля сил давления. Распределение давлений в такой системе определяется внешними воздействиями и описывается уравнениями гидростатики. В тонких межфазных слоях вследствие контактного взаимодействия разнородных фаз возникает межмолекулярное силовое поле, приводящее к нарушению равновесия в макроскопическом представлении. В результате образуется межфазный слой – переходная структура, в тензоре напряжений которой появляются составляющие, отличные от компонент изотропного давления, присутствующие в формуле Баккера как  $p_{\tau}(z)$ .

Наличие компоненты  $p_{\tau}(z)$  тензора межфазных напряжений свидетельствует о том, что тензор напряжений в межфазном слое является анизотропным, т.е. содержит компоненты, отличные от составляющих давления. Исходя из этого, целесообразно представить тензор напряжений совокупностью шаровой части с компонентами давления и девиатора напряжений [12]. При этом шаровая часть тензора отражает действие в среде сил молекулярного притяжения, уравновешенных силами отталкивания, формируя равновесное поле, обусловленное внутренними свойствами жидкости, не зависящими от внешних воздействий. Компоненты девиатора напряжений отражают воздействие твердой фазы на жидкость, которое рассматривается как внешний силовой фактор, искажающий равновесное состояние среды с образованием переходной области со свойствами, отличными от свойств сформировавших его фаз.

В соответствии с изложенным, при моделировании процесса адгезии будем рассматривать межфазный слой жидкость – твердое как самостоятельный объект механического равновесия, подчиняющийся законам механики сплошной среды, с использованием модели несжимаемости жидкости.

Межмолекулярные взаимодействия, составляющие основу специфики строения межфазных слоев, отражаются использованием внутреннего давления среды при разработке тензора напряжений в межфазном слое.



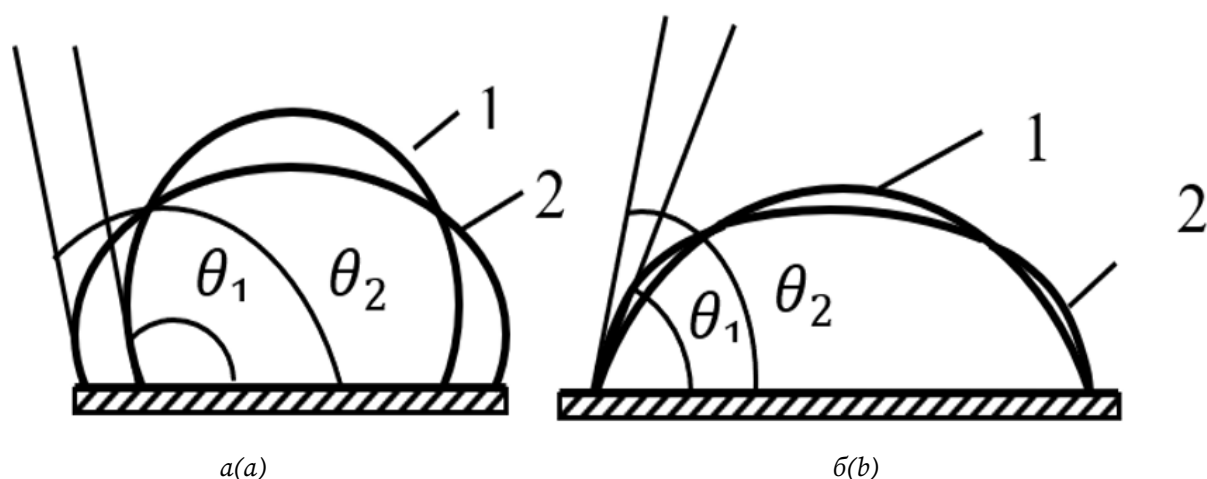
## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Приведенное выше уравнение (1) для работы адгезии получено из общих энергетических соображений, связанных с возникновением новых межфазных поверхностей при разрыве контакта между взаимодействующими фазами. В уравнение входят параметры сидячей капли, образованной при естественном растекании жидкости по твердой поверхности материала под действием силы тяжести. Однако технология получения композиционных материалов связана с распределением жидкостного связующего в массе дисперсной системы, в ходе которого материал подвергается интенсивному внешнему силовому воздействию, сопоставимому с нагрузками при разрыве контакта фаз. Этот фактор может оказаться решающим при формировании адгезионных контактов.

Подобного плана проблемы рассматриваются в последние годы в связи с интенсивным освоением космического пространства. Взаимодействие жидкой и твердой фаз составляет основу многих технологических процессов, таких как сварка, пайка, склеивание материалов и т.п., с которыми неизбежно придется столкнуться в космосе в условиях гравитации. Очевидно, что изменение условий проведения таких операций должно отражаться на результатах проводимых процессов. В связи с этим появилось достаточно большое количество публикаций [13-17], большая часть которых сводится к констатации эффектов, связанных с проявлением адгезии в условиях измененной гравитации.

В [16] приводятся результаты эксперимента, проведенного в ходе параболических полетов Европейского космического агентства. Из материалов следует, что изменение гравитации по-разному отражается на форме сидячей капли в зависимости от значений краевых углов смачивания.

На рис. 1 показан характер изменения формы капель с увеличением гравитации, из которого следует, что внешнее силовое воздействие оказывает влияние на адгезионный процесс, но вопрос о степени влияния и изменении механизма адгезии в работе не раскрывается.



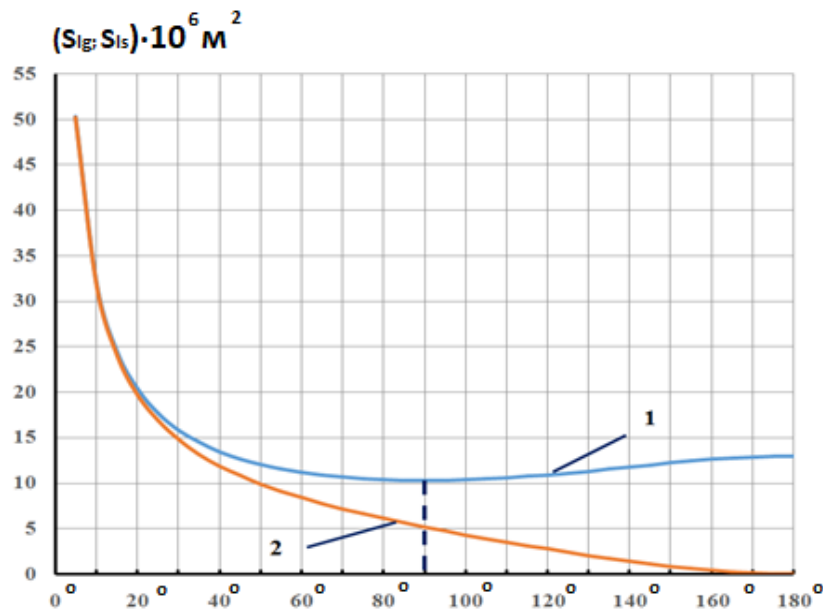
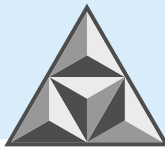
**Рис. 1.** Зависимость профиля капли от уровня гравитации и угла смачивания:

*a* – уровень гравитации –  $g$  ( $9.81 \text{ м}\cdot\text{с}^{-2}$ ); *б* – уровень гравитации больше  $g$

**Fig. 1.** Dependence of droplet profile on gravity level and wetting angle:

*a* – gravity level –  $g$  ( $9.81 \text{ м}\cdot\text{с}^{-2}$ ); *b* – gravity level greater than  $g$





**Рис. 2.** Зависимость площадей межфазных поверхностей сидячей капли от краевого угла смачивания: 1 – жидкость – газ; 2 – жидкость – твердый материал

**Fig. 2.** Dependence of the interphase surface areas of a sitting drop on the wetting edge angle: 1 – liquid – gas; 2 – liquid – solid material

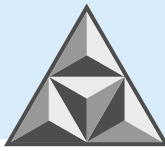
Для объяснения обнаруженного эффекта проведен расчет площадей межфазных поверхностей жидкость – газ и жидкость – твердое для сидячей капли постоянного объема в зависимости от значений краевого угла смачивания  $\theta_0$  в предположении слабого отклонения формы свободной поверхности капли от сферической. Результаты расчета показаны на рис. 2. Приведенные зависимости получены с использованием геометрических соотношений для шарового сегмента постоянного объема, равного объему шаровой капли с радиусом 1 мм.

$$R = \sqrt[3]{\frac{3V}{\pi(2 - 3\cos\theta_0 + \cos^3\theta_0)}}; \quad V = \frac{4}{3}\pi R_0^3; \quad S_{сф} = 2\pi R^2(1 - \cos\theta_0); \quad S_{конт} = \pi(R\sin\theta_0)^2; \quad (5)$$

$$z_c = R \left( \frac{2}{3} \frac{\sin^3\theta_0}{\theta_0 - \sin\theta_0\cos\theta_0} \right). \quad (6)$$

В уравнениях (5) и (6) использованы обозначения:  $V$  – объем шаровой капли радиуса  $R_0$ ;  $R$  – радиус кривизны свободной поверхности;  $S_{lg}$  – площадь свободной поверхности,  $S_{ls}$  – площадь пятна контакта жидкости с твердой поверхностью;  $\theta_0$  – значение краевого угла смачивания;  $U_{lg} = \gamma_{lg} \cdot S_{lg}$  – поверхностная энергия межфазного слоя жидкость – газ, где  $\gamma_{lg} = 0.07 \text{ Н/м}^{-1}$  – поверхностное натяжение межфазного слоя,  $U_{ls} = \gamma_{lg} \cdot \cos\theta_0 \cdot S_{ls}$  – поверхностная энергия межфазного слоя жидкость – твердое,  $z_c$  – расстояние от центра описанной сферы до центра тяжести шарового сегмента,  $z_s$  – превышение центра тяжести над горизонтальной твердой поверхностью,  $\Delta A_G$  – работа силы тяжести при изменении угла смачивания от  $\theta_0 = 0$  до текущего значения.

Кривая 1 на рис. 2 показывает изменение площади свободной поверхности капли, кривая 2 – площади пятна контакта жидкой и твердой фаз с увеличением значения краевого угла смачивания. При  $\theta_0 = 0$  в условиях абсолютного смачивания при растекании жидкости в виде пленки значения площадей максимальны и равны. Для  $\theta_0 = 180^\circ$  при точечном контакте капли с твердой поверхностью межфазный слой жидкость – твердое вырождается в точку, а поверхность жидкость – газ приобретает форму сферы. Зависимость  $S_{lg}(\theta_0)$  имеет минимум



при  $\theta_0 = 90^\circ$ , что изменяет представление о сферической форме свободной поверхности капли. Сферическая форма характерна для свободной капли, не подверженной внешним воздействиям, в то время как в рассматриваемом случае на объект накладываются ограничения в виде межфазного слоя жидкость – твердое, искажающего форму.

Повышение гравитации, т.е. увеличение силы тяжести, приводит к сплющиванию сидячей капли и может быть реализовано либо за счет увеличения  $\theta_0$  при фиксированном  $S_{ls}$ , либо повышения  $S_{ls}$  при неизменном  $\theta_0$ , либо одновременным проявлением указанных факторов. Центр тяжести капли опускается, приближаясь к твердой поверхности, уменьшая значение потенциальной энергии системы. Полная энергия системы с учетом несжимаемости жидкости остается неизменной, что предполагает увеличение внутренней или свободной энергии, обусловленное образованием межфазных поверхностей. Работа силы тяжести в этом процессе должна быть равна работам сил поверхностного натяжения на перемещениях с изменением площадей межфазных поверхностей.

В табл. 1 представлены результаты расчета по изменению параметров сидячей капли в зависимости от значений краевого угла смачивания.

**Таблица 1.** Результаты расчета по изменению параметров сидячей капли в зависимости от значений краевого угла смачивания  
**Table 1.** Calculation results on the change of sitting droplet parameters depending on the values of the wetting edge angle

$\theta_0$	$R \cdot 10^3$ , [м]	$S_{lg} \cdot 10^6$ , [м <sup>2</sup> ]	$S_{ls} \cdot 10^6$ , [м <sup>2</sup> ]	$U_{lg} \cdot 10^6$ , [Н · м]	$U_{ls} \cdot 10^6$ , [Н · м]	$Z_c \cdot 10^3$ , [м]	$P_\gamma$ , [Па]	$Z_s \cdot 10^3$ , [м]	$\Delta A_C \cdot 10^8$ , [Н · м]
0	$\infty$	$\infty$	$\infty$	$\infty$	$\infty$	$\infty$	0	0	0
30°	4.26	15.27	14.25	1.07	0.86	3.94	32.86	0.25	1.03
90°	126	9.97	4.99	0.70	0	0.54	111.10	0.54	2.22
180°	1.00	12.56	0	0.88	0	0	140.00	1.00	4.11

Значение  $U_{ls} = 0$  при  $\theta_0 = 90^\circ$  обусловлено тем, что в этом случае, как будет показано далее, межфазный слой жидкость – твердое не образуется, а при  $\theta_0 = 180^\circ$  вырождается в точку. Сопоставление значений поверхностных энергий межфазных слоев при деформации капли с работой силы тяжести  $\Delta A_C$  показывает, что эти величины существенно отличаются. Так, переход системы из состояния с  $\theta_0 = 90^\circ$  в состояние с  $\theta_0 = 30^\circ$  сопровождается совершением работы внешней силой тяжести, равной

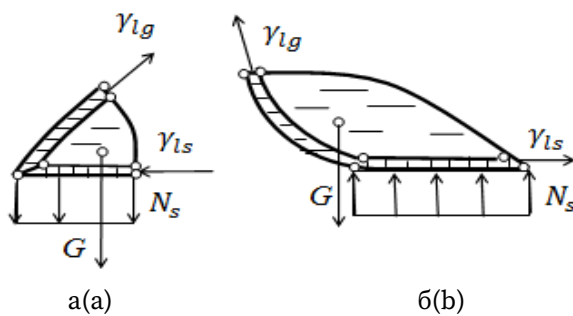
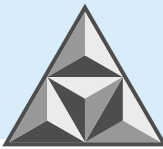
$$\Delta A_C = (1.03 - 2.22) \cdot 10^{-8} = -1.19 \cdot 10^{-8} \text{ Н} \cdot \text{м},$$

а суммарное изменение поверхностной энергии составляет

$$\Delta U = [(1.07 - 0.7) + 0.86] \cdot 10^{-6} = 1.23 \cdot 10^{-6} \text{ Н} \cdot \text{м},$$

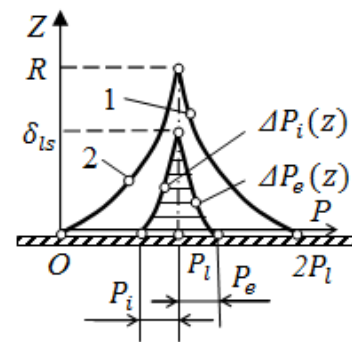
т.е. значения сопоставляемых величин отличаются на два порядка.

Причина обнаруженного несоответствия может состоять в ошибочном выборе традиционно используемого направления поверхностного натяжения жидкость – твердое  $\gamma_{ls}$  – из газовой фазы в жидкую. Смена направления этого силового фактора на противоположное снимает обнаруженное несоответствие, т.к. работа сил поверхностного натяжения, связанная с увеличением площади контакта  $S_{ls}$ , в этом случае будет отрицательной, уменьшая значение поверхностной энергии системы. Кроме того, отпадает необходимость использования поверхностного натяжения твердое – газ  $\gamma_{sg}$  в уравнении Юнга при рассмотрении равновесия линии трехфазного контакта (ЛТК).



**Рис. 3.** Внешние силовые факторы, приложенные к межфазным слоям:  $a - \theta_0 < 90^\circ$ ;  $b - \theta_0 > 90^\circ$

**Fig. 3.** External force factors applied to the interfacial layers:  $a - \theta_0 < 90^\circ$ ;  $b - \theta_0 > 90^\circ$



**Рис. 4.** Внутренние силовые факторы в межфазном слое жидкость – материал

**Fig. 4.** Internal force factors in the liquid – material interfacial layer

На рис. 3 показаны силовые факторы, действующие на область сидячей капли, граничащей с ЛТК. Здесь использованы обозначения:  $G$  – вес рассматриваемого объекта;  $N_s$  – реакция твердой поверхности. При  $\theta_0 < 90^\circ$  твердая фаза притягивает среду межфазного слоя, а поверхностное натяжение  $\gamma_{ls}$  работает как распорка, препятствующая сворачиванию межфазной поверхности  $S_{ls}$  под действием поверхностного натяжения  $\gamma_{lg}$ .

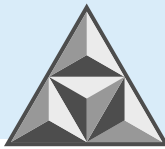
При  $\theta_0 > 90^\circ$  реакция  $N_s$  меняет направление на противоположное; твердая фаза стремится оттолкнуть межфазный слой, а  $\gamma_{ls}$  действует как растяжка, препятствующая увеличению площади  $S_{ls}$ .

Возвращаясь к вопросу об изменении форм сидячей капли с возрастанием гравитации, отметим, что трансформация капли по схеме (см. рис. 1, б) не предполагает увеличения межфазной поверхности жидкость – твердое в процессе деформации по следующей причине. Увеличение площади  $S_{ls}$  сопряжено со снижением поверхностной энергии, т.е. находится в противоречии с общей тенденцией. В соответствии с этим увеличение внутренней энергии осуществляется деформацией свободной поверхности капли с ростом площади  $S_{lg}$  при неизменном значении  $S_{ls}$ , т.е. реализуется вариант по схеме, представленной на рис. 1, б.

Для  $\theta_0 > 90^\circ$  возрастание внутренней энергии капли в процессе деформации происходит путем увеличения площади  $S_{ls}$ , при котором поверхностное натяжение  $\gamma_{ls}$  совершает положительную работу. Увеличение значения угла смачивания в этих условиях снижает поверхностную энергию системы, что противоречит условиям деформации, то есть реализуется вариант, представленный на рис. 1, а.

Проведенный анализ позволил установить общие закономерности образования и строения сидячей капли, а также определить направление изменений системы при внешнем силовом воздействии. В области значений краевого угла смачивания  $\theta_0 < 90^\circ$ , наиболее приемлемой для создания композиционных материалов, наблюдается противоречие принятым представлениям взаимодействия жидкой и твердой фаз в процессе формирования межфазных контактов, составляющих основу явления адгезии. Взаимодействие разнородных фаз осуществляется на молекулярном уровне в тонких межфазных слоях, которые часто рассматриваются как геометрические поверхности, т.е. объекты, не имеющие толщины. Изменение свойств системы в этом случае происходит скачкообразно при переходе из одной фазы в другую, а сам переход сопровождается изменением термодинамических параметров системы. Уравнения (1) и (2) в предыдущем разделе получены на основе таких представлений.

Однако такой подход не дает возможность судить о характере межфазных взаимодействий, позволяющем целенаправленно воздействовать на них с получением



запланированного результата. В соответствии с этим воспользуемся подходом, сформулированным в работах Б.В. Дерягина, представив контактную зону слоем конечной толщины – межфазным слоем с плавным изменением параметров. Рассмотрим межфазный слой жидкость – твердый материал как самостоятельный объект системы, к которому применимы условия равновесия механики сплошной среды. Специфика межфазных взаимодействий отражена использованием фактора внутреннего или молекулярного давления среды, а жидкая фаза предполагается несжимаемой.

Особенность межфазных слоев состоит в анизотропии тензора межфазных напряжений в соответствии с формулой Баккера (3), приводящей к возникновению специфического силового фактора – поверхностного натяжения, проявляемого в условиях межфазных взаимодействий. Представим тензор напряжений в межфазном слое жидкость – твердый материал совокупностью шаровой и девиаторной частей, в котором шаровая часть определяет давление, постоянное в модели несжимаемой жидкости и включающее три компоненты, равные внутреннему давлению жидкости в произвольной точке межфазного слоя:

$$P = P_{xx} = P_{yy} = P_{zz} = P_l.$$

Девиаторная часть тензора напряжений отвечает за деформацию среды, которая в модели несжимаемой жидкости осуществляется без изменения объема. Обозначим компоненты девиатора напряжений через  $\sigma'_{ij}$ , где индексы в обозначении определяют расположение контрольных площадок. Основное свойство девиатора напряжений состоит в равенстве нулю его первого инварианта, т.е. компоненты девиатора должны удовлетворять требованию:

$$\sigma'_{xx} + \sigma'_{yy} + \sigma'_{zz} = 0, \quad (7)$$

из которого следует, что добавка девиатора не отражается на шаровой части тензора напряжений, т.е. не приводит к изменению давления. Таким образом, тензор напряжений можно представить в виде:

$$A = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_l & 0 & 0 \\ 0 & P_l & 0 \\ 0 & 0 & P_l \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sigma'_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma'_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma'_{zz} \end{bmatrix},$$

так что

$$\sigma_{xx} = P_l + \sigma'_{xx}; \quad \sigma_{yy} = P_l + \sigma'_{yy}; \quad \sigma_{zz} = P_l + \sigma'_{zz}. \quad (8)$$

Введем декартову систему координат с осями  $OX$  и  $OY$ , расположенными в плоскости межфазного слоя, и осью  $OZ$ , перпендикулярной плоскости. Среда в межфазном слое находится под воздействием двух объемных фаз, ограничивающих его, причем каждая образует силовые поля, сформированные силами молекулярного притяжения различной интенсивности. Для равновесия межфазного слоя необходимо выполнение граничных условий в зоне контакта слоя с объемной жидкой фазой, сводящихся к требованиям:

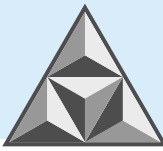
$$P = P_l; \quad \frac{dP}{dz} = 0,$$

где  $P_l$  – внутреннее давление в объемной фазе жидкости. Условия равновесия:

$$\frac{d\sigma_{zz}}{dz} = 0, \text{ т.е. } \sigma_{zz} = \text{const}, \quad (9)$$

должны выполняться в любой точке межфазного слоя.

Рассмотрим процесс формирования межфазного слоя как силовое воздействие твердой фазы на объемную фазу жидкости, граничащую с ней. Твердая стенка в условиях



удовлетворительного смачивания притягивает межфазный слой, приводя к повышению давления жидкости на поверхности твердой фазы на величину  $P_e$ . Тогда компонента  $\sigma_{zz}$  тензора напряжений в межфазном слое запишется:

$$\sigma_{zz} = P_l + P_e + \sigma'_{zz}. \quad (10)$$

Для удовлетворения граничных условий (3) необходимо выполнение требования  $\sigma_{zz} = P_l$ .

Внутреннее давление  $P_l$  определяется свойствами жидкости, образуя уравновешенное поле, в котором дальнедействующие силы молекулярного притяжения уравновешиваются силами отталкивания, обусловленными столкновениями молекул.

Из положений механики [18] известно, что уравновешенную систему сил можно присоединять или исключать из действующей системы сил, не нарушая равновесия системы. Таким образом, давление  $P_l$  может быть исключено из выражений (2) при записи уравнений равновесия. Тогда тензор межфазных напряжений будет содержать только девиаторные компоненты при значении  $\sigma_{zz} = 0$ . С учетом симметрии системы относительно оси OZ и свойств девиатора (1), компоненты тензора напряжений (2) будут равны:

$$\sigma'_{zz} = -P_e; \quad \sigma'_{xx} = \sigma'_{yy} = \frac{P_e}{2}. \quad (11)$$

Далее воспользуемся известным в механике соотношением [18]:

$$P = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3}, \quad (12)$$

в котором  $P = P_e$ , а значения компонент тензора межфазных напряжений составят:

$$\sigma_{zz} = 0; \quad \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{3P_e}{2}. \quad (13)$$

Таким образом, контактное взаимодействие жидкой и твердой фаз сводится к напряжениям  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{yy}$ , действующим в плоскости межфазного слоя и формирующим поверхностное натяжение  $\gamma_{ls}$ . По нормали к поверхностному слою напряжения постоянны в каждой точке межфазного слоя и составляют  $P_l$ .

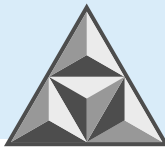
Параметр  $P_e$  определяет давление жидкости на границе межфазного слоя с твердой поверхностью строительного материала, то есть является внешним силовым фактором по отношению к межфазному слою. Однако компоненты тензора (2) определяют напряжения среды, действующие внутри межфазного слоя, и являются для него внутренними силовыми факторами, сумма которых в соответствии со свойством внутренних сил должна быть равна нулю. Из этого следует, что в межфазном слое должны присутствовать силовые факторы, уравновешивающие рассмотренные напряжения, определяемые выражением (2). Такими факторами являются напряжения, создаваемые воздействием на межфазный слой объемной фазы жидкости.

Введем в рассмотрение параметр  $P_i$ , равный давлению жидкости на границе межфазного слоя с объемной фазой жидкости, значение которого составляет  $P_i = P_l$ . Параметры  $P_e$  и  $P_i$  определяют давления среды в граничных точках межфазного слоя, являясь для него внешними силовыми факторами. Воздействие объемных фаз на межфазный слой формирует внутренние силовые поля  $\Delta P_e(z)$  и  $\Delta P_i(z)$  с напряжениями, зависящими от положения точки, то есть координаты  $z$ . С учетом свойств внутренних сил системы, в каждой точке межфазного слоя должно выполняться условие:

$$\Delta P_e(z) + \Delta P_i(z) = 0, \quad (14)$$

из которого вытекает равенство значений напряжений и противоположность их направлений.

Рассматриваемые силовые поля формируются дальнедействующими силами межмолекулярного притяжения, значения которых максимальны в граничных точках



межфазного слоя, убывая по мере удаления от них. На рис. 4 показано распределение этих зависимостей по толщине межфазного слоя. Кривые 1 и 2 построены в предположении абсолютного смачивания жидкостью твердой поверхности для  $\theta_0 = 0$ , т.е. включают все возможные варианты межфазного взаимодействия. При значениях краевого угла смачивания, отличных от нуля, интенсивность воздействия твердой фазы на жидкость ослабевает, что приводит к уменьшению области определения функций до значения толщины межфазного слоя  $\delta_{ls} < R$ . Тем не менее граничные условия в зоне контакта межфазного слоя с объемной фазой жидкости остаются неизменными, что отражено на рисунке зависимостями  $\Delta P_e(z)$  и  $\Delta P_i(z)$ .

Распределение давления  $\Delta P_i(z)$  не зависит от условий смачивания жидкостью твердой поверхности, а определяется свойствами жидкой фазы, то есть зависимостью сил молекулярного притяжения от расстояния в пределах радиуса дальнего действия  $R$ . Для удовлетворения условия (8) необходимо, чтобы зависимость  $\Delta P_e(z)$  была симметрична распределению  $\Delta P_i(z)$  относительно оси  $P = P_i$ .

При выводе приведенных соотношений использовано правило знаков напряжений, принятое в теории Ван-дер-Ваальса: положительными считаются сжимающие напряжения. Из этого следует, что напряжения  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{yy}$  в выражении (9) являются сжимающими, т.е. поверхностное натяжение  $\gamma_{ls}$  направлено из жидкости в газовую фазу, подтверждая ранее сформированное представление на основе анализа деформации капли.

Тензор межфазных напряжений (9) обеспечивает выполнение требования  $\sigma_{zz} = \text{const}$ , но содержит неизвестный параметр  $P_e$ , значение которого определяется условиями смачивания, то есть зависят от значения  $\theta_0$ . Для выявления этой зависимости воспользуемся понятием объемной силы, возникающей под действием градиента давления в зависимости  $\Delta P_e(z)$ . Объемная сила  $F_V$  в механике определяется как отношение силы  $\Delta F$ , приложенной к малому элементу среды, к массе этого элемента  $\Delta m$  и выражается зависимостью [18]:

$$F_V = \frac{1}{\rho} \frac{dP}{dz}, \quad (15)$$

где  $\rho$  – плотность среды,  $P$  – давление. В зоне контакта межфазного слоя с твердой поверхностью материала возникает особенная ситуация, влияющая на процесс адгезии и вызванная отличием свойств контактирующих сред.

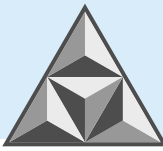
Для подвижной жидкой среды межфазного слоя деформации объема в любом направлении не ограничены, что позволяет реализовать присутствующие в выражении (2) компоненты дивергента напряжений, получив давление, включающее три равные по величине составляющие  $P_e$ . Для твердой фазы с фиксированным положением молекул такая возможность исключается, в результате чего реакция твердой поверхности  $N_s$  на межфазный слой сведется к одной компоненте, нормальной к поверхности. Пользуясь выражением (8) для определения значения  $N_s$ ,

$$P = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3}; P_e = \frac{N_s}{3}; N_s = 3P_e,$$

то есть реакция поверхности твердого материала на жидкость будет в три раза превышать межфазное давление жидкости в области контакта фаз.

Выделим элемент межфазного слоя в форме параллелепипеда, одно из ребер которого равно толщине межфазного слоя  $\delta_{ls}$ , а два других формируют грань площадью  $S$ . Запишем уравнение равновесия элемента в проекции на ось  $Z$  с учетом выражения (11):

$$N_s \cdot S = F_V \cdot \Delta m = F_V \cdot \rho \cdot S \cdot \delta_{ls},$$



откуда получим

$$\frac{d\Delta P_e}{dz} \cdot \delta_{ls} = 3P_e. \quad (16)$$

Для заданной жидкости параметр  $\delta_{ls}$  определяется условиями смачивания и может принимать значения в интервале  $R \geq \delta_{ls} \geq 0$ , в зависимости от краевого угла смачивания  $\theta_0$ . Это позволяет рассматривать  $\delta_{ls}$  как независимую переменную  $z$ , а  $P_e$  как текущее значение  $\Delta P_e(z)$  в рассматриваемой точке межфазного слоя. Таким образом, уравнение (12) преобразуется в уравнение с разделяющимися переменными

$$\frac{d\Delta P_e}{\Delta P_e} = 3 \frac{dz}{z} \text{ с решением } \Delta P_e = C (z)^3,$$

где  $C$  – константа интегрирования, значение которой может быть определено из граничного условия на твердой стенке при абсолютном смачивании жидкостью твердой поверхности, когда  $\delta_{ls} = R$ .

Выберем начало отсчета координаты  $z$  на границе межфазного слоя с объемной фазой жидкости в связи с тем, что граничные условия в этой точке остаются неизменными при любых условиях смачивания. При абсолютном смачивании граничные условия на твердой поверхности запишутся при  $z = R$ :  $\Delta P_e = P_e = P_l$ , а решение дифференциального уравнения (12) предстает в виде:

$$\Delta P_e = P_l \left(\frac{z}{R}\right)^3. \quad (17)$$

Зависимость (17) содержит два экспериментальных параметра:  $P_l$  – внутреннее давление жидкости;  $R$  – радиус дальнего действия молекул жидкости. Внутреннее давление определяется экспериментально исследованием сжимаемости жидкости, и по данным различных литературных источников, составляет для воды от 10000 до 15000 атм. [8, 11]. Значения радиуса дальнего действия в известной литературе приводятся только на уровне оценок, которые могут существенно отличаться друг от друга [19, 20].

Проведенное исследование позволяет определить поверхностное натяжение межфазного слоя жидкость – твердый материал для  $\theta_0 = 0$  с использованием компонент тензора (10) и уравнения Баккера, которое может быть приведено к виду:

$$\gamma_{ls} = \gamma_{lg} = \int_0^R \sigma_{xx} dz = \frac{3}{8} P_l R.$$

Полученное выражение определяет поверхностное натяжение межфазного слоя жидкость – твердое  $\gamma_{ls}$  для случая абсолютного смачивания, когда его толщина равна радиусу дальнего действия молекул жидкости  $R$ .

Тогда

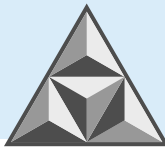
$$R = \frac{8 \gamma_{lg}}{3 P_l}.$$

Приведенный результат для абсолютного смачивания практически реализуется крайне редко. Однако соотношения позволяют описать структуру межфазного слоя жидкость – твердый материал для любых значений краевого угла смачивания с использованием зависимости (11) при  $z = \delta$ .

$$\Delta P_e = \Delta P_\delta = P_l \left(\frac{\delta}{R}\right)^3.$$

Толщина межфазного слоя  $\delta$  может быть определена путем следующих преобразований:

$$\gamma_{ls} = \int_0^\delta \sigma_{xx} dz = \int_0^\delta \frac{3}{2} \Delta P_e \cdot dz = \frac{3}{8} \frac{P_l}{R^3} \delta^4.$$



С другой стороны, поверхностное натяжение  $\gamma_{ls}$  может быть найдено из равновесия ЛТК в предположении  $\gamma_{sg} = 0$ :

$$\gamma_{ls} = \gamma_{lg} \cos \theta_0.$$

Приравнивая записанные выражения, получаем:

$$\delta^4 = \left(\frac{8\gamma_{lg}}{3P_0}\right)^4 \cos^4 \theta_0; \quad \delta = R(\cos \theta_0)^{0,25}; \quad \Delta P_\delta = P_l (\cos \theta_0)^{0,25}. \quad (18)$$

Таким образом, воздействие твердой поверхности на межфазный слой приводит к возникновению дополнительного нормального напряжения на твердой стенке  $\Delta P_\delta$ , в результате чего, без учета давления  $P_l$ , полное напряжение в этой области составит:

$$P_\delta = P_l [1 + (\cos \theta_0)^{0,25}]. \quad (19)$$

Напряжение  $P_\delta$  является фактором, определяющим адгезию жидкости к поверхности материала, т.е. прочность контакта твердой и жидкой фаз. Прочность жидкости зависит от внутреннего давления  $P_l$ , значение которого одинаково, как показано выше, в каждой точке межфазного слоя, включая точки контакта фаз. Исходя из этого, множитель в квадратной скобке связан с повышением прочности межфазной связи вследствие адгезии. Сопоставим полученную зависимость с уравнением Дюпре-Юнга (2), определяющим работу адгезии  $W_a$ :

$$W_a = \gamma_{lg}(1 + \cos \theta_0). \quad (20)$$

Структуры сопоставляемых уравнений аналогичны, то есть множитель в скобках в уравнении (17) связан с повышением прочности среды межфазного слоя. Проведем сопоставление с результатами, полученными по уравнению Дюпре-Юнга. Превышение прочности связи адгезионного соединения над прочностью когезионных сил жидкости связано с добавками к единице в скобках записанных уравнений. Сравнение значений этих добавок приведено в табл. 2.

**Таблица 2.** Сопоставление результатов расчета

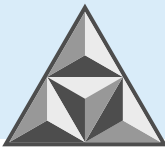
**Table 2.** Comparison of calculation results

$\theta_0$	90°	80°	70°	60°	50°	40°	30°	20°	10°
$(\cos \theta_0)^{0,25}$	0	0.65	0.76	0.84	0.90	0.94	0.96	0.98	1.00
$\cos \theta_0$	0	0.17	0.34	0.50	0.64	0.77	0.87	0.94	0.98

Из табл. 2 видно, что наиболее сильно адгезия проявляется при малых значениях краевых углов смачивания  $\theta_0$  в условиях близких к абсолютному смачиванию, когда прочность связи возрастает в два раза. Однако интенсивность изменения сопоставляемых величин существенно отличается – в области значений  $\theta_0 < 60^\circ$  эффект адгезии незначительно зависит от значения  $\theta_0$ , что подтверждается экспериментальными данными [21], а в уравнении Дюпре-Юнга такая особенность отсутствует.

Причина обозначенного расхождения может состоять в ошибочности исходных посылок при выводе уравнения Дюпре-Юнга, связанных с образованием новых поверхностей после разрыва адгезионного контакта. Этим объясняется повышение прочности адгезионной связи. При анализе энергетических затрат с изменением условий смачивания показано, что формирование межфазной поверхности  $S_{ls}$  происходит при совершении отрицательной работы поверхностного натяжения  $\gamma_{ls}$ , т.е. образование новой поверхности должно сопровождаться уменьшением поверхностной энергии системы. В соответствии с этим справедливость уравнения (18) остаются под вопросом.





## ДИСКУССИОННЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

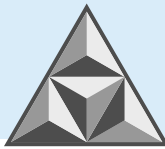
Рассмотренные результаты ставят под сомнение некоторые сложившиеся положения теории поверхностных явлений, а иногда находятся в противоречии с ними. В соответствии с этим возникает необходимость дополнительных пояснений к выдвинутым в работе новым положениям. Прежде всего обратимся к проблеме моделирования эффекта адгезии, составляющего основу производства композиционных материалов. Разработанный подход объясняет механизм возникновения эффекта, как формирование в системе напряжений, превышающих когезионные и действующие на поверхности твердой фазы, обеспечивая сцепление. При этом внутреннее давление среды  $P_l$ , обусловленное действием сил молекулярного притяжения или когезионных сил, остается постоянным в каждой точке межфазного слоя, обеспечивая его равновесие.

Этот неочевидный, на первый взгляд, результат, связан с учетом анизотропии тензора напряжений в межфазном слое и разделением силовых факторов системы на внешние и внутренние. Под внешними силами в механике понимают силы воздействия на рассматриваемую систему со стороны объектов, не входящих в ее состав. Внутренние силы обеспечивают взаимодействие между элементами системы таким образом, чтобы их сумма равнялась нулю. В соответствии с этим при рассмотрении равновесия межфазного слоя напряжения, определяемые тензором (2), отнесены к классу внутренних силовых факторов. Равенство нулю их суммы обеспечивается условием (10) по схеме, представленной на рис. 4.

Внешними по отношению к межфазному слою будут воздействия  $P_e$  и  $P_i$  со стороны объемных фаз, приложенные к граничным поверхностям межфазного слоя, а также напряжения  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{yy}$  в выражениях (8), формирующие поверхностное натяжение  $\gamma_{ls}$ . Совокупность внешних силовых факторов, приложенных к выделенному элементу сидячей капли, показана на рис. 3. Ограничимся рассмотрением внешних сил, показанных на рис. 3, а, т.к., с точки зрения разработки композиционных материалов, эта схема представляет большой интерес. Приведенные на рисунке силовые факторы отражают воздействие на рассматриваемый элемент среды выведенной из рассмотрения части сидячей капли.

Поверхностное натяжение  $\gamma_{lg}$ , в соответствии с приведенным на рисунке направлением, препятствует, с одной стороны, сокращению межфазной поверхности, понижающему значение внутренней энергии системы, а с другой – поступлению жидкости в область разрежения, возникающую при контакте с газовой фазой. Поверхностное натяжение  $\gamma_{ls}$  ограничивает увеличение межфазной поверхности, связанное со снижением внутренней энергии системы, а также предотвращает выдавливание жидкости из области повышенного давления, создаваемого твердой поверхностью.

Направление опорной реакции  $N_z$  определяется действием объемных сил, возникающих вследствие градиента давления в распределении  $\Delta P_e(z)$ . В данном случае объемные силы в межфазном слое направлены в сторону твердой поверхности, обеспечивая притяжение межфазного слоя, формирующего адгезию. Несмотря на то что объемные силы формируются в межфазном слое, являясь внутренними силами, их действие приводит к возникновению опорной реакции и других внешних сил, показанных на рис. 3. Таким образом, специфика поверхностных явлений связана с образованием градиента давления, значение которого, с учетом высоких значений внутренних давлений и малой толщины межфазного слоя, может достигать огромных величин.



Обоснованное изменение направления поверхностного натяжения  $\gamma_{ls}$  в сторону, противоположную общепринятой, влечет за собой изменения в известном уравнении Юнга:

$$\gamma_{sg} = \gamma_{ls} + \gamma_{lg} \cdot \cos\theta_0.$$

Поверхностное натяжение твердый материал – газ  $\gamma_{sg}$  было введено в связи с нарушением условий равновесия линии трехфазного контакта для значений  $\theta_0 < \pi/2$ . Выбор традиционного направления поверхностного натяжения, независимо от вида межфазного слоя, и характера смачивания в межфазном слое жидкость – твердый материал, обусловлен предположением о когезионном механизме образования поверхностного натяжения, но в работе показан градиентный механизм его возникновения.

Физическая сторона поверхностного натяжения твердый материал – газ  $\gamma_{sg}$  основана на предположении о мономолекулярной структуре этого межфазного слоя [22], в которой образование градиентов давления, формирующих поверхностное натяжение, скорее всего, невозможно. Кроме того, не приводятся данные о площади этой межфазной поверхности, необходимой для определения работы адгезии. Методы экспериментального определения параметра  $\gamma_{sg}$  к настоящему времени не сформулированы, что ставит под сомнение факт его существования. Остается непонятным, каким образом рассматриваемый межфазный слой стыкуется с линией трехфазного контакта сидячей капли при толщине слоя в одну молекулу. На наш взгляд, представленные доводы достаточны для исключения поверхностного натяжения, т.е.  $\gamma_{sg} = 0$ . Этот результат использован в настоящей работе.

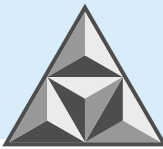
В материалах работы показано, что форма сидячей капли в виде полусферы обладает минимальным значением поверхностной энергии, в связи с чем в зависимости поверхностной энергии системы от краевого угла смачивания появляется минимум. При значении  $\theta_0 = \pi/2$  межфазный слой жидкость – твердый материал не образуется, так как давления в объемных фазах, ограничивающих межфазный слой, одинаковы и образование переходной зоны не требуется.

Приведенные соображения подтверждают правомерность использованных положений и открывают широкие перспективы к дальнейшему изучению поверхностных явлений на границе строительного материала и развитию положений, изложенных ранее в [17, 23, 24]. Отличительной особенностью разработанного подхода является независимость полученных результатов от механизмов межфазных взаимодействий, круг которых чрезвычайно широк. Таким образом, в ходе проведенного исследования разработан принципиально новый подход к моделированию поверхностных явлений, основанный на использовании аппарата механики сплошной среды и пригодный к применению вне зависимости от природы сил, формирующих межфазные взаимодействия.

## ВЫВОДЫ

Проведено теоретическое обоснование использования внутреннего давления жидкости при моделировании явлений на твердой поверхности строительного материала. Установлено, что формой поверхности сидячей капли с минимальным запасом поверхностной энергии является полусфера. Реализовано предположение Б.В. Дерягина о возможности замены различных видов межфазных взаимодействий системой межфазных натяжений.

Показано, что работа сил поверхностного натяжения жидкость – твердый строительный материал при образовании межфазной поверхности и значениях краевого угла смачивания



$\theta_0 < \pi/2$  отрицательна. При моделировании поверхностных явлений на границе твердый материал – газ указано на несостоятельность использования поверхностного натяжения.

Разработан тензор напряжений в межфазном слое жидкость – твердый строительный материал, представленный совокупностью шаровой и девиаторной частей. Установлен нелинейный характер распределения напряжений в таком межфазном слое, приводящий к формированию мощных градиентов давления по его толщине и определяющий специфику поверхностных явлений.

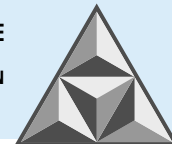
## СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. **Ролдугин В.И., Харитонов Т.В.** Механизм действия и место приложения капиллярных сил // *Коллоид. журнал*. 2017. Т. 79, № 4. С. 493-501. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=29404302>
2. **Русанов А.И.** Коллоидно-химические и оптические свойства наноструктур, межфазных слоев и пористых тел // *Коллоид. журн.* 2012. Т. 74, № 2. С. 148.
3. **Durand M.** Mechanical approach to surface tension and capillary phenomena // *Amer. J. Phys.* 2021. Vol. 89. P. 261-266.
4. **Дерягин Б.В.** Теория устойчивости коллоидов и тонких пленок. М.: Наука, 1986. 206 с.
5. **Роулинсон Дж., Уидом Б.** Молекулярная теория капиллярности. М.: Мир, 1986. 375 с.
6. **Френкель Я.И.** Кинетическая теория жидкостей. Л.: Наука, 1975. 592 с.
7. **Колесников И.М.** Термодинамика физико-химических процессов. М.: Акад. им. И.М. Губкина, 1992. 289 с.
8. **Мелвин-Хьюз Э.А.** Физическая химия. М.: Изд-во иностр. лит., 1962. 537 с.
9. **Карцев В.Н., Штыков С.Н., Панкин К.Е., Батов Д.В.** Молекулярные силы и внутреннее давление жидкостей // *Журнал структ. хим.* 2012. Т. 53, № 6. С. 1113-1118.
10. **Bakker G.** Kapillarität und Oberflächenspannung: Handbuch der Experimentalphysik. Leipzig: Akadem. Verlagsgesellschaft, 1928. 458 p.
11. **Harashima A.**, Molecular Theory of Surface Tension // *Adv. Chem. Phys.*, Vol. 1, New York: Yale University Press, 1958. 326 p.
12. **Малинин Н.Н.** Прикладная теория пластичности и ползучести. М.: Машиностроение, 1975. 400 с.
13. **Ababneh A., Amirfazli A., Elliott J.W.** Effect of Gravity on the Macroscopic Advancing Contact Angle of Sessile Drops // *Canad. J. Chem. Eng.* 2006. Vol. 84. P. 39-43.
14. Brutin D., Zhu Z.Q., Rahli O. Sessile Drop in Microgravity: Creation, Contact Angle and Interface // *Microgravi Sci. Technol.* 2009. Vol. 21, no. 1. P. 107-114.
15. **Abel G., Ross G.G., Andrzejewski L.** Transformation of a disturbed sitting drop // *Adv. Space Res.* 2004. Vol. 33, no. 8. P. 1431-1438.
16. **Кабов О.А., Зайцев Д.В.** Влияние гистерезиса смачивания на растекание капли под действием гравитации // *Докл. Акад. наук.* 2013. Т. 451, № 1. С. 37-40.
17. **Ignatyev A.A., Gotovtsev V.M.** Transformation of gisturbed sittin drop // *Умные композиты в строительстве*. 2020. Т. 1, вып. 1. С. 39-43. URL: [http://comincon.ru/index.php/tor/V1N1\\_2020](http://comincon.ru/index.php/tor/V1N1_2020)
18. **Лойцянский Л.Г.** Механика жидкости и газа: учебник. М.: Наука, 1978. 840 с.
19. **Каплан И.Г.** Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука, 1982. 312 с.
20. **Русанов А.И.** Фазовые равновесия и поверхностные явления. Л.: Химия, 1967. 388 с.
21. **Verkholomov V.K.** Two Concepts While Determining Contact Angle Value // *Modern Sci.* 2017. No. 1. P. 8-13.
22. **Товбин, Ю.К.** Теория физико-химических процессов на границе газ – твердое тело. М.: Наука, 1990. 288 с.
23. **Ignatyev A.A., Gotovtsev V.M., Razgovorov P.B.** Theoretical background for simulation of physical processes in the interfacial layer «solid-liquid» // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021. Vol. 1889. P. 022077. DOI: 10.1088/1742-6596/1889/2/022077
24. **Ignatyev A.A., Gotovtsev V.M., Razgovorov P.B.** Theoretical background for simulation of the interfacial layer «liquid-gas» // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021. Vol. 1889. P. 022088. DOI: 10.1088/1742-6596/1889/2/022088

Поступила в редакцию 26.10.2023

Одобрена после рецензирования 05.12.2023

Принята к опубликованию 12.12.2023



## REFERENCES

1. **Roldugin, V.I. & Kharitonova, T.V.** (2017) Action mechanism and place of capillary forces application, *Colloid. J.*, 79(4), pp. 493-501 [online]. Available at: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=29404302> (in Russian).
2. **Rusanov, A.I.** (2012) Colloid-chemical and optical properties of nanostructures, interfacial layers and porous bodies, *Colloid. J.*, 74(2), pp. 148 (in Russian).
3. **Durand, M.** (2021) Mechanical approach to surface tension and capillary phenomena, *Amer. J. Phys.*, 89, pp. 261-266.
4. **Deryagin, B.V.** (1986) *Theory of colloids and thin films stability*. M.: Nauka (in Russian).
5. **Rawlinson, J. & Widom, B.** (1986) *Molecular theory of capillarity*. M.: Mir (in Russian).
6. **Frenkel, Ya.I.** (1975) *Kinetic theory of liquids*. L.: Nauka (in Russian).
7. **Kolesnikov, I.M.** (1992) *Thermodynamics of physical and chemical processes*. Moscow: Akad. im. I.M. Gubkina (in Russian).
8. **Melvin-Hughes, E.A.** (1962) *Physical Chemistry*. Moscow: Izd-vo inostr. lit. (in Russian).
9. **Kartsev, V.N., Shtykov, S.N., Pankin, K.E. & Batov, D.V.** (2012) Molecular forces and internal pressure of liquids, *J. Struct. Chem.*, 53(6), pp. 1113-1118 (in Russian).
10. **Bakker, G.** (1928) *Kapillarität und Oberflächenspannung: Handbuch der Experimentalphysik*. Leipzig: Akadem. Verlagsgesellschaft.
11. **Harashima, A.** (1958) Molecular Theory of Surface Tension, *Advances in Chemical Physics*, (1), New York: Yale University Press.
12. **Malinin, N.N.** (1975) *Applied theory of plasticity and creep*. M.: Mashinostroenie (in Russian).
13. **Ababneh, A., Amirfazli, A. & Elliott, J.W.** (2006) Effect of Gravity on the Macroscopic Advancing Contact Angle of Sessile Drops, *Canad. J. Chem. Eng.*, 84, pp. 39-43.
14. **Brutin, D., Zhu, Z.Q. & Rahli, O.** (2009) Sessile Drop in Microgravity: Creation, Contact Angle and Interface, *Micrograviti Sci. Technol.*, 21(1), pp. 107-114.
15. **Abel, G., Ross, G.G. & Andrzejewski, L.** (2004) Transformation of a disturbed sitting drop, *Adv. Space Res.*, 33(8), pp. 1431-1438.
16. **Kabov, O.A. & Zaitsev, D.V.** (2013) Influence of wetting hysteresis on the drop spreading under the gravity effect, *Dokl. Akad. nauk*, 451(1), pp. 37-40 (in Russian).
17. **Ignatyev, A.A. & Gotovtsev, V.M.** (2020) Transformation of a disturbed sitting drop, *Smart Composite in Construction*, 1(1), pp. 39-43 [online]. Available at: [http://comincon.ru/index.php/tor/V1N1\\_2020](http://comincon.ru/index.php/tor/V1N1_2020) (accessed 10.10.2023) (in Russian).
18. **Loytsyanskiy, L.G.** (1978) *Mechanics of fluid and gas: textbook*. Moscow: Nauka (in Russian).
19. **Kaplan, I.G.** (1982) *Introduction to the theory of intermolecular interactions*. Moscow: Nauka (in Russian).
20. **Rusanov, A.I.** (1967) *Phase equilibria and surface phenomena*. L.: Khimiya (in Russian).
21. **Verkholomov, V.K.** (2017) Two Concepts While Determining Contact Angle Value, *Modern Sci.*, (1), pp. 8-13.
22. **Tovbin, Yu.K.** (1990) *Theory of physical and chemical processes at the gas-solid boundary*. M.: Nauka (in Russian).
23. **Ignatyev, A.A., Gotovtsev, V.M. & Razgovorov, P.B.** (2021) Theoretical background for simulation of physical processes in the interfacial layer «solid-liquid», *J. Phys.: Conf. Ser.*, (1889), pp. 022077. DOI: 10.1088/1742-6596/1889/2/022077.
24. **Ignatyev, A.A., Gotovtsev, V.M. & Razgovorov, P.B.** (2021) Theoretical background for simulation of the interfacial layer «liquid-gas», *J. Phys.: Conf. Ser.*, (1889), pp. 022088. DOI: 10.1088/1742-6596/1889/2/022088.

Received 26.10.2023

Approved after reviewing 05.12.2023

Accepted 12.12.2023