

## О СВЯЗИ МЕЖФАЗНОЙ ЭНЕРГИИ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ТВЕРДОЕ ТЕЛО- РАСПЛАВ С ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИЕЙ ОТДЕЛЬНЫХ ФАЗ

Дохов М.П.

*Кабардино-Балкарская государственная сельскохозяйственная академия  
Нальчик, КБР, Россия*

Отсутствие прямых экспериментальных методов измерения межфазной энергии на границе раздела твердое тело-расплавы вызывает необходимость проведения косвенных измерений. В частности, в эксперименте относительно легко измеряются поверхностная энергия расплава  $\sigma_{pn}$  и угол смачивания расплавом поверхности твердого тела  $\theta$ . Затем, используя уравнение Юнга рассчитывают поверхностную энергию твердого тела  $\sigma_{tn}$  и межфазную энергию на границе раздела твердое тело-расплавы. К сожалению, попытки вывести соотношение, связывающее величину межфазной энергии на границе раздела твердое тело-расплавы с поверхностной энергией гомогенных фаз, до настоящего времени не увенчались успехом. Не установлена также прямой связи между краевым углом и межфазной энергией на границе раздела твердая фаза-расплавы. Поэтому в литературе используются различные приближения. В частности, широко используется приближение Рэлея, связывающее межфазную энергию  $\sigma_{tp}$  с поверхностной энергией твердой  $\sigma_{tn}$  и жидкой  $\sigma_{pn}$  фаз [1-4] и др.

$$S_{mp} = (\sqrt{S_{mn}} - \sqrt{S_{pn}})^2 \quad (1)$$

В настоящей работе, используя приближение Рэлея, развита термодинамическая теория, позволяющая произвести расчеты межфазных характеристик в конденсированных системах.

Суть приближения Рэлея состоит в предположении о том, что изменение свободной энергии адгезии  $\Delta F_{ij}^a$  есть геометрическое среднее между изменениями свободной энергии гомогенных фаз

$$\Delta F_{ij}^a = (\Delta F_i \Delta F_j)^{1/2}, \quad (2)$$

где  $i$  и  $j$  – относятся к отдельным фазам в частности, в случае контакта твердого тела и расплава,  $i$  означает твердое тело, а  $j$  – расплав (жидкость).

Над теоретическим обоснованием предположения Рэлея в последнее время работали многие авторы. В частности, в работах [1-4] и др. подробно рассмотрены возможные варианты его применения к расчету удельной свободной поверхностной энергии различных типов твердых тел.

Анализ расчетных формул, выведенных в литературе с применением приближения Рэлея показывает, что численные результаты  $\sigma_{tn}$  и  $\sigma_{tp}$ , полученные с их помощью, не согласуются с экспериментальными данными.

Недостатком работ, в которых используется приближение Рэлея, по нашему мнению, является игнорирование изменения всех поверхностей при образовании границ раздела фаз.

В настоящей работе для устранения противоречий результатов теории с экспериментом, при выводе формул для  $\sigma_{tn}$  и  $\sigma_{tp}$ , нами учтены последние замечания.

Как известно, при образовании новых поверхностей, изменение свободной энергии (численно равно работе образования новых поверхностей раздела фаз), равно

$$\Delta F_{ij} = \Delta F_i + \Delta F_j - \Delta F_{ij}^a, \quad (3)$$

где  $\Delta F_i$ ,  $\Delta F_j$  – изменения свободных энергий при образовании гомогенных фаз,  $\Delta F_{ij}$  – гетерогенной фазы,  $\Delta F_{ij}^a$  – изменение свободной энергии адгезии  $i$ -ой и  $j$ -ой фаз. В связи с тем что теория образования гомогенных и гетерогенных фаз в настоящее время хорошо разработана и является общеизвестной, поэтому запишем без вывода, получающиеся формулы для работ образования критических зародышей соответствующих фаз

$$\Delta F_{TP} = \frac{16ps_{TP}^3}{3\Delta m_{TP}^2}, \quad \Delta F_{TP} = \frac{16ps_{TP}^3}{3\Delta m_{TP}^2}, \quad \Delta F_{pn} = \frac{16ps_{pn}^2}{3\Delta m_{pn}^2} \quad (4)$$

Из формулы (2), получим

$$\Delta F_{Tp}^a = (\Delta F_{i_i} \Delta F_{j_j})^{1/2} = \frac{16\rho}{3\Delta m_{Tn}^{\Delta} m_{pn}} (S_{Tn}^3 \cdot S_{pn}^3)^{1/2} \quad (5)$$

В формулах (4) и (5)  $\Delta\mu$  - изменение химического потенциала одной частицы, отнесенный к единице объема соответствующей фазы.

Подставляя (4) и (5) в (3), после некоторых преобразований, получим формулу для расчета  $\sigma_{np}$ .

$$S_{III} = S_{pn} (1 + \cos q)^2 \quad (6)$$

Подстановка формулы (6) в уравнение Юнга для косинуса краевого угла, дает формулу для расчета межфазной энергии между твердой и жидкой фазами  $\sigma_{тр}$ .

$$\sigma_{тр} = \sigma_{pn} (1 + \cos\theta + \cos^2\theta). \quad (7)$$

Отметим, что формулы (6) и (7) позволят определить межфазные энергии  $\sigma_{np}$  и  $\sigma_{тр}$  из данных экспериментально измеримых величин  $\sigma_{pn}$  и  $\theta$  – поверхностной энергии расплава и угла смачивания в системах, в которых отсутствуют химические реакции между твердым телом и расплавом (жидкостью).

Используя формулы (6) и (7) – составлена таблица относительных значений межфазных энергий в зависимости от краевого угла  $\theta$ , что позволит исследователям быстро и с достаточной для практики точностью, произвести расчеты  $\sigma_{np}$  и  $\sigma_{тр}$  для различных типов твердых тел, находящихся в контакте с различными расплавами.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Good R.J, Girifalco L.A A theory for estimation of surface and interfacial energies. Estimation of surface energies of solids from contact angle data // j. phys. chem. 1960. V.64.P.561-565.
2. Zisman W.A. Relation of the equilibrium contact angle to liquid and solid constitution// Advan. Chem.Ser.1964.№43.p.1-51.
3. Rhee S.K. A method for determining surface energies of solids: temperature-variant contact angle method// Mater. Sci-and Eng. 1977.V.16,№1.P 45-51.
4. Good J. Surface free Energy of solids and liquids: Thermodynamic, molecular and structure// J. of colloid and interface Sci. 1977. V.59, №3. P 398-419.